



Transferts radiatifs dans les écoulements hypersoniques de rentrée atmosphérique terrestre

Jean-Michel Lamet

► To cite this version:

Jean-Michel Lamet. Transferts radiatifs dans les écoulements hypersoniques de rentrée atmosphérique terrestre. Autre. Ecole Centrale Paris, 2009. Français. NNT : 2009ECAP0026 . tel-00453309

HAL Id: tel-00453309

<https://theses.hal.science/tel-00453309>

Submitted on 4 Feb 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.

THÈSE

présentée par

Jean-Michel LAMET

pour l'obtention du

GRADE de DOCTEUR

Formation doctorale : Energétique

Laboratoire d'accueil : Laboratoire d'Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C) du CNRS et de l'ECP

Transferts radiatifs dans les écoulements hypersoniques de rentrée atmosphérique terrestre

Soutenue le 21 Septembre 2009

Composition du jury :	Mme	PERRIN	M.-Y.	Rapporteur
		STÉHLÉ	C.	
	MM.	SOUFIANI	A.	
		SURZHIKOV	S. T.	
		TESSÉ	L.	
		TRAN	Ph.	
		VÉRANT	J.-L.	
		VERVISCH	P.	Rapporteur

Ecole Centrale des Arts et Manufactures
Grand Etablissement sous tutelle
du Ministère de l'Education Nationale
Grande Voie des Vignes
92295 CHATENAY MALABRY Cedex
T el. : 33 (1) 41 13 10 00 (standard)
T el ex : 634 991 F EC PARIS

**Laboratoire d'Energétique Moléculaire
et Macroscopique, Combustion (E.M2.C.)**

UPR 288, CNRS et École Centrale Paris
Tél. : 33 (1) 41 13 10 31
Télécopie : 33 (1) 47 02 80 35

2009 - xx

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'une collaboration entre l'ONERA et le laboratoire EM2C à travers laquelle de nombreuses personnes ont contribué au bon déroulement de cette thèse. Je tiens, dans les trop courts paragraphes qui suivent, à leur faire part de toute ma gratitude.

Tout d'abord, mes premières pensées vont à Marie-Yvonne Perrin, ma directrice de thèse, Anouar Soufiani et Philippe Rivière qui m'ont accordé leur confiance et qui m'ont encadré au quotidien au sein du laboratoire EM2C. De part leurs compétences, leurs conseils avisés et leurs grandes disponibilités tout au long de ma thèse, ils m'ont permis d'effectuer mes travaux dans les meilleures conditions. Ce fut un réel plaisir d'avoir pu travailler avec eux et d'avoir pu profiter de leur savoir. Pour toutes ces raisons, je leur adresse avec un peu de nostalgie mes plus sincères remerciements.

Je tiens à remercier l'ONERA pour son soutien financier, mais aussi surtout pour son personnel qui m'a également accompagné pendant mes travaux. Je pense en premier lieu à Lionel Tessé qui s'est beaucoup investi pendant la dernière année de ma thèse et qui m'a apporté un soutien scientifique indispensable pour achever mes travaux. Outre pour son apport dans cette thèse, je lui exprime toute ma gratitude pour la confiance qu'il m'a accordée par la suite, en appuyant ma candidature au sein de l'ONERA. Je n'oublie pas Olivier Rouzaud qui m'a initialement choisi pour effectuer cette thèse et Jean-Luc Véran pour son encadrement, certes à distance, mais ponctuellement présent.

Je remercie les membres du jury de thèse : Pierre Vervisch qui m'a fait l'honneur de présider le jury et qui a accepté avec Chantal Stéhlé la charge de rapporter la thèse, Serguey Surzhikov qui a accepté de faire le déplacement depuis Moscou pour être examinateur ainsi que Philippe Tran.

J'ai une pensée amicale pour l'ensemble du personnel du laboratoire EM2C, doctorants, post-doctorants et permanents, qui ont contribué à créer une ambiance de travail chaleureuse et conviviale. J'adresse un remerciement particulier aux « athlètes » du laboratoire avec qui les tours du parc de Sceaux ont été fort sympathiques.

Un dernier mot pour ma famille et mes amis d'enfance qui ont toujours été présents au cours de mes études ; je les remercie d'avoir fait le déplacement pour ma soutenance de thèse, un jour ô combien important pour moi.

Résumé

Le dimensionnement des protections thermiques des véhicules spatiaux nécessite la connaissance des flux de chaleur à la surface de l'engin. Pour le type de rentrée atmosphérique étudié dans ces travaux (rentrée terrestre à 10-12 km/s ou plus), le rayonnement contribue de manière significative à l'échauffement pariétal. Nous présentons dans cette étude, le développement et la mise en œuvre de modèles et d'outils numériques permettant de prédire les transferts radiatifs dans les couches de choc de rentrée terrestre hors d'équilibre en géométrie multi-dimensionnelle.

Nous avons d'abord formulé dans une approche raie par raie l'expression des propriétés radiatives relatives à des plasmas de $N_2 - O_2$ hors d'équilibre. Cette formulation est adaptée à une modélisation multi-température et/ou une modélisation par niveau électronique du déséquilibre thermique. Les expressions obtenues ont été mises en œuvre sur le cas d'épreuve FIRE II afin de déterminer les luminances au point d'arrêt pour quatre points de trajectoire. Les résultats montrent un bon accord global avec les données en vol dans les différents intervalles de mesure allant de l'IR à l'UV, hormis pour le point de rentrée le plus hors d'équilibre. Les calculs montrent également que la partie VUV du spectre contribue de manière très importante à la luminance à la paroi et que la prise en compte du déséquilibre chimique est primordiale.

Un modèle approché de propriétés radiatives a ensuite été développé sur la base d'un modèle statistique à bandes étroites (MSBE) pour les systèmes électroniques moléculaires optiquement non minces (dans notre application), d'un modèle à coefficients d'émission et d'absorption moyennés par bande étroite pour les systèmes électroniques optiquement minces et les continua, et d'une approche raie par raie pour les transitions lié-lié atomiques. La mise en œuvre de cette modélisation hybride a nécessité une formulation adaptée de l'ETR pour tenir compte du déséquilibre et des corrélations spectrales. Des validations systématiques du MSBE, contribution par contribution, ont été réalisées. Le modèle hybride a ensuite été validé sur le cas d'épreuve FIRE II par rapport à des calculs raie par raie.

Le modèle hybride a été implémenté dans le solveur radiatif ASTRE, code basé sur une approche de Monte Carlo. L'implémentation a été validée par rapport à une méthode de lancer de rayons sur une configuration plans tangents. Des calculs 3D de rayonnement ont ensuite été réalisés sur le cas d'épreuve FIRE II. Les résultats montrent des écarts de l'ordre de 10-15 % sur les flux au point d'arrêt par rapport aux résultats obtenus dans l'approximation des plans tangents habituellement utilisée dans la littérature. Les outils développés permettent d'obtenir des résultats relativement bien convergés (5 %) en géométrie tri-dimensionnelle (100000 cellules) en un temps CPU raisonnable permettant d'envisager des calculs couplés à terme.

Abstract

Thermal protection design of spacecraft requires the knowledge of heat fluxes at the vehicle surface. For the kind of atmospheric entry considered in this work (earth re-entry at 10-12 km/s or more), radiation significantly contributes to the surface heating. We present in this study, the development and the use of models and numerical tools to predict radiative transfers in the shock layers encountered in earth re-entry in nonequilibrium conditions and multi-dimensionnal geometry.

First of all, we have formulated, in a line by line approach, the expressions of radiative properties of $N_2 - O_2$ plasmas in nonequilibrium conditions. This formulation is suitable for a multi-temperature and/or a electronic state to state description of the thermal nonequilibrium. It has been used to simulate the test case FIRE II in order to determine radiative intensity at the stagnation point for four trajectory points. Results show a good agreement with flight data for different spectral measurement ranges from IR to UV, except for the trajectory point in strong nonequilibrium conditions. Calculations show moreover that VUV spectral range contributes significantly to the intensity at the wall and that taking into account chemical nonequilibrium is crucial.

An approximate model of radiative properties has been developed on the basis of a statistical narrow band (SNB) model for optically thick (in our application) electronic molecular systems, of a box model for optically thin electronic molecular systems and continua, and of a line by line approach for atomic lines. The use of the hybrid model has required a suitable RTE formulation to take into account nonequilibrium and spectral correlations. Systematic validations of the SNB model for each contribution have been carried out. The hybrid model has then been validated on the test case FIRE II against line by line calculations.

The hybrid model has been implemented in the ASTRE radiative solver, which is based on a Monte Carlo approach. The implementation has been validated in comparison with a ray tracing method on a tangent slab configuration. 3D radiative calculations have been then carried out on the test case FIRE II. Results show discrepancy of 10-15 % on the fluxes at the stagnation point with results obtained in the tangent slab approximation which is usually used in the litterature. The developed tools allow to obtain relatively well converged (5 %) results in tri-dimensional geometry (100000 cells) with a reasonable CPU time enabling to consider coupled calculations in futur works.

Table des matières

Introduction	ix
I Modélisation des écoulements de rentrée hypersonique terrestre	1
I.1 Introduction	2
I.2 Caractérisation et description des écoulements de rentrées hypersoniques . .	2
I.3 Système d'équations général	6
I.3.1 Équations de Navier-Stokes adaptées au déséquilibre thermochimique	6
I.3.2 Équation de transfert radiatif	12
I.3.3 Récapitulation du système d'équations	13
I.4 Les différentes approches pour modéliser les écoulements de rentrée hyper- sonique terrestre	14
I.4.1 Modélisation cinétique du déséquilibre thermique et chimique	15
I.4.2 Prise en compte du rayonnement	25
I.5 Conclusion et objectifs de thèse	36
II Propriétés radiatives de plasmas hors d'équilibre	39
II.1 Introduction	40
II.2 Formulation des propriétés radiatives pour des milieux hors d'équilibre . . .	40
II.2.1 Transitions lié-lié	42
II.2.2 Continuum	48
II.3 Application à des écoulements de rentrée atmosphérique terrestre	55
II.3.1 Le projet FIRE	55
II.3.2 Champs aérothermochimiques	57
II.3.3 Transferts radiatifs sur ligne d'arrêt	61
II.3.4 Résultats et analyses	61
II.4 Conclusion	75
III Modèle de propriétés radiatives pour les plasmas d'air hors d'équilibre	77
III.1 Introduction	79
III.2 Modèles approchés classiques de propriétés radiatives	80
III.2.1 Modèles globaux	81
III.2.2 Modèles de bandes	84
III.2.3 Discussion	90
III.3 Formulation de l'équation de transfert radiatif avec un MSBE dans les mi- lieux hors ETL	91
III.3.1 Épaisseurs optiques des systèmes	92
III.3.2 Corrélations spectrales	94
III.3.3 Formulation de l'ETR	102

III.4	Formulation et construction d'un MSBE	103
III.4.1	Formulation d'un MSBE en milieu uniforme	104
III.4.2	Formulation du MSBE en milieu non uniforme	118
III.4.3	Construction du MSBE	123
III.5	Validations et limites du MSBE	140
III.5.1	Milieux uniformes	141
III.5.2	Milieux non uniformes	150
III.6	Application et validation sur un cas de rentrée atmosphérique	154
III.6.1	Équation de transfert radiatif discrétisée et adaptée à la modélisation hybride	155
III.6.2	Effet de l'épaisseur optique des cellules émettrices	157
III.6.3	Comparaison modèle hybride et approche raie par raie	159
III.6.4	Temps de calcul	163
III.7	Conclusion	164
IV	Modélisation des transferts radiatifs	167
IV.1	Introduction	168
IV.2	Expressions générales de la puissance radiative volumique et du flux radiatif surfaccique	168
IV.3	La méthode de Monte Carlo dans le code ASTRE	170
IV.3.1	Généralité sur les méthodes de Monte Carlo	170
IV.3.2	Généralités sur le code ASTRE	171
IV.4	Implémentation du modèle approché de rayonnement dans le code ASTRE	174
IV.4.1	Formulation de l'ETR	175
IV.4.2	Méthodologie numérique	178
IV.4.3	Étapes et procédures numériques d'un calcul type	186
IV.5	Validation sur une configuration plans tangents	188
IV.5.1	Champs aérothermochimiques	188
IV.5.2	La méthode de lancer de rayons	192
IV.5.3	Mise en œuvre du code ASTRE	193
IV.5.4	Comparaison méthode de lancer de rayons/code ASTRE	194
IV.6	Application 3D : FIRE II	202
IV.6.1	Calcul sur un secteur angulaire de la couche de choc	203
IV.6.2	Calcul global de la couche de choc	207
IV.7	Conclusion	210
	Conclusion et perspectives	213
A	Fonctions de partition	219
A.1	Fonctions de partition atomiques	219
A.2	Fonctions de partition diatomiques	222
B	Description succincte du code hydrodynamique CelHyo2D	225
B.1	Système d'équations	225
B.2	Modélisation physico-chimique	227
B.2.1	Cinétique chimique	227
B.2.2	Couplage chimie/vibration	227
B.2.3	Modèle de relaxation	229

B.2.4	Propriétés de transport	231
Références		235

Introduction

Depuis le début de l'exploration spatiale et de la maîtrise de l'espace, les véhicules spatiaux sont souvent amenés à effectuer des (r)entrées dans des atmosphères planétaires. Tel est le cas par exemple des missions d'exploration qui nécessitent un atterrissage sur sol, des missions de mises en orbites par aérocapture de sondes/satellites pour observation, ou bien encore des missions comprenant un retour sur Terre.

Dans le cadre du programme Aurora (cf. figure 1), vaste campagne de missions d'exploration du système solaire menée par l'ESA, dont l'objectif principal est de réaliser une mission habitée vers Mars dans les années 2030, la maîtrise des phases de (r)entrées atmosphériques est importante pour garantir le succès de certaines missions. En effet, les deux principales missions du programme que sont ExoMars (orbiteur et atterrisseur martien) et Mars Sample Return (retour d'échantillon du sol martien) mettront en jeu des phases d'aérocapture de sondes et un retour sur Terre.

Des phases de (r)entrées atmosphériques sont envisagées également dans d'autres programmes spatiaux, c'est le cas notamment dans les missions de ravitaillement de la station spatiale internationale ISS (on peut parler dans ce cas de rentrée). En prévision de l'arrêt des navettes spatiales américaines aux alentours de 2015, l'ESA a élaboré, en collaboration avec EADS, un véhicule de transfert automatique (ATV, *Automated Transfer Vehicle*) non habité capable d'effectuer des opérations de ravitaillement de la station orbitale. *Jules Vernes* a été le nom du premier ATV à ravitailler l'ISS en 2008. Le retour sur Terre des ATV n'est pour l'instant pas envisagé et, une fois la mission effectuée, ils sont (et seront) désintégrés lors d'une rentrée atmosphérique destructive « contrôlée ». Cependant, l'ESA espère faire de l'ATV un moyen de transport de fret assurant l'aller-retour « sol terrestre/station » et à terme un véhicule de transport d'équipage (CTV, *Crew Transportation Vehicle*). Les phases de rentrée atmosphérique seront donc primordiales. La figure 2 montre, à titre illustratif, une vue d'artiste du CTV. La partie centrale servirait de capsule de rentrée.

Pour de telles missions, les véhicules en approche des planètes ont généralement des vitesses hypersoniques. Le succès de la mission (mise en orbite ou atterrissage) passe alors par une phase de freinage de l'appareil. Un équipement rétro-propulsif étant souvent trop lourd et trop consommateur en carburant, le freinage est alors réalisé par frottement dans les couches de l'atmosphère. Cette phase est critique pour l'appareil car il subit un important échauffement pariétal. Afin de préserver l'intégrité de l'appareil et de sa charge utile, un système de protections thermiques équipe le véhicule. Le dimensionnement de tels systèmes repose sur la prédiction de la charge thermique reçue par l'appareil lors de la phase de rentrée.

Pour prédire les flux de chaleur, les expérimentations en vol ou au sol et la simulation numérique sont les deux moyens qui peuvent être mis en oeuvre. Cependant pour des

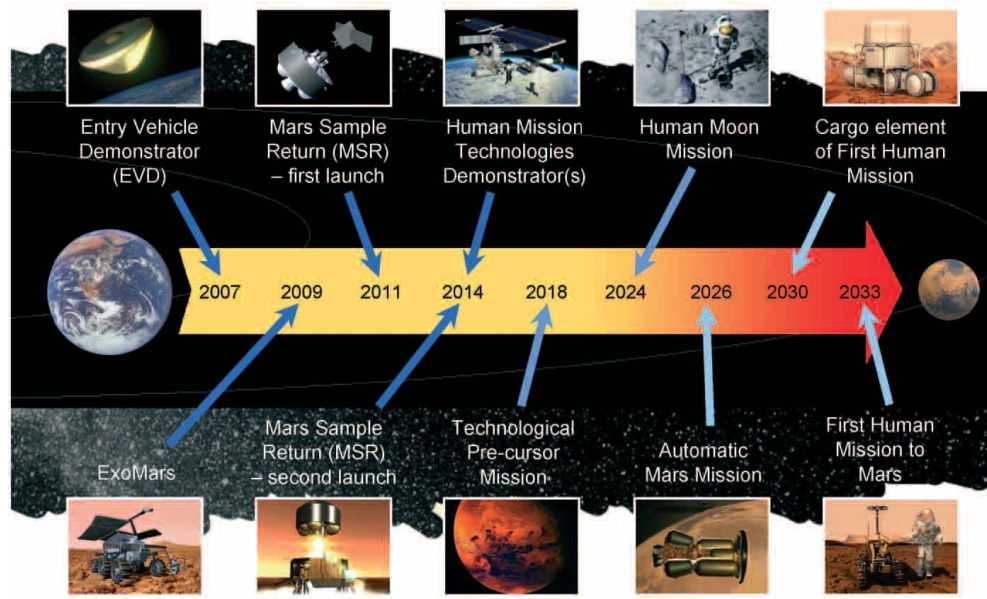


FIG. 1: Programme d'exploration spatiale Aurora mis en place en 2004 par l'Agence Spatiale Européenne (ESA).

raisons de coût évidentes, le développement d'outils numériques et les essais en soufflerie sont privilégiés par rapport aux essais à grande échelle. La figure 3 montre, à titre d'exemple, la visualisation par FFE (Fluorescence excitée par Faisceaux d'Électrons) de l'écoulement autour d'une maquette, représentant à l'échelle $1/50^e$ le Mars Sample Return Orbiter. Cet essai a été obtenu dans la soufflerie hypersonique à faible nombre de Reynolds R_{5Ch} de l'ONERA [1].

Lors des rentrées atmosphériques, l'échauffement de la paroi est d'origine conducto-convective à cause des frottements entre les gaz de l'atmosphère et la surface de l'engin mais est aussi d'origine radiative. En effet, pour des rentrées à vitesses hypersoniques, un plasma à très haute température se forme autour de l'engin dans la couche de choc. Celui-ci émet un important rayonnement qui contribue de manière significative à l'échauffement de la paroi. Ceci a été mis en évidence lors d'essais en vol au cours du programme Apollo dans les années 60. Plusieurs missions ont consisté à la mise en orbite d'une sonde afin de reproduire une rentrée atmosphérique terrestre à très haute vitesse correspondant à un retour lunaire. Dans ces conditions de rentrée, ces quelques expérimentations ont permis de quantifier le flux convectif et le flux radiatif dans l'infrarouge et le visible. Ce flux radiatif pouvait atteindre jusqu'à la moitié de la charge thermique totale reçue par la paroi.

La modélisation de l'hydrodynamique des écoulements hypersoniques est un problème complexe. Le milieu est réactif et les modes d'énergie des particules ne sont pas nécessairement à l'équilibre thermique. On parle alors de déséquilibre chimique et thermique local. Depuis les années 80 des plates-formes de calculs numériques ont été développées, notamment par la NASA et différents organismes de recherche européens dont le TsAGI, le VKI, et l'ONERA plus récemment au début des années 90. D'abord mis en place pour simuler la charge conducto-convective reçue par les boucliers thermiques, les codes de calculs ont peu à peu intégré les phénomènes radiatifs. Cependant la prise en compte du rayonnement de la couche de choc et en particulier son interaction avec l'écoulement reste encore

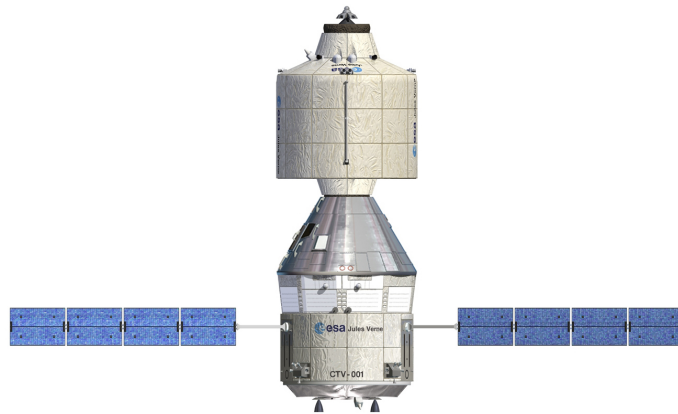


FIG. 2: *Vue d'artiste du concept envisagé pour le CTV (Crew transport vehicle) en 2008 [2].*

aujourd'hui difficile à modéliser. Les processus radiatifs mis en jeu lors de (r)entrées sont nombreux et ont lieu dans un milieu optiquement non mince et pouvant être hors ETL (équilibre thermodynamique local) rendant le calcul des propriétés radiatives de la couche de choc complexe et les simulations de transferts radiatifs multi-dimensionnels encore rares. Au niveau de l'interaction rayonnement/écoulement, les processus radiatifs interviennent au même titre que les processus collisionnels sur le peuplement des niveaux d'énergie des particules et peuvent entraîner par ailleurs un phénomène de « refroidissement radiatif ». Les approches multi-températures généralement utilisées dans la littérature s'avèrent partiellement insuffisantes pour modéliser de tels phénomènes. Dès lors, depuis une dizaine d'années, l'élaboration de cinétiques détaillées dites niveau par niveau avec prise en compte du rayonnement est devenue un challenge pour modéliser les écoulements de rentrée.

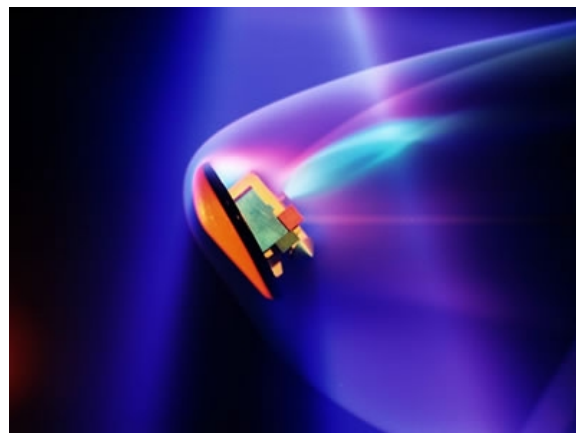


FIG. 3: *Visualisation par FFE (Fluorescence excitée par Faisceaux d'Électrons) de l'écoulement autour du MSRO. Essai dans la soufflerie R5Ch. Figure tirée de la Réf. [1]*

Dans ce contexte et dans le cadre des rentrées terrestres, on présente dans cette étude des modèles et des outils numériques développés pour déterminer les transferts radiatifs de plasmas d'air à l'ETL ou hors ETL dans des géométries multi-dimensionnelles. La modélisation retenue est adaptée à une description niveau par niveau électronique. Ce travail est

donc une étape avant d'envisager l'étude de l'interaction rayonnement/écoulement.

Le corps de ce manuscrit est composé de quatre chapitres.

La premier chapitre fait un état de l'art des études menées sur la modélisation des écoulements de rentrée atmosphérique. Dans un premier temps, les principaux processus physico-chimiques intervenant dans les couches de choc γ sont décrits. On s'intéresse ensuite à la modélisation cinétique du déséquilibre chimique et thermique et à la prise en compte du rayonnement. En conclusion de cette étude, essentiellement bibliographique, sont énoncés les objectifs de la thèse.

Le deuxième chapitre est consacré à la modélisation des propriétés radiatives dans les plasmas d'air hors d'équilibre avec une approche raie par raie. Ce travail s'appuie sur des travaux antérieurs réalisés au laboratoire EM2C sur le rayonnement de plasmas d'air à l'équilibre. Une extension des résultats précédemment obtenus est présentée pour les milieux hors ETL et dans la mesure du possible, car dépendant des données spectroscopiques disponibles dans la littérature, pour une description niveau par niveau électronique des particules. La modélisation est ensuite testée, sur le cas d'épreuve FIRE II. Des calculs de transfert à haute résolution sur la ligne d'arrêt sont réalisés. La luminance incidente calculée au point d'arrêt est comparée aux données en vol. L'étude montre également quels sont les processus radiatifs dominants.

Les calculs à haute résolution étant prohibitifs en termes de ressources informatiques, ils sont difficilement applicables pour simuler les transferts radiatifs dans des géométries multi-dimensionnelles et/ou pour envisager à terme le couplage entre le rayonnement et l'écoulement. Pour pallier cette difficulté, un modèle approché de propriétés radiatives pour les milieux hors ETL est présenté dans le chapitre III. Le modèle est un modèle hybride, basé sur un modèle statistique à bandes étroites (MSBE) pour les systèmes moléculaires électroniques optiquement non minces, un modèle à coefficient d'émission et d'absorption moyen (« box model ») pour les continua et les systèmes moléculaires électroniques optiquement minces et une approche raie par raie pour les raies atomiques. Le développement du MSBE a nécessité au préalable une formulation adaptée de l'ETR permettant de tenir compte des corrélations spectrales pour les milieux hors ETL. Le modèle hybride est ensuite mis en œuvre sur le cas d'épreuve FIRE II. Les résultats sur la ligne d'arrêt sont comparés à ceux du chapitre II obtenus avec une approche raie par raie.

Le dernier chapitre est dédié à l'implémentation du modèle hybride dans le solveur ASTRE, code de transfert radiatif développé par l'ONERA basé sur une approche de Monte Carlo. Cette implémentation a nécessité, au préalable, de définir une méthodologie numérique adaptée au modèle hybride (modèle de bandes et approche raie par raie). La validation de l'implémentation est faite par rapport à une méthode de lancer de rayons dans une configuration plans tangents. Le code ASTRE est ensuite mis en œuvre pour simuler le cas FIRE II en 3D.

Chapitre I

Modélisation des écoulements de rentrée hypersonique terrestre

Table des matières

I.1	Introduction	2
I.2	Caractérisation et description des écoulements de rentrées hypersoniques	2
I.3	Système d'équations général	6
I.3.1	Équations de Navier-Stokes adaptées au déséquilibre thermochimique	6
I.3.2	Équation de transfert radiatif	12
I.3.3	Récapitulation du système d'équations	13
I.4	Les différentes approches pour modéliser les écoulements de rentrée hypersonique terrestre	14
I.4.1	Modélisation cinétique du déséquilibre thermique et chimique . .	15
I.4.1.1	Approche niveau par niveau	15
I.4.1.2	Approche hybride	16
I.4.1.3	Approche multi-température complète	19
I.4.2	Prise en compte du rayonnement	25
I.4.2.1	Processus radiatifs	27
I.4.2.2	Démarche et outils de calcul du rayonnement et de son interaction avec l'écoulement	28
I.5	Conclusion et objectifs de thèse	36

I.1 Introduction

Il s'agit dans ce chapitre de décrire les processus physico-chimiques ayant lieu dans les écoulements de rentrées hypersoniques et hyperenthalpiques ainsi que les modélisations envisagées dans la littérature pour simuler de tels écoulements.

On s'intéresse de manière générale dans la section I.2 à la caractérisation et à la description des écoulements de rentrées atmosphériques. La section I.3 introduit le système d'équations général à résoudre et la section I.4 indique les différentes approches envisageables et envisagées dans la littérature pour modéliser le déséquilibre thermo-chimique et la prise en compte du rayonnement. La dernière section conclut sur cette étude essentiellement bibliographique et énonce les objectifs de la thèse.

I.2 Caractérisation et description des écoulements de rentrées hypersoniques

Le régime de l'écoulement autour d'un corps de rentrée est lié à la vitesse, l'altitude, la composition de l'atmosphère et la géométrie de l'engin. Pour caractériser l'écoulement, trois nombres adimensionnels sont couramment utilisés : les nombres de Mach, Reynolds et Knudsen.

- Le nombre de Mach M permet de caractériser le régime de vitesse. Il désigne le rapport entre la vitesse locale de l'écoulement u_0 et la vitesse locale du son dans le milieu c_0 :

$$M = \frac{u_0}{c_0}. \quad (\text{I.1})$$

On distingue généralement quatre régimes de vitesse :

- le régime subsonique, $M \leq 0.8$, pour lequel le fluide est faiblement compressible.
- le régime transsonique, $0.8 < M \leq 1.2$, correspondant à un régime transitoire. La zone de transition est caractérisée par la présence simultanée de régions subsoniques et supersoniques.
- le régime supersonique, $1.2 < M \leq 5$, pour lequel une onde de choc se forme au nez ou en amont de l'obstacle. À la traversée de cette onde de choc, les grandeurs aérothermochimiques du fluide subissent une variation brutale.
- le régime hypersonique, $5 < M$, plus intense que le précédent où l'écoulement est modifié par des processus physico-chimiques tels que la dissociation, l'ionisation, le déséquilibre vibrationnel.

• Le nombre de Reynolds Re , qui représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses, caractérise le comportement dynamique de l'écoulement :

$$Re_L = \frac{\rho u_0 L}{\mu}, \quad (I.2)$$

où ρ est la masse volumique du fluide, μ sa viscosité dynamique et L une longueur caractéristique de l'obstacle. On distingue trois principaux régimes :

- le régime laminaire, $Re_L < 10^5$, pour lequel les forces de viscosité sont prépondérantes. Cette valeur limite est valable pour des écoulements externes.
- le régime transitoire pour lequel l'écoulement alterne entre des régimes laminaire et turbulent.
- le régime turbulent pour des nombres de Reynolds beaucoup plus grand, pour lequel apparaissent des phénomènes tridimensionnels, à caractère aléatoire, irréguliers dans l'espace et le temps.

• Enfin, le nombre de Knudsen Kn permet de caractériser le régime d'écoulement. Il est défini par le rapport

$$Kn = \frac{l}{L}, \quad (I.3)$$

où l est le libre parcours moyen des particules *i.e.* la distance moyenne que parcourt une particule entre deux collisions. Dans le cadre de rentrée atmosphérique terrestre, on distingue trois régimes :

- le régime continu, $Kn \leq 10^{-3}$, pour lequel la pression et la densité sont suffisamment grandes pour définir des grandeurs macroscopiques caractérisant l'écoulement. L'évolution de l'écoulement est alors décrite par les équations de Navier-Stokes (NS).
- le régime intermédiaire, $10^{-3} \leq Kn < 1$ pour des altitudes comprises entre 80 km et 100 km. L'écoulement est généralement décrit par les équations NS mais requiert en plus des conditions de glissement aux parois.
- le régime raréfié, $1 \leq Kn$, pour lequel la densité et la pression sont très faibles. Dans ce cas, il est nécessaire de passer par une approche microscopique pour décrire l'évolution du fluide (équations de Boltzmann). Ce type d'écoulement est généralement rencontré en très hautes altitudes, supérieures à 100 km, où la pression atmosphérique est faible.

La figure I.1 montre un exemple typique de l'évolution de l'altitude d'un engin de rentrée terrestre hypersonique en fonction de sa vitesse. Les différents régimes d'écoulement rencontrés pendant la descente sont indiqués : de l'écoulement hypersonique, raréfié et laminaire dans les hautes couches de l'atmosphère à l'écoulement subsonique et turbulent en phase d'approche. Des points de trajectoires correspondant à des expérimentations de référence en vol hypersonique (sondes RAM-C II, Apollo 4 et FIRE II) sont également représentés sur la figure I.1. RAM-C II [3] est une sonde de type sphère-cône lancée dans les années soixante pour étudier le phénomène de « black-out¹ ». Les deux autres sondes FIRE II [4] et Apollo 4 [5] ont également été lancées dans les années 60 pendant la campagne Apollo pour effectuer principalement des mesures radiatives à la paroi des sondes. Ces expériences ont été menées afin de simuler des conditions de vol correspondant à un retour lunaire. Une description détaillée de l'expérience FIRE II fait l'objet de la section II.3.1.

Le tableau I.1 récapitule les conditions de certains points de vol de ces trois sondes et donne les nombres de Mach, Reynolds et Knudsen associés à chaque point de trajectoire. Il

¹Ce phénomène correspond à la dégradation du signal radio entre un engin de rentrée et le sol. Il est engendré par l'ionisation de l'écoulement autour de la sonde

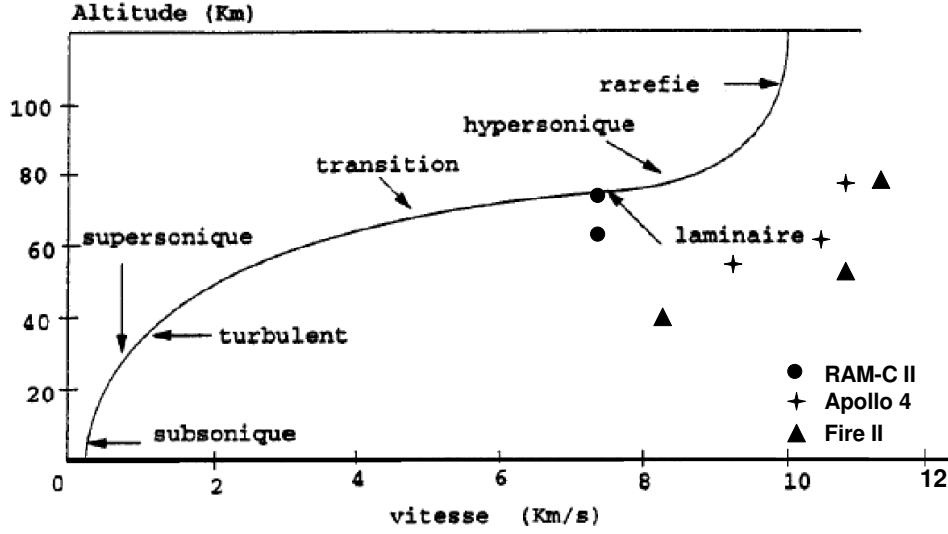


FIG. I.1: Caractérisation de la nature de l'écoulement en fonction de l'altitude et de la vitesse pour des conditions typiques de rentrées lunaires. Figure adaptée de la Réf. [6].

TAB. I.1: Conditions en vol pour quelques points de trajectoire des sondes expérimentales RAM-C II, Apollo 4 et FIRE II.

	RAM-C II		Apollo 4			Fire II		
Temps de vol [s]	396.8	402.2	10	28	52	1634	1643	1648.3
Altitude [km]	71	61	76	62	55.8	76.4	53	41.6
Vitesse [km/s]	7.66	7.65	10.74	10.38	9.02	11.36	10.48	8.10
R_{nez}^1 [m]	0.1524	0.1524	3.05	3.05	3.05	0.935	0.805	0.702
M	25.9	24.4	37.3	33.3	28.0	39.5	32	24.7
Re	$5.9 \cdot 10^3$	$2.0 \cdot 10^4$	$8.2 \cdot 10^4$	$4.9 \cdot 10^5$	$8.5 \cdot 10^5$	$2.5 \cdot 10^4$	$3.56 \cdot 10^5$	$1.1 \cdot 10^6$
Kn	$7.4 \cdot 10^{-3}$	$1.9 \cdot 10^{-3}$	$7.8 \cdot 10^{-4}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$5.2 \cdot 10^{-5}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$2.6 \cdot 10^{-5}$

¹ R_{nez} désigne le rayon de nez de l'appareil.

s'agit des points de trajectoire qui sont généralement simulés numériquement dans la littérature [7, 8, 9, 10] car ils correspondent à la phase de rentrée du véhicule où l'échauffement pariétal, par convection et par rayonnement, est le plus élevé. Différentes corrélations ont été formulées pour donner les ordres de grandeurs de ces contributions. Anderson [11] donne par exemple la formule approchée suivante pour le flux convectif q^C au point d'arrêt :

$$q^C = 1,83 \cdot 10^{-8} \rho_{\infty}^{1/2} u_{\infty}^3 R_{nez}^{-1/2} \left(1 - \frac{h_p}{h_{tot}}\right) \text{ W.cm}^{-2}, \quad (\text{I.4})$$

dans laquelle ρ_{∞} et u_{∞} (en unité SI de même que R_{nez}) désignent respectivement la masse volumique et la vitesse de l'écoulement en amont du choc, h_p l'enthalpie massique à la paroi et h_{tot} l'enthalpie massique totale ($= h_{\infty} + u_{\infty}^2/2$, où h_{∞} est l'enthalpie massique en amont du choc). Pour le flux radiatif incident à la paroi q^R , Anderson [11] donne l'expression suivante obtenue entre autre avec l'approximation plans tangents et pour un gaz optiquement mince :

$$q^R = \frac{P_{emi}^R}{2} \delta, \quad (\text{I.5})$$

où P_{emi}^R est la puissance radiative émise par la couche de choc par unité de volume, supposée constante dans toute la couche de choc, et δ l'épaisseur de la couche de choc. Anderson [11] donne une expression approchée de cette épaisseur :

$$\delta = R_{nez} \frac{\rho_{\infty}}{\rho_{choc}}, \quad (I.6)$$

dans laquelle ρ_{choc} désigne la masse volumique en aval du choc. Le flux radiatif s'exprime alors comme :

$$q^R = \frac{P_{emi}^R}{2} R_{nez} \frac{\rho_{\infty}}{\rho_{choc}}. \quad (I.7)$$

On remarque que le flux convectif est inversement proportionnel à la racine carré du rayon de nez de l'engin tandis que le flux radiatif est directement proportionnel à ce même rayon. Lors du dimensionnement des protections thermiques, il y a par conséquent un compromis à faire sur la valeur du rayon de nez de l'appareil : augmenter le rayon pour réduire la charge convective ou diminuer le rayon pour réduire la charge radiative. Le choix se fait en prenant en compte les conditions en vol les plus critiques pour l'intégrité de l'appareil lors de la phase de rentrée. Les conditions de vol qui nous ont intéressés sont typiquement celles du tableau I.1. Compte tenu de la valeur des nombres adimensionnels M , Re et Kn , les écoulements sont alors considérés comme laminares et hypersoniques en milieu continu.

La modélisation de ce type d'écoulement est complexe ; il faut tenir compte des effets de gaz réels et également des transferts radiatifs. D'un point de vue cinétique, la complexité vient principalement du fait que l'écoulement peut être ionisé et en déséquilibre thermochimique. En effet, à la traversée de l'onde de choc qui se forme en amont du corps de rentrée, l'énergie cinétique de l'écoulement qui est très importante compte tenu des vitesses, est transférée par collisions vers l'énergie interne des particules. La montée brutale de la pression du fluide s'effectue sur une distance de quelques libres parcours moyens et s'accompagne d'une forte agitation thermique : les collisions entre particules sont alors intenses provoquant des réactions chimiques et/ou excitant les degrés de liberté des particules que sont les modes électroniques, vibrationnels et rotationnels (les deux derniers modes concernent les molécules). On distingue trois types de collisions dans de tels milieux :

- les collisions élastiques, pour lesquelles l'énergie mise en jeu est uniquement celle liée aux modes de translation. Les particules échangent lors d'une collision une part de leur énergie cinétique (échanges translation-translation (TT)). Ces collisions contribuent à faire tendre le milieu vers un état d'équilibre translationnel. C'est le phénomène de relaxation translationnelle.

- les collisions inélastiques non réactives au cours desquelles les particules échangent de l'énergie faisant intervenir la translation mais aussi d'autres degrés de liberté que sont l'électronique, la vibration et la rotation. On dénombre ainsi différents types d'échanges, les échanges vibration-translation (VT), vibration-vibration (VV), rotation-translation (RT), etc... Ces échanges d'énergie vont faire tendre le milieu vers un état d'équilibre thermodynamique local (ETL) à la température T . On parlera de relaxation rotationnelle, vibrationnelle et électronique.

- les collisions réactives qui provoquent des réactions chimiques telles que la dissociation, l'ionisation et l'échange de charges des particules.

Ces phénomènes sont caractérisés respectivement par des temps caractéristiques τ_{thm} liés aux collisions élastiques et inélastiques et τ_{chm} liés aux collisions réactives. Suivant la valeur de ces temps comparés à celui lié au mouvement hydrodynamique τ_{hyd} (temps de séjour moyen d'une particule dans la couche de choc), différentes situations peuvent être rencontrées. Du point de vue de la chimie :

- $\tau_{chm} \ll \tau_{hyd}$, les phénomènes chimiques sont très rapides devant le mouvement du fluide. L'équilibre chimique local est obtenu instantanément.
- $\tau_{chm} \gg \tau_{hyd}$, les collisions réactives ne sont pas assez nombreuses pour faire varier les concentrations initiales des espèces. Les concentrations restent figées.
- $\tau_{chm} \approx \tau_{hyd}$, la composition chimique évolue avec les conditions hydrodynamiques sans jamais atteindre l'équilibre. On est dans une situation de déséquilibre chimique.

D'un point de vue thermodynamique :

- $\tau_{thm} \ll \tau_{hyd}$, les phénomènes de relaxation entre les différents modes d'énergie sont très rapides devant le mouvement du fluide. L'écoulement est à l'ETL.
- $\tau_{thm} \gg \tau_{hyd}$, cette situation correspond à un état figé, l'état thermodynamique du fluide n'évolue pas.
- $\tau_{thm} \approx \tau_{hyd}$, l'état thermodynamique évolue en même temps que l'écoulement. L'écoulement est dit en déséquilibre thermodynamique local. Chaque phénomène de relaxation est caractérisé par un temps caractéristique qui lui est propre. Un mode d'énergie pouvant alors être à l'équilibre et d'autres pas. Ces phénomènes de relaxation sont de manière générale liés à la fréquence des collisions.

Dans le cadre de notre étude (rentrées à des altitudes de 50-80 km et à des vitesses de l'ordre de 10 km/s)², les temps caractéristiques hydrodynamiques sont de l'ordre de 10^{-4} s dans la couche de choc (typiquement de l'ordre de 10 cm) tandis que les temps caractéristiques de relaxation vibrationnelle et de chimie (dissociation des molécules par exemple) sont de l'ordre de $10^{-3} - 10^{-5}$ s (cf. par exemple [12, 13]). Dans ces conditions, l'écoulement est en déséquilibre thermique et chimique.

Un autre phénomène physique doit être pris en compte dans la simulation d'écoulement hypersonique, c'est le rayonnement. En effet, pour des rentrées à plus de 10 km/s, les particules sont fortement excitées par collisions ce qui se traduit, en plus de phénomènes de relaxation, par une émission importante du plasma dans la couche de choc. La contribution du rayonnement à l'échauffement de la paroi du véhicule est importante et peut atteindre plus de 50 % du flux total [4, 14].

I.3 Système d'équations général

I.3.1 Équations de Navier-Stokes adaptées au déséquilibre thermochimique

On présente dans cette section un système d'équations de conservation et de bilan pour des écoulements hypersoniques partiellement ionisés et hors d'équilibre chimique et thermique tenant compte du rayonnement. Il s'appuie sur les développements de Lee [15], repris par Sarma [14] mais en s'affranchissant de leur approche multi-température pour les degrés

²Pour ces conditions, les vitesses en aval du choc sont de l'ordre de 1 km/s.

internes et en tenant compte de l'effet du rayonnement sur la cinétique. Aucune hypothèse n'est donc formulée sur la manière de représenter le déséquilibre thermique des modes rotationnels, vibrationnels et électroniques des particules. Chaque niveau rovibronique (pour les molécules) ou électronique (pour les atomes) est alors considéré comme une espèce à part entière. Cette approche est couramment appelée dans la littérature « approche niveau par niveau ». On suppose cependant (comme Lee [15]) que les collisions élastiques entre les particules lourdes sont suffisamment efficaces pour que leurs modes de translation se thermalisent rapidement. À titre d'exemple, Zel'dovich [16] estime que les temps de relaxation sont de l'ordre de 10^{-10} s pour de l'air dans des conditions standards ce qui correspond à quelques collisions et permet de considérer la translation des particules lourdes en équilibre dans nos applications. Dans ces conditions, la vitesse de ces particules est décrite par une distribution Maxwellienne à une température T dite de translation. Par contre, à cause de la différence de masse importante entre les espèces lourdes et les électrons créés lors des réactions d'ionisation, le gaz d'électrons va s'équilibrer à une température de translation a priori différente de celle des lourds [15], que l'on notera par la suite T_e . Dans le cadre de cette hypothèse, on peut noter que l'établissement rigoureux du système d'équations pour les écoulements ionisés a été obtenu récemment par Graille *et al.* [17] en approximant les équations de Boltzmann avec la méthode de Chapman-Enskog développée à l'ordre 2 pour les espèces lourdes et à l'ordre 3 pour les électrons. Cependant cette formulation ne tient pas compte des degrés d'énergie internes ni du rayonnement qui ne peuvent être négligés dans le cadre de notre étude.

À noter que l'on trouvera dans la littérature des variantes du système formulé ici, rendus plus simples avec des hypothèses faites en particulier sur le déséquilibre thermique et la prise en compte du rayonnement [18, 19, 20, 15, 12, 21, 10]. Ce dernier point est discuté dans la section I.4.

Les principales hypothèses (H) utilisées pour écrire le système d'équations lié à l'hydrodynamique sont les suivantes :

- l'écoulement est supposé être continu pour les raisons invoquées dans le paragraphe I.2,
- les modes de translation des particules lourdes et des électrons sont respectivement à l'équilibre et caractérisés par les températures T et T_e ,
- chaque espèce du mélange gazeux suit la loi d'état des gaz parfaits,
- le fluide est considéré comme Newtonien,
- les effets Soret et Dufour sont négligés, et la diffusion est modélisée par une loi de Fick,
- la viscosité volumique est négligée,
- le gaz est faiblement ionisé de telle sorte que le mélange est localement neutre et sans courant de conduction (ceci repose sur le fait que les ions et les électrons sont assurés de diffuser de la même manière suivant le concept de la diffusion ambipolaire) [13],
- les effets de viscosité inhérents aux électrons libres sont négligés [22], de même que leurs termes inertiels vu leur faible masse.

Sous ces hypothèses, le système d'équations se compose des équations de bilan de masse de chaque espèce, de conservation de la quantité de mouvement totale, de bilan de l'énergie du nuage d'électrons libres et enfin de bilan de l'énergie totale du système. La loi d'état des gaz parfaits et la loi d'électroneutralité locale servent d'équations de fermeture. On décrit ci-dessous les équations et les termes de chacune d'elle. De manière générale, les termes du membre de gauche représentent les termes Eulériens classiques de variation temporelle et convectif tandis que les termes de droite servent à modéliser les phénomènes dissipatifs

ainsi que les termes de production dus aux processus chimiques et radiatifs.

Équation de bilan de masse de chaque espèce

On désigne par espèce (s, k) une espèce chimique s occupant le niveau énergétique k . Dans le cas des molécules, k désigne le triplet (n, v, J) constitué respectivement des nombres caractérisant l'état électronique, de vibration et de rotation qu'occupe la particule. La masse de chaque espèce (s, k) est gouvernée par l'équation bilan :

$$\partial_t(\rho_{s,k}) + \partial_{x^j}(\rho_{s,k}(u_0^j + V_{s,k}^j)) = \dot{\omega}_{s,k}, \quad (\text{I.8})$$

où $\rho_{s,k}$ est la masse volumique des particules de l'espèce (s, k) . Dans le cas particulier des électrons, $\rho_{s,k}$ est remplacé par ρ_e , la masse volumique des électrons. u_0^j désigne la composante j de la vitesse hydrodynamique définie par :

$$u_0^j = \frac{\sum_{s=1}^{N_{esp}} \sum_{k=1}^{N_{level}^s} \rho_{s,k} u_{s,k}^j}{\sum_{s=1}^{N_{esp}} \sum_{k=1}^{N_{level}^s} \rho_{s,k}}, \quad (\text{I.9})$$

où N_{esp} est le nombre d'espèces s total (indépendamment de leur niveau), N_{level}^s le nombre total de niveaux d'énergie que peut occuper une particule de l'espèce s , $u_{s,k}^j$ la composante j de la vitesse moyenne de l'espèce (s, k) et $V_{s,k}^j = u_{s,k}^j - u_0^j$ est la vitesse de diffusion des espèces (s, k) dans la direction j .

La masse volumique ρ_s de l'espèce s est définie par

$$\rho_s = \sum_{k=1}^{N_{level}^s} \rho_{s,k}, \quad (\text{I.10})$$

et la masse volumique du mélange ρ par la relation

$$\rho = \sum_{s=1}^{N_{esp}} \rho_s, \quad (\text{I.11})$$

qui vérifie la loi de conservation :

$$\partial_t(\rho) + \partial_{x^j}(\rho u_0^j) = 0. \quad (\text{I.12})$$

La diffusion massique étant modélisée par une loi de Fick, l'équation I.8 devient :

$$\partial_t(\rho_{s,k}) + \partial_{x^j}(\rho_{s,k} u_0^j) = \partial_{x^j}(\rho D_{s,k} \partial_{x^j} Y_{s,k}) + \dot{\omega}_{s,k}, \quad (\text{I.13})$$

où $D_{s,k}$ est le coefficient de diffusion de l'espèce (s, k) dans le mélange gazeux, et $Y_{s,k}$ désigne la fraction massique de l'espèce (s, k) , définie par :

$$Y_{s,k} = \rho_{s,k} / \rho. \quad (\text{I.14})$$

Le terme $\dot{\omega}_{s,k}$ est la somme des taux de production massique de l'espèce (s, k) par collision, $\dot{\omega}_{s,k}^{coll}$ et par rayonnement $\dot{\omega}_{s,k}^{rad}$:

$$\dot{\omega}_{s,k} = \dot{\omega}_{s,k}^{coll} + \dot{\omega}_{s,k}^{rad}. \quad (\text{I.15})$$

Équation de conservation de la quantité de mouvement totale

$$\partial_t(\rho u_0^i) + \partial_{xj}(\rho u_0^j u_0^i + p \delta_{ij}) = \partial_{xj} \left[\mu \left(\partial_{xj} u_0^i + \partial_{xi} u_0^j \right) - \frac{2}{3} \mu \partial_{xk} u_0^k \delta_{ij} \right] + \sum_{s=1}^{N_{esp}} q_e Z_s n_s \tilde{E}_i. \quad (I.16)$$

Dans cette équation, p désigne la pression statique totale du mélange définie par :

$$p = \sum_{s=1}^{N_{esp}} p_s, \quad (I.17)$$

avec p_s la pression statique de l'espèce s définie par :

$$p_{s \neq e} = n_s k_b T = \rho_s R T / M_s \quad (I.18)$$

$$p_{s=e} = n_e k_b T_e = \rho_e R T_e / M_e, \quad (I.19)$$

où n_s désigne la densité de l'espèce s , n_e la densité électronique, M_s et M_e les masses molaires de l'espèce s et des électrons.

Les deux termes du membre de droite de l'équation I.16 représentent respectivement l'action des forces visqueuses où μ est la viscosité dynamique du mélange, et l'action du champ électrostatique induit par les ions et les électrons. Dans ce dernier terme, $q_e Z_s$ désigne le produit de la charge d'un électron q_e avec le degré d'ionisation Z_s de l'espèce s (pour les neutres $Z_s = 0$) et $\tilde{E}_i$ le champ électrostatique dans la direction i . Dans notre cas, l'hypothèse d'électroneutralité locale permet d'éliminer ce dernier terme. L'équation I.16 s'écrit alors :

$$\partial_t(\rho u_0^i) + \partial_{xj}(\rho u_0^j u_0^i + p \delta_{ij}) = \partial_{xj} \left[\mu \left(\partial_{xj} u_0^i + \partial_{xi} u_0^j \right) - \frac{2}{3} \mu \partial_{xk} u_0^k \delta_{ij} \right]. \quad (I.20)$$

Équation de bilan de l'énergie des électrons libres

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_e E_e) + \partial_{xj} [u_0^j (\rho_e E_e + p_e)] &= -q_e n_e \tilde{E}_j (u_0^j + V_e^j) + \partial_{xj} (\lambda'_e \partial_{xj} T_e) + \partial_{xj} [\rho h_e D_e \partial_{xj} Y_e] \\ &+ \Omega_e^{e-lourd} + \sum_{\text{réactions } r} \Omega_e^{coll,r} + \sum_{\text{processus } p} \Omega_e^{rad,p}, \end{aligned} \quad (I.21)$$

où E_e est l'énergie des électrons, définie par

$$E_e = \frac{u_0^i u_0^i}{2} + e_e, \quad (I.22)$$

avec e_e leur énergie de translation :

$$e_e = e_e^t = \frac{3}{2} \frac{R}{M_e} T_e. \quad (I.23)$$

Les deuxième et troisième termes du membre de droite de l'équation I.21 représentent respectivement la conduction thermique (dû aux collisions entre électrons) et la diffusion de l'énergie des électrons libres caractérisés par une conductivité thermique λ'_e et un coefficient de diffusion D_e . Le quatrième terme est le terme d'échange d'énergie par collision avec les

espèces lourdes du mélange gazeux. Ces échanges mettent en jeu la translation (collisions élastiques) mais aussi la rotation, la vibration et l'électronique (collisions inélastiques) des particules lourdes. Dans le cadre d'une approche multi-température, une description détaillée de ces termes de relaxation est donnée dans l'annexe B.

Les deux derniers termes représentent la production d'énergie lors de réactions chimiques et de processus radiatifs.

Le premier terme du membre de droite de l'équation I.21 représente le travail du champ électrique dans lequel V_e^j désigne la vitesse de diffusion des électrons dans la direction j . Pour éviter de résoudre une équation du type Maxwell-Poisson et déterminer ainsi le champ électrique, on utilise souvent dans la littérature l'approximation suivante [23, 5, 19, 24, 14] :

$$\tilde{E}_j = -\frac{1}{q_e n_e} \frac{\partial p_e}{\partial x^j}. \quad (\text{I.24})$$

Cette relation est issue de l'équation de bilan de la quantité de mouvement des électrons en négligeant les termes d'inertie, les effets de viscosité, les effets radiatifs, les collisions inélastiques et en considérant le principe de la diffusion ambipolaire. Marmignon et Coquel [24] indique cependant que cette approximation n'est rigoureusement valable que quand $T = T_e$ ce qui n'est généralement pas le cas.

En utilisant la relation I.24 et en négligeant la vitesse de diffusion des électrons devant la vitesse hydrodynamique, l'équation I.21 devient :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_e E_e) + \partial_{x^j} [u_0^j (\rho_e E_e + p_e)] - u_0^j \partial_{x^j} p_e &= \partial_{x^j} (\lambda'_e \partial_{x^j} T_e) + \partial_{x^j} \left[\rho h_e D_e \partial_{x^j} Y_e \right] + \Omega_e^{e-lourd} \\ &+ \sum_{\text{réactions } r} \Omega_e^{coll,r} + \sum_{\text{processus } p} \Omega_e^{rad,p}. \end{aligned} \quad (\text{I.25})$$

Le travail du champ électrique se résume alors à un terme convectif qui doit être traité en même temps que les autres termes du membre de gauche de l'équation I.25. Ce point est cependant délicat à traiter.

Comme expliqué dans [24, 25], la résolution d'un système convecto-diffusif avec termes sources, tel qu'il est question ici, passe avant tout par la résolution du système convectif non linéaire qui en est extrait. Cette résolution nécessite la connaissance de relations de saut afin de fermer le système. Dans le cas de systèmes conservatifs³, ces relations de saut sont indépendantes des phénomènes dissipatifs et sont appelées conditions de Rankine Hugoniot. Dans le cas de systèmes non conservatifs, qui est le cas rencontré ici à cause de la présence du terme $u_0^j \partial_{x^j} p_e$ dans l'équation I.25, ces relations de saut dépendent des phénomènes

³Le système convectif non linéaire à résoudre est de la forme :

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathfrak{A}(\mathbf{u}) \partial_x \mathbf{u} = 0, \quad (\text{I.26})$$

où $\mathbf{u}$ désigne l'ensemble des variables dites « conservatives » et $\mathfrak{A}$ est une matrice supposée diagonalisable à valeurs propres réelles. Cette propriété fait que le système non linéaire I.26 est hyperbolique. S'il existe une fonction flux $\mathbf{f}$ dont la matrice jacobienne coïncide localement avec la matrice $\mathfrak{A}$ alors le système est dit conservatif. il peut s'écrire sous la forme

$$\partial_t \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0 \quad (\text{I.27})$$

dissipatifs et sont à priori inconnues. Ce problème n'est généralement pas mentionné dans la littérature, et les auteurs [19, 20, 15, 26] résolvant ce type de système contournent le problème en traitant le terme non conservatif $u_0^j \partial_{x^j} p_e$ comme un terme source en le plaçant dans le membre de droite de l'équation I.25. Marmignon et Coquel [24, 25] indiquent que cette méthode est non seulement fautive mathématiquement mais peut aussi engendrer des instabilités numériques lors de la traversée du choc. Pour pallier ce problème, ils ont trouvé une formulation entropique du gaz d'électrons libres pour ramener le système initial sous forme conservative. L'inconvénient majeur de cette formulation est qu'elle est obtenue en négligeant les termes dissipatifs du gaz d'électrons tels que la conduction et la diffusion des électrons. Compte tenu de la très faible masse des électrons par rapport aux autres espèces, négliger la diffusion n'est pas une hypothèse forte contrairement à celle qui revient à négliger la conduction thermique. Avec leur formulation entropique, l'équation I.25 est alors remplacée par :

$$\partial_t \rho s_e + \partial_{x^j} (\rho s_e u_0^j) = \frac{\gamma_e - 1}{\gamma_e} \frac{\rho s_e}{p_e} \Omega_e^{e-lourd}, \quad (\text{I.28})$$

avec

$$s_e = \left(\frac{1}{\gamma_e - 1} \frac{p_e}{Y_e \rho^{\gamma_e}} \right)^{1/\gamma_e}, \quad (\text{I.29})$$

où Y_e est la fraction massique des électrons et γ_e le coefficient isentropique du gaz d'électrons libres. Les détails de l'obtention de cette loi sont indiqués dans Soubrié [10].

Ce paragraphe sert à pointer du doigt la difficulté de modéliser des écoulements partiellement ionisés. Approche en énergie ou approche entropique du gaz d'électrons libres, les deux modèles présentent des avantages et des inconvénients. La première en énergie est moins rigoureuse mathématiquement mais permet d'intégrer les principaux processus physico-chimiques présents au sein du gaz d'électrons. La deuxième approche permet d'obtenir des résultats à partir d'un problème bien posé mais au détriment de la prise en compte de certains phénomènes de diffusion tels que la conduction thermique des électrons pour ne citer que le plus important. Dans tous les cas, ce que l'on peut signaler, c'est que les résultats exposés dans la littérature [10, 19, 21, 27] et qui sont issus des deux types d'approche, semblent montrer une certaine cohérence en ce qui concerne les distances choc-paroi, les pressions, les degrés d'ionisation et les niveaux des températures.

Équation de bilan de l'énergie totale

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho E) + \partial_{x^j} (\rho H u_0^j) &= \partial_{x^j} (\lambda \partial_{x^j} T) + \partial_{x^j} (\lambda_e \partial_{x^j} T_e) \\ &+ \partial_{x^j} \left[\rho \sum_{s=1}^{N_{esp}} \sum_{k=1}^{N_{level}^s} D_{s,k} h_{s,k} \partial_{x^j} Y_{s,k} \right] \\ &+ \partial_{x^j} \left[\mu u_0^i \left(\partial_{x^j} u_0^i + \partial_{x^i} u_0^j \right) - \frac{2}{3} \mu u_0^i \partial_{x^k} u_0^k \delta_{ij} \right] \\ &+ \sum_{s=1}^{N_{esp}} q_e Z_s n_s \tilde{E}_j (u_0^j + V_s^j) - P^R, \end{aligned} \quad (\text{I.30})$$

où l'énergie massique totale E et l'enthalpie massique totale H sont définies par

$$E = \frac{u_0^i u_0^i}{2} + \sum_{s=1}^{N_{esp}} \sum_{k=1}^{N_{level}^s} \frac{\rho_{s,k} e_{s,k}}{\rho}, \quad (\text{I.31})$$

$$H = E + \frac{p}{\rho}, \quad (\text{I.32})$$

où $e_{s,k}$ est l'énergie interne massique des particules de l'espèce (s, k) . Pour les molécules, en supposant que les modes d'énergies internes sont indépendants, on peut exprimer cette énergie comme la somme des contributions de ces différents modes correspondant au niveau k :

$$e_{s,k} = e_s^t + e_{s,k}^{el} + e_{s,k}^v + e_{s,k}^r + e_s^0, \quad (\text{I.33})$$

où e_s^0 est l'énergie de l'espèce s à $T = 0$ K et e_s^t , $e_{s,k}^{el}$, $e_{s,k}^v$ et $e_{s,k}^r$ les énergies des degrés internes référencés par rapport à e_s^0 . En réalité, les énergies de vibration et de rotation sont couplées en particulier à haute température. Ce couplage peut être représenté par une énergie d'interaction entre la vibration et la rotation. Pour l'hydrodynamique, cette énergie est généralement négligée. L'énergie de translation est définie par :

$$e_s^t = \frac{3}{2} \frac{RT}{M_s}. \quad (\text{I.34})$$

Pour les atomes, l'énergie $e_{s,k}$ se résume à son énergie de translation, son énergie électronique et son énergie au niveau zéro :

$$e_{s,k} = e_s^t + e_{s,k}^{el} + e_s^0. \quad (\text{I.35})$$

L'enthalpie massique $h_{s,k}$ de chaque espèce (s, k) est définie dans le cas des particules lourdes par

$$h_{s,k} = e_{s,k} + \frac{R}{M_s} T. \quad (\text{I.36})$$

Pour les électrons, h_e est donné par

$$h_e = e_e + \frac{R}{M_e} T_e. \quad (\text{I.37})$$

Les deux premiers termes du membre de droite de l'équation I.30 représentent la conduction de l'énergie par les modes de translation des espèces lourdes et des électrons caractérisés par les conductivités thermiques λ et λ_e ⁴. Le troisième terme exprime le terme de diffusion due aux gradients de concentration, le quatrième terme représente le travail des forces de viscosité et le cinquième terme est le travail des espèces chargées dû au champ électrique. Dans l'hypothèse de la diffusion ambipolaire, ce terme est assuré d'être nul. Le dernier terme représente la puissance radiative tenant compte de l'émission et de l'absorption de l'ensemble du gaz. Ce terme est détaillé dans la section I.3.2 qui suit.

I.3.2 Équation de transfert radiatif

Pour traiter le rayonnement émis par la couche de choc, il faut ajouter l'équation de transfert radiatif (ETR) au système d'équations I.42. Dans notre cadre d'étude, le milieu

⁴À la différence de la conductivité thermique λ_e' dans l'équation I.21 qui caractérise seulement les collisions entre électrons, λ_e caractérise la collision des électrons avec tous types de particules [15].

est supposé non diffusant et d'indice optique 1. La première hypothèse est généralement vérifiée dans l'atmosphère mais peut être mise en défaut à la paroi du corps de rentrée si celle-ci est ablative. Dans ces conditions, pour un point du milieu M d'abscisse s_M et pour une direction de propagation du rayonnement suivant le vecteur unitaire $\mathbf{u}$, l'ETR s'exprime comme suit :

$$\left[\frac{dL_\sigma(s, \mathbf{u})}{ds} \right]_{s=s_M} = \eta_\sigma(s_M) - \kappa_\sigma(s_M)L_\sigma(M, \mathbf{u}), \quad (\text{I.38})$$

où $L_\sigma(s, \mathbf{u})$ désigne la luminance monochromatique, $\eta_\sigma(s_M)$ et $\kappa_\sigma(s_M)$ le coefficient d'émission et le coefficient d'absorption au point M et au nombre d'onde σ . Ces coefficients représentent les propriétés radiatives du milieu au point M . Le calcul de ces coefficients est présenté dans la section I.4.2 et plus en détail dans le chapitre II.

Dans cette équation, le terme du membre de gauche désigne le taux de variation spatiale de la luminance et les deux termes du membre de droite sont respectivement la puissance émise et la puissance absorbée volumiques au point M par unité d'angle solide. La résolution de cette équation est primordiale pour obtenir le terme source P^R contenu dans l'équation I.30.

Ce terme de puissance radiative s'exprime comme la divergence du flux radiatif :

$$P^R(M) = -\nabla \cdot \mathbf{q}^R, \quad (\text{I.39})$$

où le vecteur flux radiatif $\mathbf{q}^R$ est déterminé par la relation :

$$\mathbf{q}^R(M) = \int_0^\infty \int_{4\pi} L_\sigma(M, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega d\sigma, \quad (\text{I.40})$$

où $d\Omega$ désigne l'angle solide élémentaire autour de $\mathbf{u}$. L'interaction entre l'écoulement et le rayonnement est représentée par le terme P^R mais aussi par des termes radiatifs dans les équations d'évolution des espèces et des populations (Eq. I.15) et dans l'équation de bilan d'énergie des électrons (Eq. I.25). Ce point est discuté dans la section I.4.2.

La résolution de l'équation I.38 permet également d'obtenir le flux radiatif aux parois du véhicule. Pour un corps à propriétés radiatives isotropes, le flux radiatif surfacique au point de paroi M s'exprime comme la différence entre les flux absorbés et émis par la paroi :

$$q^R(M) = \int_0^\infty \alpha_\sigma(M) \int_{4\pi} L_\sigma(M, \mathbf{u}) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Omega d\sigma - \pi \int_0^\infty \epsilon_\sigma(M) L_\sigma^\circ(M) d\sigma, \quad (\text{I.41})$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal à la paroi, et $\alpha_\sigma(M)$ et $\epsilon_\sigma(M)$ désignent respectivement l'absorptivité et l'émissivité monochromatiques au point M . $L_\sigma^\circ(M)$ est la luminance d'équilibre caractérisée par la température au point M .

I.3.3 Récapitulation du système d'équations

$$\partial_t(\rho_{s,k}) + \partial_{x^j}(\rho_{s,k} u_0^j) = \partial_{x^j}(\rho D_{s,k} \partial_{x^j} Y_{s,k}) + \dot{\omega}_{s,k} \quad (\text{I.42a})$$

$$\partial_t(\rho u_0^i) + \partial_{x^j}(\rho u_0^j u_0^i + p \delta_{ij}) = \partial_{x^j} \left[\mu \left(\partial_{x^j} u_0^i + \partial_{x^i} u_0^j \right) - \frac{2}{3} \mu \partial_{x^k} u_0^k \delta_{ij} \right] \quad (\text{I.42b})$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_e E_e) + \partial_{x^j} [w_0^j(\rho_e E_e + p_e)] + w_0^j \partial_{x^j} p_e &= \partial_{x^j} (\lambda'_e \partial_{x^j} T_e) + \partial_{x^j} [\rho h_e D_e \partial_{x^j} Y_e] + \Omega_e^{e-lourd} \\ &+ \sum_{\text{réactions } r} \Omega_e^{coll,r} + \sum_{\text{processus } p} \Omega_e^{rad,p} \end{aligned} \quad (\text{I.42c})$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho E) + \partial_{x^j}(\rho H w_0^j) &= \partial_{x^j}(\lambda \partial_{x^j} T) + \partial_{x^j}(\lambda_e \partial_{x^j} T_e) \\ &+ \partial_{x^j} \left[\rho \sum_{s=1}^{N_{esp}} \sum_{k=1}^{N_{level}^s} D_{s,k} h_{s,k} \partial_{x^j} Y_{s,k} \right] \\ &+ \partial_{x^j} \left[\mu w_0^i \left(\partial_{x^j} u_0^i + \partial_{x^i} u_0^j \right) - \frac{2}{3} \mu w_0^i \partial_{x^k} u_0^k \delta_{ij} \right] - P^R \end{aligned} \quad (\text{I.42d})$$

$$\frac{dL_\sigma(s, \mathbf{u})}{ds} = \eta_\sigma(s) - \kappa_\sigma(s) L_\sigma(s, \mathbf{u}). \quad (\text{I.42e})$$

Le système d'équations I.42 n'est jamais résolu en l'état dans la littérature compte tenu du nombre très important d'espèces (s, k) à prendre en compte, et sans compter le manque de données (constantes de réaction, coefficients de diffusion, etc.) pour simuler les phénomènes de transport et les processus réactionnels entre particules. À cela, il faut également ajouter l'interaction avec le rayonnement qui est difficile à traiter tant par sa nature non locale que par le grand nombre de processus qu'il met en jeu. Ceci est discuté dans les paragraphes qui suivent.

I.4 Les différentes approches pour modéliser les écoulements de rentrée hypersonique terrestre

On s'intéresse dans cette section aux différentes approches pouvant être considérées pour modéliser le déséquilibre thermochimique et le rayonnement dans les couches de chocs. Il existe dans la littérature de nombreuses modélisations des écoulements de rentrée plus ou moins fines. Les deux sections suivantes font un point rapide sur l'état de l'art des modèles mis en oeuvre afin de traiter de façon simplifiée le système d'équations général I.42.

Par souci de clarté, nous traiterons dans un premier temps les aspects cinétiques sans détailler les termes radiatifs contenus dans les relations I.15, et dans les équations I.42c et I.42d. La prise en compte du rayonnement et l'interaction couplage rayonnement/écoulement sont discutées dans la section I.4.2.

Par ailleurs, on n'expose pas dans cette section, les modèles utilisés pour traiter les phénomènes de transport de même qu'on n'explique pas les termes de relaxation. Dans le cadre d'une approche multi-température, ces aspects sont abordés brièvement dans l'annexe B lors de la description du code hydrodynamique CelHyo2D. Une analyse plus détaillée de ces points est donnée dans les thèses de William [28] et de Soubrié [10], l'une sur l'aspect fondamental et l'autre pour sa revue bibliographique sur les différentes modélisations implémentées dans les codes de calculs de choc de rentrée.

I.4.1 Modélisation cinétique du déséquilibre thermique et chimique

Le tableau I.2 récapitule les différentes descriptions thermodynamiques des degrés internes des particules qui peuvent être envisagées, de la plus fine (niveau par niveau rotationnel) à la plus grossière (approche entièrement multi-température) en passant par les modélisations hybrides *i.e.* niveau par niveau pour certains degrés de liberté et Boltzmannien pour d'autres. Les différentes modélisations sont brièvement décrites dans la suite ainsi que leur éventuelle mise en oeuvre dans la littérature.

Pour la translation, on conserve l'hypothèse émise dans la section I.3, à savoir que la translation des espèces lourdes et des électrons libres sont à l'équilibre aux températures respectives T et T_e .

TAB. I.2: *Description thermodynamique des degrés internes des particules.*

		Degrés internes		
		Électronique	Vibration	Rotation
Modèle de peuplement	A	Nv par Nv ¹	Nv par Nv	Nv par Nv
	B	Nv par Nv	Nv par Nv	Boltz. ($T_{r,s}$) ²
	C	Nv par Nv	Boltz. ($T_{v,s}$)	Boltz. ($T_{r,s}$)
	D	Boltz. ($T_{el,s}$)	Boltz. ($T_{v,s}$)	Boltz. ($T_{r,s}$)

¹« Nv par Nv » indique qu'une description niveau par niveau est considérée pour caractériser le degré interne.

²« Boltz. ($T_{i,j}$) » indique que la population du degré interne i de l'espèce j suit une distribution de Boltzmann à la température $T_{i,j}$.

I.4.1.1 Approche niveau par niveau

Pour le modèle « A » (correspondant à la modélisation retenue pour le système d'équations I.42), aucune notion de température n'est nécessaire pour caractériser la vibration, la rotation et les niveaux électroniques des particules. La mise en oeuvre du modèle « A », qui est le plus détaillé, implique que l'équation I.42a doit être résolue pour l'ensemble des niveaux électroniques pour les atomes et des niveaux rovibroniques pour les molécules. Pour la gamme de températures rencontrées lors de rentrées atmosphériques *i.e.* de l'ordre de 50000 K au maximum pour la translation des espèces lourdes qui va relaxer vers les degrés internes des particules, le nombre maximum d'états à considérer pour chaque espèce diatomique sont de l'ordre de 10 pour les états électroniques, 25 pour la vibration et 200 pour la rotation. Pour les atomes, il faut considérer une centaine de niveaux électroniques. Compte tenu du fait qu'il faut prendre en compte une dizaine d'espèces (≈ 5 espèces diatomiques, ≈ 5 espèces atomiques), le nombre total de niveaux est de l'ordre de 250000. Pour déterminer le terme $\dot{\omega}_{s,k}^{coll}$ de la relation I.15, il faut alors un mécanisme réactionnel de plusieurs millions de réactions faisant intervenir l'ensemble des niveaux. Il est bien évident que compte tenu des moyens numériques actuels et surtout du manque de données sur les constantes de réactions, cette approche entièrement niveau par niveau, appelée « rotationnelle spécifique », n'est pas envisageable, et n'a pas à notre connaissance été envisagée dans la littérature.

I.4.1.2 Approche hybride

Cas de la rotation

Pour simplifier partiellement le problème, une première approximation consiste à considérer que les modes rotationnels de chaque type de molécule sont à l'équilibre et caractérisés par une température de rotation $T_{r,s}$ pour chaque espèce moléculaire s . Une approche niveau par niveau est toujours considérée pour les populations vibrationnelles et électroniques : c'est une approche hybride. La population n_{nvJ}^s d'un niveau d'énergie rovibronique (n, v, J) de l'espèce s est alors donnée par la relation :

$$n_{nvJ}^s = n_{nv}^s \frac{g_J \exp\left(-\frac{E_{rot}(n,v,J)}{k_b T_{r,s}}\right)}{\sum_J \exp\left(-\frac{E_{rot}(n,v,J)}{k_b T_{r,s}}\right)}, \quad (\text{I.43})$$

où n_{nv}^s est la population vibronique du niveau (n, v) , g_J la dégénérescence du niveau rotationnel, $E_{rot}(n, v, J)$ l'énergie rotationnelle du niveau (n, v, J) . L'utilisation de cette relation correspond à la modélisation « B » du tableau I.2.

Selon Park [12], on peut supposer que la rotation des molécules neutres peut être représentée par une seule température commune T_r puisque ces molécules ont des constantes de rotation quasiment similaires. Cette hypothèse est généralement étendue aux espèces moléculaires ionisées. Une hypothèse supplémentaire consiste à considérer que les modes rotationnels sont de plus à l'équilibre avec la translation des particules lourdes. D'après Capitelli *et al.* [29], ceci est justifié par le fait que le temps caractéristique de transfert d'énergie entre la rotation et la translation des particules lourdes est comparable avec ceux existants entre les degrés de liberté translationnels. La population des niveaux rotationnels des particules diatomiques est alors décrite par une distribution de Boltzmann à la température $T_r = T$ quelque soit l'espèce. Cette hypothèse a été récemment remise en question par Park [30] dans le cas de la relaxation de N_2 derrière un choc. Il a estimé en s'appuyant sur des résultats expérimentaux que le temps caractéristique de transfert d'énergie de rotation entre molécule devenait comparable à celui de la vibration à des températures supérieures à 12000 K.

Dans la littérature, il est rare de trouver des codes de calcul simulant le déséquilibre rotationnel. On peut noter celui de Gökçen [31], qui le modélise simplement avec une température de rotation des molécules différente de celle de translation. La relaxation rotationnelle avec la translation est déterminée en considérant une hypothèse très rudimentaire à partir de laquelle il calcule les temps de relaxation sur la base d'un nombre de collisions constant et égal à 5.

Par la suite, on se placera dans le cas où la population des états rotationnels est décrit par une seule température, celle de translation des espèces lourdes. Le modèle de peuplement reste encore niveau par niveau sur l'électronique et la vibration. On appelle cette modélisation « vibrationnelle spécifique ».

Cas de la vibration

Pour mettre en oeuvre une modélisation « vibrationnelle spécifique » sur le plan de la cinétique, de nombreux travaux ont consisté à établir des schémas réactionnels prenant en compte de nombreux niveaux vibrationnels et à déterminer en particulier les constantes de réaction associées pour représenter les collisions inélastiques réactives et non réactives.

Les données expérimentales concernant les transferts d'énergie associés aux hauts nombres de vibration et à haute température étant encore très rarement disponibles, la plupart des taux de réaction sont basés sur des calculs théoriques. Tel est le cas par exemple des travaux de Colonna *et al.* [32, 33, 34], Kustova *et al.* [35, 36, 37], et Adamovich *et al.* [38, 39, 40, 41]. Le calcul des taux de réaction repose sur la détermination des probabilités de transition d'un état vers un autre lors d'une collision.

Les modèles théoriques les plus couramment utilisés dans la littérature se basent sur le modèle de collision linéaire tel que la théorie d'approximation du premier ordre FOPT [42] (First Order Perturbation Theory) et la théorie FHO [43, 44, 45] (Forced Harmonic Oscillator). La première de ces deux théories initialement construite pour des molécules assimilables à des oscillateurs harmoniques n'est appropriée que pour des collisions de faible énergie et des transitions monoquantum ce qui pose problème à haute température, où les collisions sont très énergétiques. Des tentatives de généralisation aux sauts multiquantum incluant des effets d'anharmonicité n'ont pas donné de résultats satisfaisants. La théorie FHO également développée à la base pour un oscillateur harmonique prend cependant en compte les collisions hautement énergétique et les sauts multiquantum. Les travaux cités précédemment de Kustova *et al.* et de Adamovich *et al.* reposent sur cette théorie. Ces derniers l'ont d'ailleurs récemment amélioré en introduisant l'anharmonicité des molécules et la non colinéarité des collisions. Colonna *et al.* [32, 33, 34] ont utilisé une autre méthode, basée sur une théorie de calcul semi-classique de trajectoire développé par Laganá [46] (PES, Potential Energy Surface), pour obtenir les taux de réaction.

Sans compter le manque de validation de ces théories (par rapport à des résultats expérimentaux) et le fait qu'elles n'ont pas encore été mises en oeuvre pour déterminer une cinétique complète faisant intervenir toutes les espèces neutres et ionisées présentes dans les écoulements de rentrée terrestre, ces théories restent lourdes à mettre en oeuvre avec des temps de calcul très importants pour des applications réelles.

On peut noter cependant qu'à partir de données cinétiques obtenues avec les théories énoncées précédemment, certains auteurs dans la littérature tels que Josyula *et al.* [47, 48, 49], Chauveau *et al.* [50, 51], Pierrot *et al.* [52], et Orsini *et al.* [53] ont mis en oeuvre dans des codes de calculs l'approche vibrationnelle spécifique pour des cas relativement simple avec des schémas simplifiés pour traiter des plasmas d'air. Ces études amont permettent d'identifier certains effets de couplage entre la vibration et la dissociation/recombinaison et d'observer dans certaines situations des écarts à des populations vibrationnelles décrites par une distribution de Boltzmann ou Treanor. À partir d'une modélisation niveau par niveau Josyula *et al.* [48] ont montré par exemple le dépeuplement (surpeuplement) des niveaux vibrationnels hauts par rapport à une distribution de Boltzmann dans le cas d'écoulement en compression (en détente). Chauveau *et al.* [51] ont calculé des distributions des niveaux vibrationnels pour des plasmas d'air en recombinaison hors d'équilibre à pression atmosphérique caractérisée par une température du gaz à $T_g = 2000$ K et une température des électrons libres beaucoup plus grande, $T_e = 15000$ K. Dans cette situation, ils observent une distribution des niveaux vibrationnels comprise entre respectivement des distributions de Boltzmann à T_e et T_g . Compte tenu de la complexité des mécanismes, les études sont généralement faites en 0D/1D mais devraient permettre à terme d'extraire des schémas réactionnels réduits afin de simuler des applications réelles.

Une simplification supplémentaire consiste à considérer que les modes vibrationnels sont,

pour les écoulements de rentrée, à l'équilibre et peuvent être caractérisés par une température $T_{v,s}$ pour chaque espèce diatomique s . Cette hypothèse largement utilisée dans la littérature pour les codes de calcul d'écoulements hypersoniques, se justifie partiellement par le fait que les temps caractéristiques des échanges vibration-vibration (VV) sont plus petits que ceux des échanges vibration-translation (VT) [29]. Cette modélisation correspond au modèle « C » du tableau I.2. Les auteurs qui utilisent cette modélisation, caractérisent l'écoulement soit par une température de vibration pour toutes les espèces diatomiques soit par plusieurs températures si on part du principe que les temps caractéristiques d'échanges d'énergie de vibration entre deux molécules différentes (VV') sont supérieurs à ceux pour des molécules semblables (VV) [29].

Le code de Candler [19], le code LORE développé par Walpot [54], le code CelHyo2D [24, 25, 55, 10, 28] développé par l'ONERA et le code URANUS [56] développé par l'IRS Stuttgart utilisent une modélisation à plusieurs températures de vibration. Les codes LAURA développé par Gnoffo [20], TINA [57, 58] développé par Fluid Gravity Engineering (FGE) utilisent au contraire une modélisation à une seule température de vibration commune à toutes les molécules. Dans les cas d'épreuve FIRE II (cf. §II.3.1) et RAM-C II (cf. §I.2) par exemple, les codes fonctionnant avec une approche multi-température vibrationnelle montrent clairement des températures distinctes pour les molécules N_2 et O_2 [54, 10].

Cas des niveaux électroniques

Concernant le peuplement des états électroniques, différents auteurs dans la littérature ont considéré une approche niveau par niveau dans les équations régissant l'écoulement. Le modèle est qualifié dans ce cas-là d'« électronique spécifique ». Tel est le cas par exemple des travaux de Broc [59], de Aliat [60], de Gorelov *et al.* [61, 9] et récemment de Panesi [26].

Dans le cas de rentrée atmosphérique terrestre, Broc [59] a pris en compte dans ses calculs les 5 premiers niveaux de l'atome N (2 niveaux métastables et 3 niveaux radiatifs). Pour peupler les niveaux de N , il a considéré essentiellement les processus d'excitation électronique par impact d'électrons et quelques processus par impact de particules lourdes. Par ailleurs, il a aussi pris en compte des processus radiatifs pour ioniser et exciter les particules d'azote. Ses résultats, obtenus sur ligne d'arrêt en Euler pour un point de la trajectoire de rentrée de la sonde Rosetta (vitesse 14.3 km/s, rayon de nez 0.5 m, altitude 63 km), montrent que les états radiatifs de N sont fortement dépeuplés par rapport à une distribution de Boltzmann tandis que les métastables sont un peu plus peuplés qu'à l'équilibre (ils servent de réservoir énergétique). Cette étude préliminaire qui ne prend en compte que quelques niveaux, indique que le déséquilibre des populations semble jouer un rôle important sur les processus d'ionisation et donc des flux radiatifs à la paroi.

Une approche similaire a été utilisée par Gorelov *et al.* [9] qui ont considéré, pour simuler sur ligne d'arrêt plusieurs points de rentrées de la sonde FIRE II, deux niveaux pour N dont un niveau radiatif, et trois niveaux pour O dont un radiatif également. Le résultat de leur travail montre que l'approche électronique spécifique donne des densités plus faibles d'électrons et des températures translationnelles plus élevées. Ce degré d'ionisation plus faible s'explique par le fait qu'ils utilisent un mécanisme d'ionisation à deux étapes : un atome de N ou O à l'état fondamental est excité sur un de ces niveaux radiatifs avant d'être par la suite ionisé. La prise en compte dans ce cas de la désexcitation par émission de cet atome entraîne un taux de production d'électron par ionisation plus faible.

Aliat [60] a de son côté considéré un écoulement de CO en configuration de tube à choc (Euler 1D) et a tenu compte de trois états électroniques de CO ($X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$). De plus pour tenir compte rigoureusement du rayonnement infrarouge de CO , il a mis en oeuvre un modèle vibrationnel spécifique pour CO . L'auteur n'a cependant pas montré de comparaison par rapport à un état d'équilibre.

Enfin Panesi *et al.* [26] ont réalisé des simulations sur FIRE II en Euler sur ligne d'arrêt avec une cinétique très détaillée prenant en compte un grand nombre de niveaux électroniques pour les atomes. Cette cinétique vient du modèle collisionnel-radiatif développé par Bultel *et al.* [62] qui est discuté dans la section I.4.2. Des écarts à la loi de Boltzmann pour des points de trajectoire fortement hors d'équilibre sont également montrés dans les travaux de Panesi *et al.* [26].

Il existe par conséquent dans la littérature plusieurs travaux qui ont consisté à résoudre les équations de Navier-Stokes en considérant plusieurs, voire de nombreux états excités électroniques. Les différentes études montrent des écarts significatifs des populations électroniques par rapport à des peuplements Boltzmanniens. Cette approche niveau par niveau est encore difficile à mettre en oeuvre dans des configurations multi-dimensionnelles (code CFD 2D ou 3D) et sont plutôt utilisées en post-traitement de calculs hydrodynamiques qui eux sont réalisés à partir de modélisations multi-température (pour tous les degrés internes des particules) qui sont plus faciles à mettre en oeuvre. Ce point est discuté dans la section I.4.2.

I.4.1.3 Approche multi-température complète

Déséquilibre thermique

L'approche multi-température complète signifie que tous les degrés de liberté i des espèces s sont à l'équilibre caractérisés par une distribution de Boltzmann à la température $T_{i,s}$. Cette modélisation correspond au modèle « D » du tableau I.2. L'ensemble des codes multidimensionnels actuels [19, 54, 10, 20, 56, 58] utilise cette modélisation pour sa simplicité de mise en oeuvre. Le schéma réactionnel est considérablement simplifié (loi de bilan sur ρ_s et non plus sur $\rho_{s,k}$). En contrepartie chaque mode d'énergie de chaque espèce caractérisée par une température différente de celle de translation des espèces lourdes est représenté par une équation de bilan d'énergie. Pour l'énergie $e_{i,s}$ du mode i et de l'espèce s , la loi de bilan se formule comme :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_s e_{i,s}) + \partial_{x^j}(\rho_s e_{i,s} u_0^j) &= \partial_{x^j}(\lambda_{i,s} \partial_{x^j} T_{i,s}) + \partial_{x^j}(\rho e_{i,s} D_s \partial_{x^j} Y_s) + \sum_{\text{espèce } s'} \sum_{\text{mode } j} \Omega_{s-s'}^{i-j} \\ &+ \sum_{\text{réaction } r} \Omega_{i,s}^{coll,r} + \sum_{\text{processus } p} \Omega_{i,s}^{rad,p} - P_{i,s}^{R,bb}, \end{aligned} \quad (I.44)$$

où $\Omega_{s-s'}^{i-j}$ représente le terme d'échange d'énergie ou terme de relaxation entre le mode d'énergie i de la particule s avec le mode j de la particule s' et $\lambda_{i,s}$ désigne la conductivité thermique pour le mode d'énergie i de l'espèce s . $\Omega_{i,s}^{coll,r}$, $\Omega_{i,s}^{rad,p}$ représentent respectivement les termes de production d'énergie, relatif au mode i et à l'espèce s , par réaction chimique r et par processus radiatif p du continuum. $P_{i,s}^{R,bb}$ est la puissance radiative relative au mode i issue des transitions radiatives lié-lié (bb) de l'espèce s . Dans la littérature, les contributions radiatives sont généralement négligées dans cette équation bilan. Par ailleurs, concernant

le quatrième terme, le terme de production d'énergie par réaction chimique, il est courant dans la littérature (en particulier pour la vibration) d'écrire :

$$\sum_{\text{réaction } r} \Omega_{i,s}^{\text{coll},r} = \dot{\omega}_s^{\text{coll}} e_{i,s}^{\text{coll}}, \quad (\text{I.45})$$

où $\dot{\omega}_s^{\text{coll}}$ est le terme de production chimique de l'espèce s et $e_{i,s}^{\text{coll}}$ l'énergie moyenne gagnée (pour le mode i) associée à ce taux de production.

TAB. I.3: Modélisation multi-température du déséquilibre thermique dans les codes hydrodynamiques.

Code	Translation des espèces lourdes	Rotation	Translations des électrons	Vibration	Électronique
Candler [19]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_{e-el}	$T_{v,m}$	T_{e-el}
Giants [7]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_{v-e}	T_{v-e}	NPC ¹
LAURA [20]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_{v-e-el}	T_{v-e-el}	T_{v-e-el}
LORE [54]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_{e-el}	$T_{v,m}$	T_{e-el}
Gökçen [31]	T_t	T_r	T_{v-e-el}	T_{v-e-el}	T_{v-e-el}
TINA [58]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_{v-e-el}	T_{v-e-el}	T_{v-e-el}
URANUS [56]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_{e-el}	$T_{v,m}$	T_{e-el}
CelHyo2D [10]	T_{t-r}	T_{t-r}	T_e	$T_{v,m}$	NPC ¹

¹NPC : Non Prise en Compte du mode d'énergie *i.e.* que son énergie est négligée).

Le tableau I.3 indique les modèles retenus dans les principaux codes de calculs utilisés actuellement. Une grande diversité est observée dans la modélisation du déséquilibre. Par exemple, le déséquilibre vibrationnel est représenté par une ou plusieurs températures suivant l'importance qu'accordent les auteurs aux échanges VV' comme discuté dans la section précédente. Lorsqu'une seule température de vibration est considérée, celle-ci est généralement associée à la température des électrons libres et à la température électronique des particules lourdes. La première hypothèse est justifiée selon Park [63, 12] par le fait que les échanges d'énergie entre les électrons libres et le mode vibrationnel de N_2 sont particulièrement efficaces, hypothèse néanmoins nuancée par Gorelov *et al.* [9] qui précisent que ces échanges e-V sont seulement efficaces lorsque le degré de dissociation de N_2 n'excède pas 10 %. Concernant la température électronique, Sharma [64] et Park [12] indiquent que les phénomènes d'excitation électronique et d'ionisation sont principalement dus à des impacts d'électrons. Par conséquent, certains auteurs utilisent l'égalité $T_{el} = T_e = T_v$. Par ailleurs, certains codes comme CelHyo2D [10] et Giants [7] négligent l'énergie électronique des particules lourds. Soubrié [10] a évalué a posteriori la part que représenterait l'énergie électronique des particules en considérant une distribution de Boltzmann des niveaux électroniques à la température des électrons libres et a conclu que cette énergie représentait au plus 6 % de l'énergie interne du fluide sur des cas de rentrée tels que FIRE II et RAMC-II.

Différentes modélisations plus ou moins fines sont envisagées dans la littérature avec des hypothèses plus ou moins légitimes pour caractériser le déséquilibre thermique. À chaque « jeu » de températures est associé un certain nombre de termes de relaxation généralement

pilotés par des temps de relaxation issus de calculs théoriques ou de résultats expérimentaux bien souvent extrapolés. Le manque de données expérimentales qui s'explique par des conditions très difficiles à reproduire, empêche cependant de valider ou d'invalider avec certitude telle ou telle modélisation.

Cinétique chimique pour un modèle multi-température

On s'intéresse ici aux taux de production uniquement chimique des espèces dans le cadre d'une approche multi-température. La forme générale d'une réaction r s'écrit alors :

$$\sum_{s=1}^{N_{esp}} \nu'_{s,r} \mathfrak{X}_s \xrightleftharpoons[k_b^r]{k_f^r} \sum_{s=1}^{N_{esp}} \nu''_{s,r} \mathfrak{X}_s, \quad (\text{I.46})$$

où $\mathfrak{X}_s$ est l'espèce chimique désignée par l'indice s , $\nu'_{s,r}$ et $\nu''_{s,r}$ les coefficients stoechiométriques des réactifs et des produits. k_f^r et k_b^r sont respectivement les constantes de vitesse directe et inverse de la réaction r . Elles s'expriment généralement sous la forme d'une loi de type Arrhenius telle que :

$$k_f^r = A_f^r T_a^{B_f^r} \exp\left(-\frac{\theta_f^r}{T_a}\right) \quad (\text{I.47})$$

$$k_b^r = A_b^r T_a^{B_b^r} \exp\left(-\frac{\theta_b^r}{T_a}\right), \quad (\text{I.48})$$

où les constantes A_f^r , A_b^r , B_f^r , B_b^r , θ_f^r , θ_b^r sont indépendantes de la température et sont déterminées à partir de mesures expérimentales (tube à choc). La température T_a est la température d'activation de la réaction. À l'équilibre, T_a est la température du milieu. Le cas des milieux hors d'équilibre que nous traitons est abordé par la suite dans le paragraphe dédié au couplage entre la chimie et la vibration. Les coefficients cinétiques k_f^r et k_b^r sont sujets à de grandes incertitudes d'autant plus qu'ils sont généralement extrapolés dans des gammes de température bien au-delà de la gamme de température accessible expérimentalement et donc non validés. À l'ETL, ces deux constantes sont reliées à la constante d'équilibre K_r par la relation :

$$K_r = \frac{k_f^r}{k_b^r}. \quad (\text{I.49})$$

Cette constante d'équilibre peut être déterminée à partir de la thermodynamique. Dans le cas pratique, on dispose généralement de cette constante d'équilibre et d'une seule constante de vitesse. La relation I.49 est alors utilisée pour déterminer l'autre constante de vitesse.

Avec le formalisme de l'expression I.46, le taux de production chimique $\dot{\omega}_s^{coll}$ présent dans la relation I.45 pour l'espèce s s'exprime :

$$\dot{\omega}_s^{coll} = M_s \sum_{\text{réaction } r} (\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[k_f^r \prod_{s'=1}^{N_{esp}} \left(\frac{\rho_{s'}}{M_{s'}} \right)^{\nu'_{s',r}} - k_b^r \prod_{s'=1}^{N_{esp}} \left(\frac{\rho_{s'}}{M_{s'}} \right)^{\nu''_{s',r}} \right] \quad (\text{I.50})$$

Il existe dans la littérature plusieurs mécanismes réactionnels développés depuis les années 60-70 pour des applications de rentrée atmosphérique. Il s'agit de schémas allant de cinétique simple à 5 espèces (N_2 , O_2 , NO , N , O) adaptés pour des applications à basse vitesse (schémas de Gardiner [65], Moss [66] et Shatalov [67]...) à des schémas plus complets

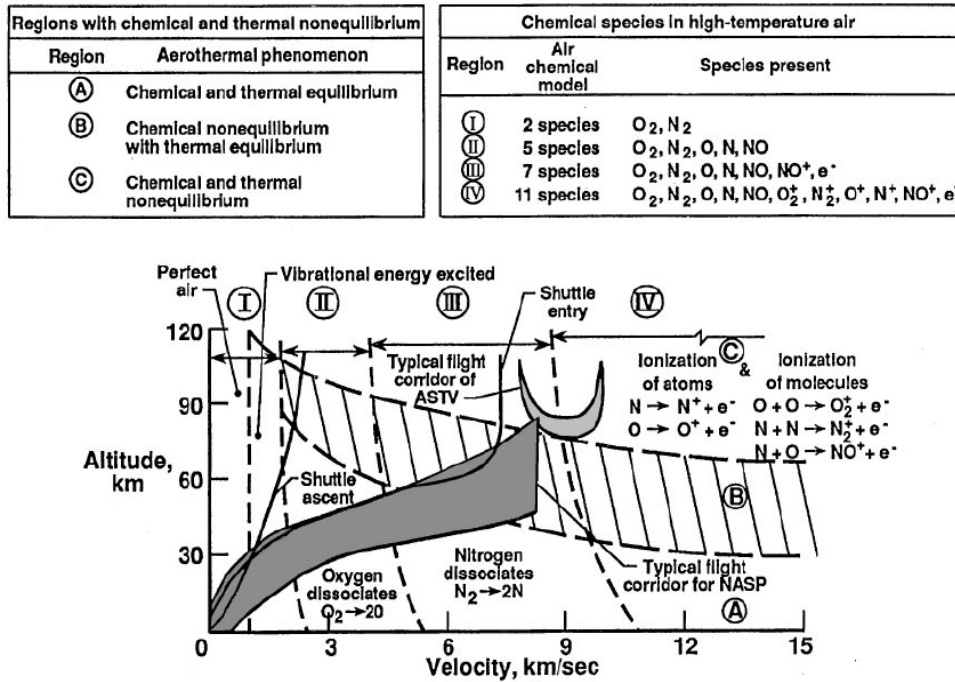


FIG. I.2: Caractérisation thermochimique de l'écoulement d'air en fonction de l'altitude et de la vitesse autour d'une sphère de 30,5 cm de rayon [14].

tenant compte d'espèces ionisées N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ et e^- pour les rentrées à plus hautes vitesses (schémas de Park [68, 69] et de Dunn et Kang [70]). La figure I.2 indique à ce propos les caractéristiques thermochimiques d'un écoulement d'air autour d'une sphère en fonction de son altitude et de sa vitesse. Avec la vitesse, les molécules de l'air se dissocient en premier lieu avant de s'ioniser pour les cas à plus hautes vitesses. Dans notre cas d'étude, les vitesses envisagées ($v \geq 10$ km/s) sont suffisamment importantes pour devoir prendre en compte l'ionisation de l'écoulement. L'ionisation est due en premier lieu à la réaction d'ionisation associative $N + O \rightarrow NO^+ + e^-$ qui crée les premiers électrons [16, 68] : on est dans la situation indiquée par la région III sur la figure I.2. Pour des écoulements plus rapides, l'ionisation des atomes par impact d'électrons telle que $N + e^- \rightarrow N^+ + 2e^-$ devient par la suite prédominante créant ainsi des électrons en cascade. L'ionisation des molécules intervient pour des vitesses de rentrée encore plus élevées pour lesquelles les collisions sont plus fortes. Par conséquent, les phénomènes d'ionisation sont d'autant plus importants que les vitesses de rentrée sont élevées. Par ailleurs, comme le montre Gorelov *et al.* [9] et Park [8], l'ionisation est un phénomène important pilotant une partie des processus physico-chimiques comme la relaxation, c'est pourquoi les constantes de vitesse associées à ces réactions doivent être précises et fiables. On relèvera simplement ici que les schémas implémentés dans les codes multi-température sont généralement les schémas de Park [69] et Dunn et Kang [70]. Là encore ces schémas ont été partiellement validés sur des gammes de températures restreintes à partir de mesures expérimentales. On ne peut qu'accorder un certain degré de confiance en ces mécanismes réactionnels d'autant plus que pour des milieux hors d'équilibre vibrationnel, il existe un couplage relativement mal modélisé entre la chimie et la vibration. Ce point est entre autre discuté dans le paragraphe qui suit.

Couplage vibration/chimie

Dans un modèle multi-température, où les espèces ne sont pas traitées niveau par niveau, une interaction entre la vibration et la chimie doit être prise en compte pour pallier le fait que les constantes de réaction disponibles ne sont pas multi-température et que les équations de bilans d'énergie de vibration conservent uniquement des grandeurs moyennes. Ce couplage vibration/chimie se manifeste alors sous deux formes : la première étant l'effet de la vibration des molécules sur les taux de production des réactions chimiques et la seconde est l'effet de la chimie sur la production d'énergie vibrationnelle. Elles sont toutes deux décrites successivement dans ce qui suit.

- Lors d'une collision mettant en jeu une molécule, une dissociation se produit en fonction des énergies cinétiques et de l'excitation interne des particules entrant en collision. Le niveau d'excitation vibrationnelle de la molécule joue par conséquent un rôle important dans les mécanismes de dissociation. Dans les milieux hors d'équilibre, les niveaux vibrationnels peuvent être plus ou moins peuplés par rapport à une distribution à l'équilibre. Cette surpopulation ou sous-population entraîne alors des modifications sur les taux de dissociation calculés à l'équilibre thermique. Ceci représente l'influence de la vibration sur la dissociation. Pour en tenir compte, on utilise des modèles de Couplage Vibration Dissociation (CVD). De même que pour la dissociation, la recombinaison qui se produit de manière préférentielle sur les hauts niveaux vibrationnelles est aussi affectée par la vibration. On parle dans ce cas de Couplage Vibration Recombinaison (CVR). Dans notre cas d'étude où l'écoulement est en compression, les phénomènes de dissociation sont prépondérants, mais la présence de la paroi fait que les mécanismes de recombinaison sont aussi importants. Par ailleurs, on notera que les taux de réaction des mécanismes de Zel'dovich,



peuvent être également soumis à l'influence de la vibration. Il s'agit dans ce cas du Couplage Chimie Vibration pour les réactions d'échange (CVCE). Dans une approche vibrationnelle spécifique, cette interaction vibration/chimie est intrinsèquement prise en compte car les constantes de réaction sont par nature définies pour chaque niveau. Cependant dans une approche multi-température, les constantes de vitesse sont globales et il est difficile d'y intégrer les effets vibrationnels de manière simple. Depuis la fin des années 50, de nombreux auteurs, à commencer par Hammerling *et al.* [71] ont travaillé sur des modèles prenant en compte la vibration dans les constantes de réactions. Les modèles peuvent être classés en deux groupes : les modèles semi-empiriques et les modèles analytiques. Les modèles du premier groupe sont basés sur des résultats expérimentaux et sont généralement extrapolés bien au-delà de leur domaine de validité sans justification physique. C'est le cas par exemple des modèles de Marrone et Treanor [72], Losev [73] et Park [63]. L'autre groupe contient les modèles analytiques basés sur des lois physiques et sur une analyse mathématique des collisions entre particules (modèles de Macheret *et al.* [74], Kuznetsov [75], etc). Ces modèles dépendent également de paramètres mais de paramètres physiques tels que des potentiels, probabilités de transitions, la forme du seuil de réaction, etc.

De manière générale, l'ensemble de ces modèles revient à déterminer un facteur de cou-

plage Z dépendant de la température de translation T et de vibration T_v défini par

$$Z(T, T_v) = \frac{k(T, T_v)}{k^\circ(T)} \quad (\text{I.53})$$

où k et k° désignent respectivement la constante de vitesse de la réaction considérée en prenant en compte les effets vibrationnels avec la température T_v , et la constante de vitesse à l'équilibre thermique *i.e.* évaluée à T . Ce facteur Z peut, suivant les modèles, être déterminé pour les réactions de dissociation, de recombinaison et d'échange. Il dépend en général, d'un ou plusieurs paramètres ajustables suivant le modèle. Parmi la grande diversité de modèle, William [28] a fait une analyse de ces modèles en représentant le facteur Z pour un grand nombre de modèles existants. Il conclut sur une grande disparité des résultats aussi bien entre les modèles semi-empiriques qu'entre les modèles plus théoriques. De plus, le manque cruel de validation expérimentale rajoute une difficulté supplémentaire au choix d'un modèle. Dans la littérature, on note toutefois que les modèles les plus utilisés pour la dissociation sont le modèle de Park [63] et de Marrone et Treanor [72] pour leur simplicité de mise en oeuvre. Le modèle de Park [63] a été formulé à partir d'une approche pragmatique simple permettant d'obtenir des validations partielles sur les quelques expériences faites en tube à choc. Il se traduit par la définition d'une température d'activation T_a , telle que $k_f(T, T_{v,m}) = k_f(T_a)$ avec $T_a = T^g T_v^{1-g}$ où g est le paramètre du modèle. Dans ces divers travaux, Park a préconisé $g = 0.5$ puis $g = 0.7$ en s'appuyant sur des résultats expérimentaux. L'utilisation de ce modèle est néanmoins très discutable hors de son domaine de validation. C'est pourquoi les codes de calcul disposent parfois de plusieurs modèles de couplage pour déterminer le facteur Z comme les codes LAURA [20], LORE [54] et CelHyo2D [28, 10] où sont intégrés entre autre le modèle de Park mais aussi le modèle de Marrone et Treanor [72].

- Le second effet de l'interaction vibration/chimie intervient sur les bilans d'énergie. Dans le cas de la dissociation par exemple, lorsqu'une molécule se dissocie, son énergie vibrationnelle correspondant à son niveau d'excitation est convertie sous une autre forme d'énergie. Cette d'énergie perdue n'est pas, *a priori*, égale à l'énergie vibrationnelle moyenne de l'espèce. Pour prendre en compte cet écart, des modèles de Couplage Vibration Dissociation Vibration (CVDV) ont été formulés. Un raisonnement similaire peut être fait pour la recombinaison et les réactions d'échange. On parle alors par analogie à la dissociation de couplage CVRV et CVCEV. Ces modèles de couplage se résument à l'ajout d'un terme source dans l'équation de relaxation vibrationnelle (type I.44). Pour les réactions r de dissociation/recombinaison d'une molécule m , la relation I.45 (pour le mode vibrationnel) devient alors :

$$\dot{\omega}_m^{coll} e_{v,m}^{coll} = \dot{\omega}_m e_{v,m} - \underbrace{\dot{\omega}_m^+ (e_{v,m}^d - e_{v,m})}_{\text{CVDV}} + \underbrace{\dot{\omega}_m^- (e_{v,m}^r - e_{v,m})}_{\text{CVRV}} \quad (\text{I.54})$$

où $e_{v,m}$ est l'énergie moyenne de l'espèce m , et $e_{v,m}^d$ et $e_{v,m}^r$ sont respectivement les énergies de vibration moyenne perdue lors d'une dissociation et gagnée d'une recombinaison. $\dot{\omega}_m$, $\dot{\omega}_m^+$ et $\dot{\omega}_m^-$ sont respectivement les taux de production par dissociation/recombinaison, par dissociation et par recombinaison. Le deuxième terme du membre de droite correspond au couplage CVDV et le troisième au couplage CVRV. Peu de modèles ont été formulés pour donner la valeur des énergies $e_{v,m}^d$, $e_{v,m}^r$. Les auteurs ayant travaillé sur le couplage chimie/vibration donnent généralement des coefficients empiriques pour exprimer ces énergies

comme des fractions de l'énergie de dissociation ou de l'énergie moyenne $e_{v,m}$ de la molécule telle que par exemple

$$e_{v,m}^d = \alpha e_{v,m} \quad \text{ou} \quad e_{v,m}^d = \alpha' D_0, \quad (\text{I.55})$$

avec D_0 est l'énergie de dissociation de la molécule, α et α' sont les paramètres du modèle. À noter que ce n'est que dans de rares cas que les auteurs d'un modèle CVD (CVR) préconisent un modèle CVDV (CVRV) consistant. C'est le cas par exemple de Marrone et Treanor [72].

De manière plus générale pour les réactions de dissociation, William [28] a établi à partir de la définition de $k_f(T, T_{v,m})$ une expression de $e_{v,m}^d$ faisant intervenir le facteur de couplage Z . En effet, k_f s'exprime comme

$$k_f(T, T_{v,m}) = \sum_v k_{v \rightarrow d}(T) f_m(T_{v,m}), \quad (\text{I.56})$$

où $k_{v \rightarrow d}$ est la constante de dissociation de la molécule m dans l'état vibrationnel v et $f_m(T_{v,m}) = n_{m,v}/n_m$ le rapport entre la population vibrationnelle du niveau v et la population totale de l'espèce m . En dérivant cette expression par rapport à $1/k_b T_{v,m}$, on obtient la relation :

$$e_{v,m}^d(T, T_{v,m}) = -\frac{R}{k_b M_m} \frac{\partial \ln(Z(T, T_{v,m}))}{\partial (1/k_b T_{v,m})} + e_{v,m}(T_{v,m}). \quad (\text{I.57})$$

Ainsi pour chaque modèle CVD, on peut obtenir une relation définissant le couplage CVDV associé. À noter que la relation I.57 permet de bien retrouver le modèle CVDV préconisé par Marrone et Treanor [72].

Pour la recombinaison, puisque l'énergie mise en jeu est celle des partenaires collisionnels qui sont sans énergie de vibration, l'énergie gagnée par recombinaison ne dépend que de la température de translation. L'énergie $e_{v,m}^r$ ne dépend alors que de T . En se plaçant à l'équilibre, on trouve alors la relation $e_{v,m}^r(T) = e_{v,m}^d(T, T)$ pour le couplage CVRV. Ceci ne prend cependant pas en compte la recombinaison préférentielle sur certains niveaux de vibration. Le problème du couplage CVRV est relativement peu abordé dans la littérature.

Cas des réactions d'ionisation par impact d'électron

L'ionisation est affectée par le déséquilibre thermique existant entre la translation des particules lourdes (à T) et celle des électrons libres (à T_e). Lorsqu'il est pris en compte, c'est au moyen d'un couplage similaire à celui de Park pour le couplage pour la vibration : la constante de vitesse directe dépendant des deux températures de translation $k_f(T, T_e)$ est prise égale à $k_f(T_a)$ avec $T_a = T^{g_e} T_e^{1-g_e}$ où g_e est le paramètre du modèle. Dans la plupart des cas, g_e est pris égal à 0, *i.e.* $T_a = T_e$ compte tenu de la différence de masse entre un électron et une particule lourde.

I.4.2 Prise en compte du rayonnement

Pour déterminer le flux radiatif à la surface d'un corps de rentrée, il faut calculer le flux incident issu du rayonnement de la couche de choc et le flux partant issu de l'émission de la paroi.

En général, compte tenu de la difficulté de connaître l'émissivité de la paroi en condition de vol (surtout si celle-ci est ablative), le calcul du flux partant est généralement réalisé de manière pragmatique en considérant la paroi comme un corps noir. Le flux radiatif surfacique quittant la paroi, noté q_{rad}^- , est alors régi par la loi de Stefan-Boltzmann tel que :

$$q_{rad}^- = \sigma_b T_p^4 \quad (I.58)$$

où T_p est la température de paroi, σ_b la constante de Stefan-Boltzmann. Cette contribution est généralement prise en compte pour tout type de rentrée atmosphérique que ce soit pour les applications militaires ($V \approx 6$ km/s), les rentrées orbitales ($V \approx 8$ km/s) ou bien encore les retours lunaires ou martiens ($V \geq 10$ km/s).

Passé une certaine vitesse, l'élévation de la température dans la couche de choc devient suffisamment importante pour que l'écoulement, alors à l'état de plasma, rayonne de manière significative *i.e.* suffisamment pour que la paroi reçoive une charge radiative non négligeable voire prédominante devant la charge convective.

Avec l'émergence de programmes spatiaux et militaires à la fin des années 50 et début 60, des études se sont alors intéressées à la prise en compte du rayonnement émis par l'écoulement pour évaluer son impact en terme de flux aux parois des engins de rentrée. On peut citer par exemple les études de Hammerling *et al.* [71], Allen *et al.* [76] et Howe *et al.* [77]. Ces dernières ont consisté à considérer le gaz optiquement mince ou gris et l'écoulement à l'équilibre thermo-chimique. Un couplage simple entre l'écoulement est parfois envisagé en injectant un terme source radiatif dans l'équation de bilan d'énergie. D'autres études dans la fin des années 60, comme celle de Hoshizaki *et al.* [78], Goulard *et al.* [79] et Anderson [80] ont considéré le gaz non gris et/ou formulé une modélisation approchée pour un milieu considéré optiquement mince ou très épais. La complexité du problème, venant en grande partie de la difficulté de traiter le rayonnement en déséquilibre thermo-chimique (loi de Kirchhoff non valide entre autre), de la grande diversité des processus radiatifs, de la non localité du rayonnement (résolution de l'équation de transfert radiatif dans tout l'espace) et de la difficulté de représenter l'interaction rayonnement/hydrodynamique, fait que les résultats de ces études sont essentiellement qualitatifs. Néanmoins il résulte de celles-ci une meilleure compréhension de l'effet du rayonnement : (i) pour des vitesses inférieures à environ 8 km/s la température du gaz n'est pas assez élevée pour que le rayonnement contribue de manière significative à l'échauffement de la paroi (c'est pourquoi dans les applications militaires où les vitesses sont relativement basses, $V \approx 6$ km/s, le rayonnement de l'écoulement est toujours négligé), (ii) pour des vitesses supérieures à 10 km/s le rayonnement devient un mode de transport d'énergie aussi important que la convection, (iii) l'effet du couplage entraîne un refroidissement de la couche de choc (phénomène appelé « radiation cooling »), et le flux conducto-convectif à la paroi s'en trouve réduit (jusqu'à 50 % selon Howe *et al.* [77] dans le cas d'une rentrée à 15 km/s pour un rayon de nez de 1.5 m) ainsi que la distance paroi-choc [80]. La conclusion sur la réduction du flux conducto-convectif est à nuancer quelque peu dans la mesure où une partie du flux radiatif allant vers la paroi peut être absorbée dans la couche limite de telle sorte que le flux conducto-convectif soit plus élevé.

Depuis les années 70-80, les activités portant sur la modélisation des couches de choc radiatives se sont intensifiées tant du point de vue cinétique que du rayonnement. Après quelques généralités sur les différents types de processus radiatifs rencontrés dans les plasmas de rentrée, on exposera la démarche et les outils de calcul à mettre œuvre (ou mis

en oeuvre dans la littérature) afin de déterminer les transferts radiatifs et l'interaction écoulement/rayonnement.

I.4.2.1 Processus radiatifs

Dans le cadre de notre étude, le milieu est considéré comme semi-transparent et non diffusant (cf. §I.38). Pour un tel milieu, il existe une interaction entre le système matériel et le champ de rayonnement. Cette interaction correspond aux phénomènes d'émission et d'absorption. L'émission spontanée est une conversion d'énergie matérielle (énergie associée aux degrés de liberté que sont la translation, la rotation, la vibration, l'excitation électronique) en une énergie radiative (photons). L'absorption de rayonnement correspond à la conversion inverse d'énergie radiative en énergie matérielle. Le phénomène antagoniste à l'absorption est l'émission induite qui peut être considérée comme une résonance entre un photon exciteur et une particule qui conduit à la production d'un photon identique.

Ces trois échanges d'énergie se produisent au cours de processus radiatifs que l'on peut regrouper en trois catégories :

- les transitions lié-lié : Ces transitions ont lieu entre deux niveaux d'énergie (deux états électroniques pour un atome ou deux états rovibroniques pour une molécule). Chaque transition est associée à une raie spectrale en émission et en absorption caractérisée par sa position spectrale (fonction de l'écart énergétique entre les deux états) et par son amplitude (fonction de son intensité et des populations des niveaux haut et bas de la transition). À cause des phénomènes d'élargissement de raie (effet Doppler, largeur collisionnel, largeur naturelle...), une raie est représentée avec un profil spectral (Doppler, Lorentz ou Voigt suivant les conditions thermophysiques et la gamme spectrale). Plus de détails sur les phénomènes d'élargissements et les profils associés sont donnés dans le chapitre II.

- les transitions lié-libre : Ce type de processus entraîne une transformation de l'espèce qui est en interaction avec le champ de rayonnement. L'absorption d'un photon donne lieu à une ionisation ou une dissociation d'une particule, on parle alors de photoionisation ou de photodissociation. Dans le sens inverse, la recombinaison radiative de deux particules donne lieu à l'émission d'un photon. Le processus a donc lieu entre un état lié d'une particule et deux particules à l'état dit « libres » eu égard à leur mouvement de translation relatif. Le spectre de ces transitions est alors continu. Les spectres en émission et en absorption de ces transitions dépendent des populations des niveaux mis en jeu et des sections efficaces de réaction.

- les transitions libre-libre : Ce type de processus résulte de l'interaction entre un électron et une particule lourde. Il se traduit par le freinage ou l'accélération de l'électron. L'écart d'énergie cinétique correspond à l'énergie échangée avec le champ radiatif. Les états initiaux et finaux du couple e^- /particule lourde appartenant à un continuum, le spectre associé à ces transitions est par conséquent lui aussi continu. Les spectres de ces transitions dépendent aussi de sections efficaces et de densités particulières. Le rayonnement résultant de ce mécanisme est appelé bremsstrahlung [16].

L'ensemble des transitions conduisant à un spectre continu est regroupé sous l'appellation « continuum ».

I.4.2.2 Démarche et outils de calcul du rayonnement et de son interaction avec l'écoulement

Le rayonnement étant un phénomène non local, les calculs de transferts radiatifs sont généralement effectués par post-traitement au calcul CFD. Pour tenir compte de l'interaction écoulement/rayonnement, un couplage peut être effectué en injectant à l'issue du post-traitement des contributions radiatives dans les équations de l'hydrodynamique. Par itérations successives des calculs CFD et de transferts radiatifs (jusqu'à convergence), on obtient ainsi un résultat (flux convectif et radiatif) qui tient compte de l'interaction écoulement/rayonnement.

De manière générale, les démarches à suivre et les outils à mettre en œuvre pour réaliser le post-traitement et le couplage, qui est un point délicat, dépendent en partie de la précision recherchée et de la modélisation cinétique utilisée lors du calcul CFD. On décrit par la suite le cas très général et très détaillé de l'approche « rotationnelle spécifique » (cf. §I.4.1.1) avec des méthodes précises pour traiter le rayonnement. Cette démarche et ces outils de référence ne sont jamais mis en œuvre (ou partiellement) dans la littérature de par sa complexité et des ressources informatiques importantes qu'elle nécessite. Cependant, elle permet d'introduire et de discuter les simplifications généralement faites dans la littérature afin de traiter le rayonnement.

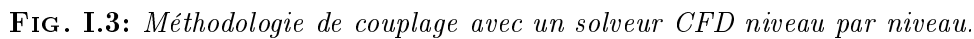
Démarche et outils de référence

Dans l'approche très détaillée « rotationnelle spécifique » (modèle « A » du tableau I.2), les équations à résoudre sont celles du système I.42 où les termes radiatifs interviennent à deux niveaux : (i) dans les taux de production des espèces (s, k) (s étant l'espèce chimique et k le niveau d'énergie occupé) de l'équation de bilan de la masse de chaque espèce (s, k) et dans l'équation de bilan de l'énergie des électrons libres, et (ii) dans l'équation bilan de l'énergie totale avec un terme source de puissance radiative. Le schéma de la figure I.3 montre la démarche à suivre pour résoudre ce système de manière itérative.

- Tout d'abord, un premier calcul CFD sans contributions radiatives donne une première estimation du flux convectif ainsi que les températures de translation et les densités de chaque espèce (s, k). Ces données sont utilisées pour déterminer les coefficients d'émission et d'absorption dans la couche de choc via un modèle de propriétés radiatives et une base de données spectroscopiques adaptés aux milieux hors ETL.

- Le modèle de propriétés radiatives le plus précis est le modèle raie par raie pour lequel chaque raie associée à une transition est discrétisée avec un pas spectral suffisant. Les coefficients d'émission et d'absorption sont alors obtenus sous forme de spectre à haute résolution. Les processus radiatifs pris en compte dans les problèmes de rentrée faisant intervenir plusieurs millions de transitions (la plupart dues aux systèmes moléculaires) dans des gammes spectrales allant de l'infrarouge (IR) au vacuum ultra-violet (VUV), les grilles spectrales utilisées pour ce type d'approche comptent plusieurs millions de points. Pour une géométrie multi-dimensionnelle, les temps de calcul et la place mémoire de l'approche raie par raie sont prohibitifs. Elle sert néanmoins de modèle de référence lorsqu'elle peut être utilisée.

Le modèle raie par raie nécessite d'avoir une base de données spectroscopiques qui regroupe l'ensemble des données nécessaires (coefficients d'Einstein, positions, profils, sections



• Ensuite, une méthode de résolution de l'ETR adaptée à la configuration géométrique et au modèle de propriétés radiatives utilisé précédemment, est mise en oeuvre. Cette dernière étape permet notamment d'obtenir le flux radiatif à la paroi. Une méthode de référence de résolution de l'ETR est la méthode du lancer de rayons. Dans cette méthode, l'espace angulaire entourant chaque point est discrétisé en angles solides élémentaires. Pour chaque direction et pour chaque point spectral, un rayon est « lancé ». La luminance est alors calculée en ce point lorsque tous les rayons sont lancés à travers toute la géométrie qui est préalablement découpée en éléments homogènes. Cette méthode reste cependant très coûteuse en temps de calcul lorsque la géométrie contient beaucoup d'éléments homogènes et/ou que la discrétisation spectrale est importante.

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{s,k}^{rad} = \left(\frac{\partial n_{s,k}}{\partial t} \right)_{rad} &= \sum_{k' > k} \left(\underbrace{A_{k'k} n_{s,k'}}_{\text{émission}} - \underbrace{\int_0^{+\infty} [(B_{kk'} n_{s,k} - B_{k'k} n_{s,k'}) u_{\sigma} f_{k'k}(\sigma - \sigma_{k'k})] d\sigma}_{\text{absorption}} \right) \\ &- \sum_{k' < k} \left(\underbrace{A_{kk'} n_{s,k}}_{\text{émission}} - \underbrace{\int_0^{+\infty} [(B_{kk'} n_{s,k'} - B_{kk} n_{s,k}) u_{\sigma} f_{kk'}(\sigma - \sigma_{kk'})] d\sigma}_{\text{absorption}} \right), \end{aligned}$$

(I.59)

en ne tenant compte ici que des processus lié-lié. Pour une transition entre le niveau haut k et bas k' de la particule s , $A_{kk'}$, $B_{kk'}$ et $B_{k'k}$ sont les coefficients d'Einstein associés à la transition, $f_{kk'}(\sigma - \sigma_{kk'})$ le profil spectral de la transition centrée en $\sigma_{kk'}$ et u_σ l'énergie radiative par unité de volume et unité de nombre d'onde au point M où est évalué le taux de production :

$$u_\sigma = \frac{1}{c} \int_{4\pi} L_\sigma(M, \mathbf{u}) d\Omega. \quad (\text{I.60})$$

Contrairement au terme de production par collisions des espèces (s, k) pour lequel les constantes de réaction sont très disparates dans la littérature pour une modélisation niveau par niveau, l'ensemble des données nécessaires (coefficients d'Einstein, position...) pour évaluer le terme de production par rayonnement I.59 peut être trouvé dans la base de données spectroscopiques utilisée pour déterminer les propriétés radiatives.

Contrairement aux processus d'émission qui ne dépendent que des conditions locales, la prise en compte de l'absorption dans l'expression I.59 est plus compliquée car elle nécessite de connaître u_σ et donc le champ de luminance spectrale en tout point de la géométrie via la résolution de l'ETR. Pour ce faire, le modèle de propriétés radiatives doit nécessairement être raie par raie de même que la résolution de l'ETR. Cette étape est la plus complexe à mettre en œuvre et n'a jamais été envisagée dans la littérature pour des plasmas de rentrée compte tenu du grand nombre de niveaux d'énergie des particules à prendre en compte et de la discrétisation spectrale.

Dans la littérature, pour simplifier l'ensemble de la démarche, des hypothèses sont généralement faites sur la modélisation cinétique et des méthodes/modèles approchés sont généralement utilisés pour déterminer les propriétés radiatives et résoudre l'ETR. Les paragraphes qui suivent décrivent ces démarches approchées.

Démarches et outils approchés

Le schéma de la figure I.4 montre la méthodologie simplifiée (par rapport au cas précédent) mise généralement en œuvre dans la littérature pour traiter le rayonnement et le couplage ([20],[10],[7],[27],...). Les principales étapes de la méthodologie sont décrites ci-dessous :

- Au niveau du solveur CFD, hormis quelques travaux qui prennent en compte quelques voire plusieurs niveaux atomiques (cf. §I.4.1.3, paragraphe « Cas des niveaux électroniques »), le peuplement des niveaux des particules est considéré comme Boltzmannien avec une approche multi-température. Le premier calcul CFD est réalisé sans terme radiatif et fournit les densités n_s des espèces chimiques s ainsi que les différentes températures de la modélisation.

- Un modèle de peuplement des niveaux électroniques est parfois utilisé en post-traitement afin de tenir compte d'un écart éventuel à une distribution de Boltzmann. Des études [26, 27, 59] ont montré notamment que la distribution des états excités électroniques ne suit pas une distribution d'équilibre dans le cas de choc fort. La vibration et la rotation sont quant à elles considérées à l'équilibre à des températures données par le solveur CFD.

Le post-traitement est réalisé avec un code de calcul de populations électroniques incorporant des effets collisionnels et des effets radiatifs d'excitation et de désexcitation. On parle de modèle collisionnel-radiatif (CR). Deux types de modèle CR sont formulés dans la

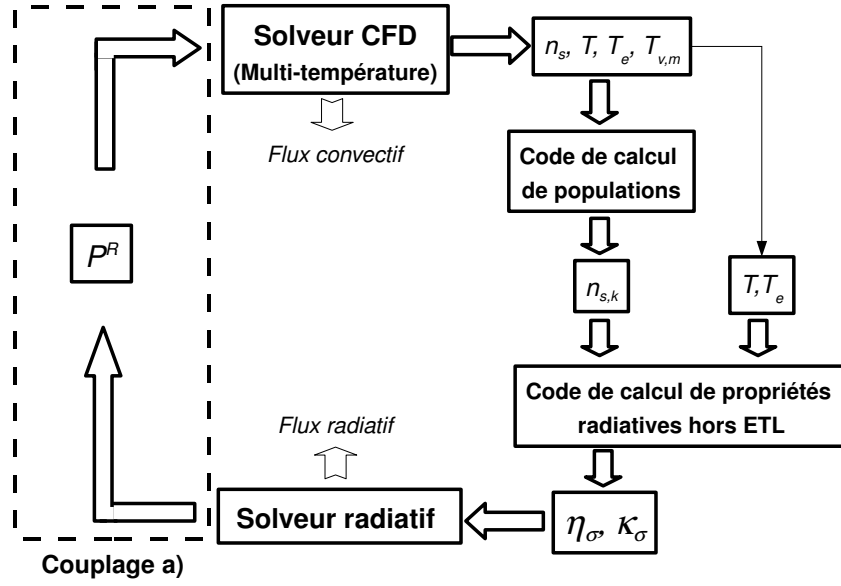


FIG. I.4: Méthodologie de couplage avec un solveur CFD multi-température.

littérature. Le premier est basé sur l'approche CR Quasi-Steady-State (CR QSS), où l'on considère que les processus d'excitation et de relaxation sont instantanés par rapport au temps convectif. Cette approche est notamment utilisée dans les codes PARADE [83], NEQAIR2 [82], LORAN [21] et NEQRAD [18]. Ces codes laissent tout de même la possibilité d'utiliser des distributions Boltzmanniennes pour représenter les degrés internes électroniques des particules. Le deuxième type de modèle tient compte de l'intégration en temps pour laquelle les équations de bilans des populations sont résolues sans hypothèses sur leur temps de relaxation. Cette approche est nommée « time-depend CR ». Cette modélisation est par exemple mise en oeuvre dans le code ABBA [26, 62] et dans les travaux de Magin *et al.* [90].

La mise en œuvre d'un modèle CR revient à déterminer les populations n_s^i d'une espèce chimique s dans l'état électronique i en utilisant le terme source :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{coll-rad} = & \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{elec-imp-ex} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{pl-imp-ex} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{elec-imp-ion} \\ & + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{pl-imp-ion} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{elec-imp-diss} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{pl-imp-diss} \\ & + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-ex} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-ion} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-diss} \end{aligned} \quad (I.61)$$

où les six premiers termes représentent respectivement les taux de production chimique de n_s^i par excitation/déexcitation (*ex*), ionisation/recombinaison (*ion*) et dissociation/recombinaison (*diss*) par impact (*imp*) avec les électrons (*elec*) et les particules lourdes (*pl*). Les trois derniers termes sont ceux dus aux processus radiatifs (*rad*) d'excitation, d'ionisation et de dissociation avec leurs processus inverses associés. À ce stade, l'approche QSS consiste à imposer :

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{coll-rad} \approx 0. \quad (I.62)$$

Cependant des études comme celle de Magin *et al.* [90] ont montré que cette approche n'est pas toujours valable juste derrière le choc où le déséquilibre est le plus fort. Park [91] indique de plus que l'hypothèse I.62 n'est généralement pas valable pour les niveaux fondamentaux et les métastables. Pour contourner ce dernier problème, Johnston [27] qui utilise aussi un modèle CR QSS considère que les niveaux fondamentaux et les métastables sont à l'équilibre et suivent une distribution de Boltzmann à la température des électrons libres. L'autre approche, celle du « time dependent CR », s'affranchit de l'hypothèse I.62. Sa mise en œuvre revient à utiliser une formulation Lagrangienne où le peuplement des niveaux est déterminé pas à pas à la vitesse du fluide (plus précisément à champs hydrodynamique figé) suivant la relation :

$$u \frac{\partial Y_s^i}{\partial x} = \left(\frac{\partial Y_s^i}{\partial t} \right)_{coll-rad}, \quad (I.63)$$

où Y_s^i désigne la fraction massique de l'espèce s dans l'état électronique i .

Que ce soit dans une approche QSS CR ou time depend CR, les termes de l'équation I.61 peuvent être classés en deux groupes : ceux qui engendrent une transformation de l'espèce réactive (ionisation, dissociation, photoionisation, photodissociation...) et les réactions/processus lié-lié. On notera que la prise en compte des réactions transformant l'espèce réactive entraîne une inconsistance au niveau de la conservation des espèces car la résolution de l'équation I.61 fournit dans ce cas des densités particulières différentes de celles données par le code CFD. Ceci peut poser un problème de principe lors du couplage.

Les six premiers termes collisionnels de l'équation I.61 peuvent s'explicitier comme suit :

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{elec-imp-ex} = \sum_{j=1}^{N_{level-el}^s} K_e(j, i) n_s^j n_e - \sum_{j=1}^{N_{level-el}^s} K_e(i, j) n_s^i n_e \quad (I.64)$$

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{pl-imp-ex} = \sum_{s'=1}^{N_{lourd}} \left[\sum_{j=1}^{N_{level-el}^s} K_{s'}(j, i) n_s^j n_{s'} - \sum_{j=1}^{N_{level-el}^s} K_{s'}(i, j) n_s^i n_{s'} \right] \quad (I.65)$$

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{elec-imp-ion} = K_e(c, i) n_{s+} n_e^2 - K_e(i, c) n_s^i n_e \quad (I.66)$$

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{pl-imp-ion} = \sum_{s'=1}^{N_{lourd}} \left[K_{s'}(c, i) n_{s+} n_{s'} - K_{s'}(i, c) n_s^i n_{s'} \right] \quad (I.67)$$

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{elec-imp-diss} = K_e(d, i) n_{s'} n_{s''} n_e - K_e(i, d) n_s^i n_e \quad (I.68)$$

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{pl-imp-diss} = \sum_{s'=1}^{N_{lourd}} K_e(d, i) n_{s''} n_{s'''} n_{s'} - K_e(i, d) n_s^i n_{s'}, \quad (I.69)$$

où n_{s+} désigne l'ion associé à n_s , $n_{s'}$ la particule lourde collisionnante, $n_{s''}$ et $n_{s'''}$ les particules issues de la dissociation de n_s et N_{lourd} , $N_{level-el}^s$ sont le nombre d'espèces lourdes et le nombre de niveaux électroniques de l'espèce s . $K_s(i, j)$, $K_s(i, c)$, $K_s(i, d)$, $K_s(j, i)$, $K_s(c, i)$ et $K_s(d, i)$ sont respectivement les constantes de réactions d'excitation, d'ionisation et de dissociation de la particule n_s sur le niveau électronique i ainsi que les constantes de réactions inverses associées.

Les cinétiques développées dans la littérature ne prennent pas toujours en compte l'ensemble des processus permettant de déterminer précisément les termes I.64 à I.69. Ceci repose sur le fait que les différents processus n'ont pas la même importance et se retrouvent donc plus ou moins bien traités dans la littérature. Sharma [64] estime par exemple que l'excitation des atomes par impact d'électrons est 10^6 fois plus efficace que par impact avec une particule lourde neutre et 10^2 fois plus que par impact avec une particule lourde chargée. Les cinétiques sont alors généralement plus complètes pour les réactions mettant en jeu les électrons comme particules impactantes plutôt que les particules lourdes. Les autres processus collisionnels ne sont pas pour autant complètement négligés puisque que c'est eux qui vont peupler et dépeupler les niveaux dans les zones de la couche de choc où le degré d'ionisation est encore très faible. Par contre, d'autres réactions peuvent être plus détaillées comme la réaction d'ionisation associative $NO^+ + e^- \rightleftharpoons N + O$. C'est le cas dans les travaux de Bultel *et al.* [62] par exemple, qui ont développé pour cette réaction un modèle vibrationnel spécifique pour la réaction $NO^+(X^1\Sigma^+, v) + e^- \rightleftharpoons N^* + O^*$ ⁵. En effet, cette réaction est le précurseur de la création d'électrons dans les couches de choc précédant le cas échéant, la création d'électrons en cascade due aux réactions $N^* + e^- \rightleftharpoons N^+ + 2e^-$ et $O^* + e^- \rightleftharpoons O^+ + 2e^-$. À noter par ailleurs que les processus de dissociation par impact avec les particules lourdes sont généralement négligés dans les modèles CR.

Concernant les termes radiatifs de l'équation I.61, les processus de peuplement peuvent se faire par absorption et émission. Pour les transitions radiatives lié-lié, le taux de production n_s^i s'écrit :

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-ex} = \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-ex}^{emi} + \left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-ex}^{abs}, \quad (I.70)$$

où les deux termes correspondent aux termes d'émission et d'absorption de la relation I.59 où k, k' désignent alors un niveau électronique. Pour les processus en émission, le taux de production de n_s^i s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t} \right)_{rad-ex}^{emi} = \sum_{j=i+1}^{N_{level-el}^s} A(j, i) n_s^j - \sum_{j=1}^{i-1} A(i, j) n_s^i. \quad (I.71)$$

Les dépeuplements et peuplements issu des processus d'émission dépendent uniquement des conditions locales et sont donc faciles à prendre en compte. Pour les phénomènes d'absorption, le problème est plus compliqué, puisque comme vu précédemment l'absorption en un point dépend de la luminance radiative en ce point qui dépend du rayonnement émis et absorbé au travers de tout l'écoulement (cf. termes d'absorption de la relation I.59). Compte tenu de la complexité du problème, le calcul rigoureux de ce terme d'absorption n'est jamais entrepris dans la littérature à notre connaissance. Pour pallier cette difficulté, on utilise fréquemment dans la littérature [62, 92, 27] des facteurs d'échappement pour traiter l'absorption de manière approchée. Ce facteur d'échappement permet de quantifier le repeuplement par absorption d'un niveau i comme une fraction du peuplement par émission du niveau i . Ce facteur $\Lambda_{j,i}$ peut alors être interprété comme une fraction du rayonnement qui s'échappe d'un point lors d'une transition entre les états j et i , d'où son nom. Un processus d'absorption peut s'écrire alors :

$$n_s^i + h\nu \xrightarrow{(1 - \Lambda_{j,i})A(j,i)n_s^j} n_s^j, \quad j > i. \quad (I.72)$$

⁵le symbole * désigne des particules sur des états excités

Si $\Lambda_{j,i}$ est égale à zéro ceci indique que le gaz absorbe localement tout le rayonnement, le gaz est alors optiquement très épais. Dans le cas contraire où $\Lambda_{j,i}$ est égale à un, il n'y a pas d'absorption, le gaz est alors optiquement mince. Dans la littérature, on trouve différentes expressions du facteur d'échappement, du plus simple (Λ est un paramètre ajustable entre 0 et 1) à des formules plus complexe comme celle de Holstein [93] par exemple utilisée par Bultel *et al.* [62] ou à des formules adaptées à des cas particuliers comme celle développée par Johnston [27] pour une géométrie assimilable à des plans tangents. La détermination de ces facteurs d'échappement reste cependant dans tous les cas approximative, ce qui est le point faible actuellement des modèles CR pour traiter correctement le rayonnement. Avec cette approximation, l'équation I.70 s'écrit :

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t}\right)_{rad-ex} = \sum_{j=j+1}^{n_{s,q}} \Lambda_{j,i} A(j, i) n_s^j - \sum_{j=1}^{i-1} \Lambda_{i,j} A(i, j) n_s^i. \quad (I.73)$$

On peut écrire de manière similaire pour les processus radiatifs du continuum que :

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t}\right)_{rad-ion} = \Lambda_{c,i} A(c, i) n_{s+n_e} \quad (I.74)$$

$$\left(\frac{\partial n_s^i}{\partial t}\right)_{rad-diss} = \Lambda_{d,i} A(d, i) n_{s'} n_{s''} \quad (I.75)$$

avec $\Lambda_{c,i}$ et $\Lambda_{d,i}$ les facteurs d'échappement liés à la photoionisation et la photodissociation de la particule s . À noter que dans la littérature, les processus de photodissociation ne sont généralement pas pris en compte.

L'utilisation d'un modèle CR permet de mieux représenter la distribution des populations électroniques en comparaison d'une approche Boltzmannienne. Sa mise en œuvre est cependant limitée à du post-traitement car son implémentation dans un solveur fluide ne pose pas de problème de fond mais alourdit considérablement les calculs avec des équations de bilan de masse à considérer pour chaque niveau électronique de chaque espèce chimique. On notera tout de même les récents travaux de Panesi [26], qui a implémenté un modèle CR dans un solveur CFD (Euler) pour plusieurs niveaux atomiques.

- À partir des populations rovibroniques (obtenues à l'aide d'un modèle CR et/ou de distributions Boltzmanniennes) et des températures de translation (cf. schéma de la figure I.4), les propriétés radiatives sont, suivant la précision recherchée, calculées soit avec une approche raie par raie (approche précise discutée dans le paragraphe traitant des outils de références, qui, compte tenu des ressources informatiques qu'elle requiert, est en pratique mise en œuvre uniquement pour des cas 1D), soit avec des modèles de bandes, soit avec une approche hybride *i.e.* approche raie par raie pour les raies atomiques et modèle de bandes pour les autres contributions.

Les modèles de bandes permettent d'obtenir des propriétés radiatives moyenne par bande spectrale ce qui allège considérablement les calculs par rapport à une approche à haute résolution. Leur construction repose sur une base de données spectroscopiques. Il existe de nombreux types de modèles de bandes qui tiennent compte ou non des corrélations spectrales (cette notion est développée dans la section III.3.2) allant d'une résolution de 10 à 10000 cm^{-1} . Dans le cadre des rentrées atmosphériques, un modèle spectralement non corrélé

utilisé fréquemment dans la littérature est le modèle « Smeared Rotational Band » (SRB) [27, 21] qui revient à moyenner la structure rotationnelle des spectres issues de transitions lié-lié des espèces moléculaires. Ceci correspond à une résolution de l'ordre de $10\text{-}100\text{ cm}^{-1}$. Cette modélisation est par exemple mise en oeuvre dans le code développé par Johnston [27], le code LORAN développé par Hartung [21], le code ASTEROID développé par Surzhikov [94]. On peut noter également qu'un modèle de bandes spectralement corrélé a été développé pour des applications de rentrée martienne à l'ETL sans ionisation en considérant les espèces CO et CO_2 [95, 96]. Pour les raies atomiques, les modèles de bandes sont rares. On peut citer celui développé par Surzhikov [97] mais qui ne tient pas compte de la structure fine.

- Une méthode de résolution de l'ETR est ensuite mise en oeuvre. La méthode de lancer de rayons est rarement utilisée pour des raisons de coût de calcul évident. Il existe différentes méthodes approchées pour traiter les transferts radiatifs dans les écoulements de rentrée atmosphérique (milieux semi-transparents et non diffusant) et ainsi obtenir le flux radiatif :

La méthode des plans tangents : c'est la méthode la plus fréquemment utilisée dans la littérature [7, 98] car elle est facile à mettre en oeuvre. On considère dans cette méthode que les propriétés thermophysiques du milieu ne varient que suivant la direction normale à la paroi. Le problème se ramène alors à la configuration de deux murs plans infinis, le premier étant symbolisé par la paroi du véhicule et le second par l'infini amont (*i.e.* la zone juste en amont du choc). Il existe alors des expressions semi-analytiques pour exprimer le flux radiatif entre les deux murs plans. Cette approximation est généralement acceptable pour des corps assez émoussés et au voisinage de la ligne d'arrêt.

La méthode des harmoniques sphériques ou méthodes P_N [99] consiste à décomposer la luminance (qui a une dépendance directionnelle) sur la base complète des harmoniques sphériques. Les coefficients de cette décomposition sont alors des fonctions dépendant de la position qui peuvent être reliées aux moments directionnels de la luminance et satisfont à des équations aux dérivées partielles plus faciles à résoudre car sans dépendance directionnelle. La précision de cette méthode est liée à la taille de la base *i.e.* N . Si $N \rightarrow +\infty$ alors la solution tend vers la solution exacte. Pour des raisons de mise en oeuvre difficile, cette méthode est en pratique utilisée à des ordres faibles. Par exemple, Hartung [21] l'utilise à l'ordre 1 et Surzhikov [92] à l'ordre 1 et 3.

Une autre méthode également utilisée est celle basée sur une approche Monte Carlo. Elle permet de calculer les transferts radiatifs de manière statistique *i.e.* à l'aide de fonctions de densité de probabilité (pdf). La mise en oeuvre de cette méthode consiste à mettre en place une procédure générant des événements aléatoires reproduisant les phénomènes physiques décrits par l'ETR (émission, transmission, absorption dans notre cas) et ceci dans toute la géométrie considérée. Autrement dit, l'émission radiative de l'écoulement est représentée par des paquets de photons au nombre de N par exemple qui sont distribués sur toute la géométrie suivant une pdf. Chaque paquet est alors émis suivant une direction et une fréquence aléatoire et les phénomènes de transmission et d'absorption sont traités de manière déterministe ou aléatoire. Le résultat de l'ensemble de ces événements aléatoires donne alors les flux et les puissances dans tout l'espace à une erreur statistique près. Plus le nombre d'événements aléatoires initiaux N est grand et plus l'erreur statistique est faible. Cette méthode a notamment été mise en oeuvre par Rouzaud *et al.* [95] dans le cadre de rentrée atmosphérique martienne et par Gogel *et al.* [100].

• Pour le couplage avec l'hydrodynamique, compte tenu de la description multi-température utilisée dans le solveur CFD, les termes radiatifs interviennent au niveau de l'équation de l'énergie totale et dans les différentes équations de bilans d'énergie des degrés internes (cf. §I.44) dont la forme générale est rappelée ici :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_s e_{i,s}) + \partial_{x^j}(\rho_s e_{i,s} u_0^j) &= \partial_{x^j}(\lambda_{i,s} \partial_{x^j} T_{i,s}) + \partial_{x^j}(\rho e_{i,s} D_s \partial_{x^j} Y_s) + \sum_{\text{espèce } s'} \sum_{\text{mode } j} \Omega_{s-s'}^{i-j} \\ &+ \sum_{\text{réaction } r} \Omega_{i,s}^{\text{coll},r} + \sum_{\text{processus } p} \Omega_{i,s}^{\text{rad},p} - P_{i,s}^{R,bb}, \end{aligned} \quad (\text{I.76})$$

où $e_{i,s}$ est l'énergie massique de l'espèce s pour le degré interne i supposé à l'équilibre à la température $T_{i,s}$ (le tableau I.3 donne la modélisation multi-température retenue dans les différents codes hydrodynamiques existants).

La résolution de l'ETR faite généralement dans la littérature ne fournit que le champs de puissance radiative totale et le flux radiatif à la paroi. Le couplage au niveau de l'équation de l'énergie totale est alors aisé à réaliser mais pas au niveau de l'équation I.76. Pour simplifier cette équation, le terme $\sum_{\text{processus } p} \Omega_{i,s}^{\text{rad},p}$ est généralement négligé (perte d'énergie lors de processus radiatifs mettant en jeu un continuum). Un problème se pose également pour le terme de puissance $P_{i,s}^{R,bb}$ (puissance radiative issue des transitions lié-lié relative à l'espèce s et au mode i) car il faut connaître la répartition à effectuer de la puissance radiative dans les différentes équations de bilans des énergies internes.

Les approches adoptées dans la littérature à ce sujet sont assez approximatives et dépendent du modèle multi-température utilisé. On peut relever par exemple que dans la plate-forme URANUS/HERTA/PARADE [56] (cf. tableau I.3 pour la modélisation multi-température du code URANUS, et HERTA et PARADE sont respectivement un code de transfert radiatif et un code de calcul des propriétés radiatives) la puissance radiative totale est insérée dans les équations d'énergie totale et d'énergie associée à la température T_{e-el} *i.e.* associée aux modes de translation des électrons et d'excitation électronique des espèces lourdes. Par contre, aucune contribution radiative n'est ajoutée dans l'équation associée aux énergies de vibration. Les auteurs [56] de cette modélisation supposent que l'énergie rovibrationnelle mise en jeu dans les processus radiatifs est négligeable.

Dans la plate-forme de calcul LAURA/LORAN [7] (LAURA est un solveur hydrodynamique [20] à deux températures (T, T_{v-e-el}) et LORAN est un solveur radiatif [21]), la puissance radiative est injectée dans les deux équations d'énergie (totale et vibronique). C'est également l'approche retenue par Johnston [27].

Aucune étude rigoureuse concernant la redistribution de la puissance radiative dans les différents réservoirs d'énergie n'a été effectuée dans la littérature.

I.5 Conclusion et objectifs de thèse

Compte tenu de l'étude précédente, en grande partie bibliographique, il apparaît que le déséquilibre thermochimique présent dans les couches de choc de rentrée atmosphérique est difficile à modéliser et ce même sans considérer le rayonnement.

La majorité des codes hydrodynamiques existant dans la littérature utilise une approche multi-température qui est relativement facile à mettre en oeuvre car elle consiste à ajouter une équation de bilan d'énergie pour chaque mode d'énergie pouvant être en déséquilibre avec la translation des particules lourdes, chaque équation nécessitant par ailleurs la connaissance de termes de relaxation. Cette modélisation soulève le problème du couplage entre la chimie et la vibration. Différents modèles de couplage existent dans la littérature mais sans réelles validations théoriques ou expérimentales. Des travaux consistant à déterminer des schémas cinétiques réduits à partir d'une description niveau par niveau vibrationnel n'ont pas encore abouti et dépassent les objectifs de cette thèse orientée sur les problèmes de rayonnement.

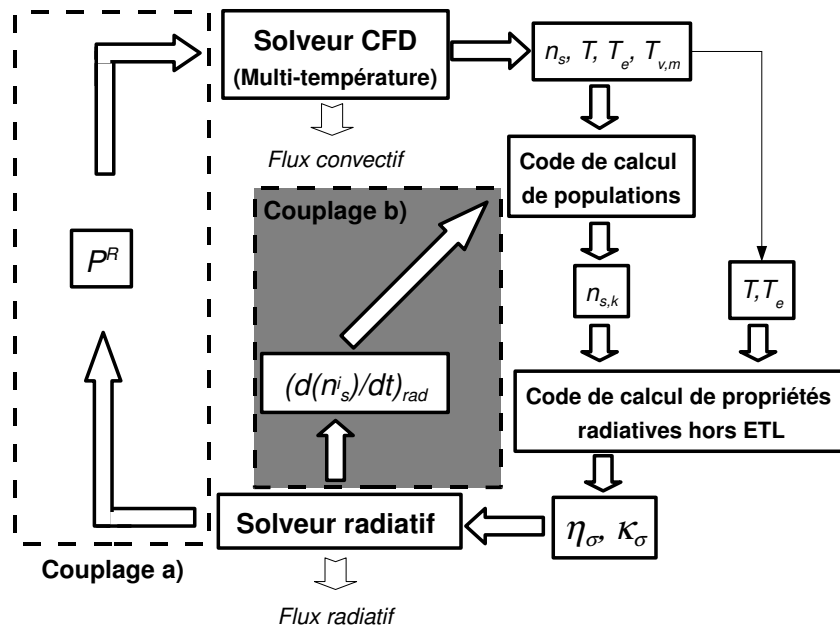


FIG. I.5: Méthodologie de couplage envisagée avec un solveur CFD multi-température et un modèle CR.

Dans le cas de chocs forts, tels que ceux rencontrés dans les rentrées terrestres, l'approche multi-température n'est pas suffisante pour décrire le peuplement des niveaux énergétiques, en particulier pour les niveaux électroniques. La plupart des récents travaux dans le domaine consistent à construire des modèles CR pour déterminer la population des niveaux électroniques. Ces modèles sont utilisés en post-traitement des résultats obtenus par des solveurs CFD multi-température et prennent en compte les effets collisionnels et les effets radiatifs via des facteurs d'échappement. À partir des populations obtenues, les propriétés radiatives sont calculées et la résolution de l'ETR permet alors d'obtenir le flux radiatif et le champs de puissance radiative dans la couche de choc. Pour effectuer le couplage, à défaut de connaître la répartition de la puissance radiative à insérer dans les équations d'énergie du solveur CFD, la puissance radiative totale est pragmatiquement injectée dans l'équation de bilan de l'énergie totale et parfois, suivant le modèle multi-température, dans l'équation de bilan d'énergie électronique.

Les objectifs de la thèse sont de mettre en place des outils pour déterminer les flux radiatifs et étudier l'interaction du rayonnement avec l'écoulement. Ce dernier point commence par l'étude de l'influence du rayonnement dans les modèles CR en s'affranchissant de l'uti-

lisation des facteurs d'échappements. Le schéma de couplage envisagé à terme est indiqué par le schéma de la figure I.5. Le couplage *b*), en plus du couplage *a*) classique, constitue l'originalité de la démarche visée où les taux de production des niveaux électroniques dus au rayonnement seront déterminés précisément. Par ailleurs les outils mis en place devront permettre d'effectuer ces couplages dans des configurations multi-dimensionnelles (capacité encore rare des outils numériques actuels).

Pour réaliser ces objectifs, il faut avant tout développer un modèle de propriétés radiatives pour des milieux hors d'équilibre relatifs aux rentrées atmosphériques terrestre et qui soit applicable à un couplage avec un modèle CR c'est-à-dire qui puisse prendre en compte des populations quelconques des niveaux électroniques. L'aspect couplage et utilisation dans des configurations 2D/3D (écoulement non axisymétrique et calcul du flux radiatif sur toute la paroi de l'engin) fait que l'approche raie par raie est à proscrire pour réaliser ce type d'étude compte tenu de la lourdeur des calculs avec une telle approche. Un modèle de bandes a donc été développé pour ces conditions avec une formulation de l'ETR adaptée aux milieux hors d'équilibre. Ceci fait l'objet du chapitre III. Sa construction repose sur une base de données spectroscopiques et des codes de calculs raie par raie étendus à des applications hors d'équilibre. Ces deux points font l'objet du chapitre II. Le dernier chapitre est quant à lui dédié à l'implémentation de ce modèle dans le code ASTRE, solveur radiatif 3D, qui repose sur une approche Monte Carlo.

Ainsi, aux termes de ces travaux, on disposera d'un modèle de rayonnement des gaz adapté à des milieux hors d'équilibre et implémenté dans un solveur radiatif 3D. Ces outils peuvent être utilisés pour prédire le transfert radiatif dans les chocs de rentrée atmosphérique terrestre en géométrie multi-dimensionnelle et être mis en oeuvre pour réaliser le couplage *a*) et/ou le couplage *b*) (celui-ci nécessite cependant quelques développements supplémentaires tel que la procédure de calcul des taux de production $(dn_s^i/dt)_{rad}$) du schéma de la figure I.5.

Chapitre II

Propriétés radiatives de plasmas hors d'équilibre

Table des matières

II.1	Introduction	40
II.2	Formulation des propriétés radiatives pour des milieux hors d'équilibre	40
II.2.1	Transitions lié-lié	42
II.2.1.1	Transitions atomiques	43
II.2.1.2	Transitions moléculaires	43
II.2.1.3	Profils de raie	46
II.2.2	Continuum	48
II.2.2.1	Transitions lié-libre	49
	Photoionisation atomique de N et O	50
	Photodétachement de N^- et O^-	51
	Photoionisation moléculaire de N_2 , O_2 et NO	52
	Photodissociation de O_2 (Schumann-Runge)	53
II.2.2.2	Transitions libre-libre	54
II.3	Application à des écoulements de rentrée atmosphérique terrestre	55
II.3.1	Le projet FIRE	55
II.3.2	Champs aérothermochimiques	57
II.3.3	Transferts radiatifs sur ligne d'arrêt	61
II.3.4	Résultats et analyses	61
II.3.4.1	Comparaison aux données en vol	62
II.3.4.2	Analyses complémentaires	66
	Processus radiatifs prédominants	66
	Effet de l'absorption	69
	Effet du déséquilibre thermochimique pour les continua	70
	Évolution de la luminance le long de la ligne d'arrêt	72
II.4	Conclusion	75

II.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est d'établir les expressions permettant de calculer les propriétés radiatives de plasmas de N_2-O_2 en déséquilibre thermochimique. Ceci est une étape indispensable en vue d'étudier le transfert radiatif et l'interaction rayonnement/hydrodynamique dans les couches de choc de rentrée.

Ce travail s'appuie sur des travaux antérieurs et des outils développés au laboratoire EM2C dans le cadre d'études de plasmas de N_2-O_2 à l'ETL [101]. Une extension de ces outils a été réalisée pour calculer les propriétés radiatives hors ETL, et ce tout particulièrement pour les continua.

On donne dans la première partie de ce chapitre, l'expression des coefficients d'émission et d'absorption pour les transitions lié-lié, lié-libre, libre-libre dans le cadre d'une approche raie par raie¹. Ces expressions tiennent compte du déséquilibre thermique en utilisant une description niveau par niveau et/ou suivant le cas une description multi-température des degrés internes, mais aussi du déséquilibre chimique le cas échéant.

Les outils développés ont été mis en œuvre sur un cas d'épreuve représentatif des rentrées hyperenthalpiques, le projet FIRE II, pour effectuer des calculs de transfert radiatif à haute résolution sur la ligne d'arrêt de l'écoulement. Ce travail a été réalisé dans le cadre d'un workshop organisé par l'ESA (2nd International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, Rome, 2006). Les résultats obtenus sont discutés dans la seconde partie de ce chapitre.

II.2 Formulation des propriétés radiatives pour des milieux hors d'équilibre

Les résultats exposés dans cette section sont basés sur des travaux antérieurs réalisés au laboratoire EM2C [101] concernant la constitution d'une base de données spectroscopiques nommée par la suite HTGR [89] (High Temperature Gas Radiation) relative à des plasmas de N_2-O_2 ². Cette base regroupe l'ensemble des données relatives aux transitions contribuant majoritairement à l'émission et l'absorption d'un plasma dont la température varie entre

¹Cette approche à haute résolution, qui est la plus précise et la plus fiable, consiste à travailler sur une grille spectrale suffisamment résolue pour discrétiser correctement toutes les raies (5-6 points au minimum par largeur de raie).

²Cette base contient également des données pour traiter les plasmas de N_2-O_2-Ar , CO_2-N_2 ainsi que les molécules H_2O et CH_4 dans l'infrarouge.

300 et 25000 K. La gamme spectrale considérée est celle de l'ensemble du spectre utile *i.e.* de 1000 à 200000 cm^{-1} . Ces données sont soit directement issues de la littérature (cas des transitions lié-lié atomiques et des continua), soit obtenues par extrapolation de données de la littérature (cas des transitions lié-lié moléculaires). Pour les systèmes électroniques moléculaires, cette base a fait l'objet dans la Réf. [86] de validations partielles systématiques par rapport à des durées de vie radiative, des intensités de bandes et des coefficients d'Einstein disponibles dans la littérature. De manière plus globale, une validation de la base a été obtenue par rapport à des résultats expérimentaux et à la base spectroscopique du code SPECAIR [84] sur des calculs d'émission de plasma d'air optiquement mince à pression atmosphérique dans l'intervalle spectral 1000-50000 cm^{-1} pour des températures allant jusqu'à 15000 K [96].

Dans ses travaux, Chauveau [101] donne des expressions du coefficient d'absorption pour chaque type de processus radiatifs qui sont valables pour des milieux à l'ETL. Sous cette hypothèse d'ETL, le coefficient d'émission est relié au coefficient d'absorption par la loi de Kirchhoff :

$$\frac{\eta_\sigma(T)}{\kappa_\sigma(T)} = L_\sigma^\circ(T) = \frac{2hc^2\sigma^3}{\exp(hc\sigma/k_bT) - 1}, \quad (\text{II.1})$$

où T est la température d'équilibre local du milieu et $L_\sigma^\circ(T)$ la luminance d'équilibre à la température T .

Pour des applications hors ETL, cette loi n'est plus valable du fait que les populations des états hauts et bas des transitions ne suivent pas une distribution de Boltzmann ou que l'équilibre chimique n'est plus vérifié. Dans ces conditions, un calcul de propriétés radiatives nécessite alors un calcul séparé des coefficients d'émission et d'absorption. On présente ici une extension des formulations obtenues à l'ETL concernant les coefficients d'absorption et on donne également les expressions des coefficients d'émission. Cette extension dépend de la modélisation retenue pour décrire le déséquilibre thermique du milieu. Comme indiqué dans la chapitre I, il existe différents degrés de précision concernant cette description, de l'approche rotationnelle spécifique à l'approche multi-température. Compte tenu de la discussion à la fin du chapitre I, une approche hybride - approche multi-température pour décrire les degrés de liberté de translation, vibration et rotation et approche électronique spécifique pour décrire les niveaux électroniques - semble apporter une précision suffisante pour représenter le rayonnement des plasmas de rentrée. Dans ce cadre-là, nous faisons les hypothèses suivantes : les modes de translation des particules lourdes et des électrons libres sont caractérisés respectivement par les températures T et T_e , la rotation par la température $T_r = T$ et la vibration de chaque espèce s diatomique par la température $T_{v,s}$. Cette représentation multi-température correspond globalement à celle utilisée généralement dans les codes hydrodynamiques (une seule température de vibration est parfois même utilisée par exemple [20, 57, 58]). Concernant la population des niveaux électroniques des particules, on considérera, sauf mention contraire, une description niveau par niveau électronique. En effet, la mise en œuvre de cette dernière approche dépend du niveau de détail des données spectroscopiques disponibles dans la littérature. Ce point concerne en particulier les continua et est discuté par la suite. On donnera également les expressions des propriétés radiatives dans le cas où l'on considère une distribution de Boltzmann à la température T_{el} pour la population des niveaux électroniques.

Les expressions sont présentées d'abord pour les transitions lié-lié puis pour les continua. On indique à chaque fois, les données spectroscopiques utilisées (qui sont regroupées dans

la base HTGR).

II.2.1 Transitions lié-lié

Ce type de transition peut de manière générale s'écrire comme

$$X_l + hc\sigma \rightleftharpoons X_u, \quad (\text{II.2})$$

où u et l désignent respectivement les niveaux liés haut et bas de la transition mettant en jeu l'espèce rayonnante X . Les coefficients d'absorption et d'émission pour cette transition radiative s'écrivent de manière classique comme :

$$\eta_\sigma^{ul} = n_u \frac{A_{ul}}{4\pi} hc\sigma_{ul} f_{ul}(\sigma - \sigma_{ul}) \quad (\text{II.3})$$

$$\kappa_\sigma^{ul} = (n_l B_{lu} - n_u B_{ul}) h\sigma_{ul} f_{ul}(\sigma - \sigma_{ul}), \quad (\text{II.4})$$

où n_u et n_l désignent respectivement les populations des niveaux u et l de la transition, A_{ul} , B_{ul} , B_{lu} sont les coefficients d'Einstein relatifs à l'émission spontanée, l'émission induite et l'absorption, σ_{ul} est le nombre d'onde de la transition et $f_{ul}(\sigma - \sigma_{ul})$ le profil spectral de la raie. Le choix et les caractéristiques des profils utilisés dans nos calculs sont discutés dans la section II.2.1.3. On a supposé par ailleurs dans les expressions II.3 et II.4 que les profils en émission spontanée, en absorption et en émission induite sont identiques.

Deux relations classiques relient les coefficients d'Einstein, il s'agit de :

$$g_u B_{ul} = g_l B_{lu} \quad (\text{II.5})$$

$$\frac{A_{ul}}{B_{ul}} = 8\pi hc\sigma_{ul}^3, \quad (\text{II.6})$$

avec g_u , g_l les dégénérescences des niveaux u et l . En insérant les relations II.5 et II.6 dans la relation II.4, on peut exprimer κ_σ^{ul} à partir de A_{ul} :

$$\kappa_\sigma^{ul} = \frac{A_{ul}}{8\pi c\sigma_{ul}^2} \frac{g_u}{g_l} n_l \left(1 - \frac{n_u g_l}{n_l g_u}\right) f_{ul}(\sigma - \sigma_{ul}). \quad (\text{II.7})$$

Les coefficients d'Einstein sont étroitement liés aux intensités des raies. Ces données sont rassemblées dans la base HTGR au même titre que les positions σ_{ul} . Dans les expressions II.3 et II.7, les populations n_u et n_l peuvent être données directement par une description niveau par niveau ou données par des distributions de Boltzmann.

Les coefficients d'émission η_σ^{bb} et d'absorption κ_σ^{bb} de l'ensemble des processus radiatifs entre niveaux liés de toutes les espèces radiatives s'obtiennent par simple somme :

$$\eta_\sigma^{bb} = \sum_{\text{espèce } s} \sum_{ul} \eta_\sigma^{ul} \quad (\text{II.8})$$

$$\kappa_\sigma^{bb} = \sum_{\text{espèce } s} \sum_{ul} \kappa_\sigma^{ul}, \quad (\text{II.9})$$

sous l'hypothèse que les raies peuvent être considérées comme isolées.

II.2.1.1 Transitions atomiques

Les transitions lié-lié atomiques correspondent à des transitions entre niveaux électroniques. Les relations II.3 et II.7 peuvent directement être utilisées dans le cadre d'une approche niveau par niveau électronique pour déterminer les propriétés radiatives. u et l désignent simplement dans ce cas, les niveaux électroniques haut et bas de la transition. Dans le cas où la population des niveaux électroniques suit une distribution de Boltzmann à la température T_{el} , la population d'un niveau u s'exprime comme :

$$n_u = n_{tot} \frac{g_u \exp(-\frac{E_u}{k_b T_{el}})}{Q_{at}(T_{el}, T, T_e, C_{\pm})}, \quad (\text{II.10})$$

où E_u est l'énergie du niveau u , et n_{tot} et Q_{at} désignent la densité et la fonction de partition de l'espèce atomique. Comme l'indique l'annexe A, le calcul de la fonction de partition prend en compte l'abaissement de potentiel qui dépend des températures de translation des particules et des concentrations des espèces chargées notées $C_{\pm}$. Par la suite, pour simplifier la notation, les dépendances en T , T_e et $C_{\pm}$ ne seront plus indiquées.

Compte tenu des températures des plasmas envisagées *i.e.* allant jusqu'à quelques dizaines de milliers de Kelvin, les espèces atomiques à considérer sont N , O , N^+ et O^+ . Pour ces espèces, il existe dans la littérature de nombreuses banques de données accessibles qui recensent les positions et les intensités des raies. Chauveau [101] a fait un choix parmi ces différentes bases suivant des critères de précision des données disponibles (positions et intensités) et d'exhaustivité des bases. Il est ressorti de cette étude que la base du NIST [81] présente les données les plus précises et qu'elle contient dans chaque bande spectrale, les raies les plus importantes pour la prédiction des transferts radiatifs. C'est par conséquent cette base qui a été incorporée dans la base HTGR et utilisée dans nos travaux. À titre indicatif, on dénombre dans cette base 945 raies pour N , 707 pour N^+ , 817 pour O et 864 pour O^+ .

Au regard des récents travaux de Johnston [102], la pertinence de ce choix est cependant à nuancer quelque peu. En effet, dans ces travaux, Johnston a fait des calculs de transfert pour les raies atomiques dans des situations de rentrées atmosphériques en prenant en compte ou non, en plus des raies atomiques contenues dans la base du NIST, celles de très faibles intensités contenues dans la base théorique TOPBASE [103] non prises en compte dans la base du NIST. Les résultats montrent une contribution significative de ces raies supplémentaires aux très fortes épaisseurs optiques.

II.2.1.2 Transitions moléculaires

Pour les espèces moléculaires, les transitions lié-lié se produisent entre deux niveaux rovibroniques. De manière générale, un niveau rovibronique est représenté par un quintuplet n, v, J, i, p caractérisant respectivement les états électronique et vibrationnel, le moment cinétique total (hors spin des noyaux), la composante de structure fine et la parité (Λ doubling) de la molécule. Son énergie F_{nvJip} peut être décomposée comme :

$$F_{nvJip} = F_{el}(n) + F_v(n, v) + F_r(n, v, J, i, p), \quad (\text{II.11})$$

où $F_{el}(n)$ est la partie électronique de l'énergie du niveau, $F_v(n, v)$ la partie vibrationnelle dépendant exclusivement de n et v , et $F_r(n, v, J, i, p)$ la partie rotationnelle incluant si besoin la structure fine et le Λ doubling.

Dans le cadre de la modélisation thermodynamique retenue pour décrire le déséquilibre thermique, on souhaite seulement utiliser une description niveau par niveau électronique, les autres populations étant décrites pour des distributions de Boltzmann. Dans ce cas, la population d'un niveau ($nvJip$) s'exprime en fonction de la densité n_n du niveau électronique n via la relation suivante :

$$n_{nvJip} = \frac{n_n}{Q_{mol}^n(T_v, T_r)} g_{nJip}^s (2J + 1) \exp \left(-\frac{F_v(n, v)}{k_b T_v} - \frac{F_r(n, v, J, i, p)}{k_b T_r} \right), \quad (\text{II.12})$$

où g_{nJip}^s est un poids statistique tenant compte de la dégénérescence de spin nucléaire dans le cas des molécules homonucléaires valant $\frac{I+1}{2I+1}$ (resp. $\frac{I}{2I+1}$) pour les niveaux ($nJip$) symétriques (resp. antisymétrique) vis à vis de la permutation des noyaux dans le cas où le spin I des noyaux est entier, et $\frac{I}{2I+1}$ (resp. $\frac{I+1}{2I+1}$) dans le cas où I est demi-entier. Dans le cas des molécules hétéronucléaires, $g_{nJip}^s = 1$. Q_{mol}^n désigne la fonction de partition rovibrationnelle correspondant au niveau électronique n et s'exprime comme :

$$Q_{mol}^n(T_v, T_r) = \sum_{vJip} g_{nJip}^s (2J + 1) \exp \left(-\frac{F_v(n, v)}{k_b T_v} - \frac{F_r(n, v, J, i, p)}{k_b T_r} \right). \quad (\text{II.13})$$

Dans le cas où les niveaux électroniques sont décrits par une distribution de Boltzmann à la température T_{el} , la densité n_n du niveau électronique n s'écrit :

$$n_n = n_{tot} \exp \left(-\frac{F_{el}(n)}{k_b T_{el}} \right) \frac{Q_{mol}^n(T_v, T_r)}{Q_{mol}(T_{el}, T_v, T_r)}, \quad (\text{II.14})$$

où n_{tot} et Q_{mol} désignent la densité et la fonction de partition interne totale à trois températures de l'espèce diatomique considérée. Le calcul de cette fonction de partition est détaillé dans l'annexe A. De manière générale, Q_{mol} est reliée aux fonctions de partition rovibrationnelles Q_{mol}^n par la relation :

$$Q_{mol}(T_{el}, T_v, T_r) = \sum_n \exp \left(-\frac{F_{el}(n)}{k_b T_{el}} \right) Q_{mol}^n(T_v, T_r). \quad (\text{II.15})$$

L'expression de la population d'un niveau dans une description purement Boltzmannienne des populations est alors obtenue en insérant simplement la relation II.14 dans la relation II.12.

À noter que dans la description multi-température ci-dessus, nous avons choisi un partitionnement de l'énergie où seule l'énergie purement vibrationnelle $F_v(n, v)$ est prise à T_v tandis que tous les termes d'interaction vibration, rotation, structure fine sont pris à T_r . À ce titre, Babou *et al.* [104] ont déterminé l'influence de ce choix sur des calculs de fonctions de partition des espèces diatomiques présentes dans les plasmas de N_2 - O_2 pour des températures allant jusqu'à 50000 K. Leur étude montre que l'impact est négligeable. Pour plus de détails sur les expressions des énergies mentionnées dans l'équation II.11, le lecteur est invité à consulter les travaux de Chauveau [101].

Concernant les données spectroscopiques, Chauveau [101] a développé une base de données (positions et intensités des transitions, et énergies des niveaux) afin de traiter 19 systèmes moléculaires des espèces N_2 , N_2^+ , O_2 et NO qui sont susceptibles de contribuer en absorption et/ou en émission au rayonnement d'un plasma d'air chaud. Le tableau II.1 tiré de la Ref. [101] donne le nom des systèmes, les états hauts et bas des transitions et les

bandes vibrationnelles traitées (v' et v'' désignent les niveaux vibrationnels des états hauts et bas respectivement). La position et l'intensité des raies ont été déterminées à partir d'une description détaillée de la structure rotationnelle des états électroniques incluant la structure fine à partir de grandeurs (constantes moléculaires spectroscopiques, moments de transition électronique,...) sélectionnées dans la littérature. Pour chaque état électronique, le potentiel internucléaire a été reconstruit par la méthode RKR, puis interpolé et extrapolé avant d'être utilisé pour calculer les fonctions d'onde vibrationnelle. La combinaison de ces fonctions d'onde et des moments de transition électronique (ETMF), sélectionnés dans la littérature, a permis de calculer systématiquement les intensités de bandes ; ces calculs ont été partiellement validés par rapport à des résultats expérimentaux publiés.

Pour chaque état électronique et pour chaque état vibrationnel, tous les niveaux rotationnels liés ont été pris en compte ($J_{max} \approx 200$). À titre indicatif, on dénombre de l'ordre d'un million de raies pour chaque système électronique moléculaire.

TAB. II.1: *Systèmes électroniques moléculaires considérés [101].*

molécule	nom du système	état haut – état bas	bandes calculées ($0 : v'_{max}, 0 : v''_{max}$)
N_2	First-Positive	$B^3\Pi_g - A^3\Sigma_u^+$	($0 : 21; 0 : 16$)
	Second-Positive	$C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$	($0 : 4; 0 : 21$)
	Birge-Hopfield 1	$b^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$	($0 : 19; 0 : 15$)
	Birge-Hopfield 2	$b'^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$	($0 : 28; 0 : 15$)
	Carroll-Yoshino	$c'_4^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$	($0 : 8; 0 : 15$)
	Worley-Jenkins	$c_3^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$	($0 : 4; 0 : 15$)
	Worley	$o_3^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$	($0 : 4; 0 : 15$)
N_2^+	Meinel	$A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$	($0 : 27; 0 : 21$)
	First-Negative	$B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$	($0 : 8; 0 : 21$)
	Second-Negative	$C^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$	($0 : 6; 0 : 21$)
NO	γ	$A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_r$	($0 : 8; 0 : 22$)
	β	$B^2\Pi_r - X^2\Pi_r$	($0 : 37; 0 : 22$)
	δ	$C^2\Pi_r - X^2\Pi_r$	($0 : 9; 0 : 22$)
	ϵ	$D^2\Sigma^+ - X^2\Pi_r$	($0 : 5; 0 : 22$)
	γ'	$E^2\Sigma^+ - X^2\Pi_r$	($0 : 4; 0 : 22$)
	β'	$B'^2\Delta - X^2\Pi_r$	($0 : 6; 0 : 22$)
	11000 Å	$D^2\Sigma^+ - A^2\Sigma^+$	($0 : 5; 0 : 8$)
	infrared	$X^2\Pi_r - X^2\Pi_r$	($0 : 22; 0 : 22$)
O_2	Schumann-Runge	$B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$	($0 : 19; 0 : 21$)

II.2.1.3 Profils de raie

Si une raie peut être considérée comme isolée, *i.e.* indépendante des autres transitions, elle présente néanmoins une certaine extension spectrale. En effet différents phénomènes contribuent à élargir les raies. Il s'agit de l'effet Doppler, de l'élargissement naturel dû aux durées de vie finies des niveaux et des effets collisionnels qui perturbent les niveaux d'énergie des particules rayonnantes.

Élargissement naturel et collisionnel :

L'élargissement naturel regroupe de manière générale les effets liés à la durée de vie finie des niveaux (désexcitation radiative, effets prédissociatifs et autoionisants). L'élargissement dû à la désexcitation radiative est en pratique toujours négligé devant les autres élargissements dans nos applications. En effet, il n'engendre que des largeurs de raies de l'ordre de 10^{-3} cm^{-1} . Les effets autoionisants et prédissociatifs interviennent lorsque l'état haut de la transition est situé dans un continuum. Certains états atomiques autoionisants sont pris en compte dans les sections de photoionisation de TOPBASE [103] utilisées dans la base HTGR. En revanche pour les états prédissociés de NO , O_2 et N_2 , Chauveau [101] a rassemblé des durées de vie publiées afin d'obtenir des largeurs prédissociatives. Au niveau du profil, cet élargissement est modélisé par un profil Lorentz, de même que pour les effets collisionnels explicités ci-dessous.

L'élargissement collisionnel est dû à la modification de la position des niveaux énergétiques de la particule rayonnante engendrée lorsqu'une autre particule s'approche de celle-ci. La collision peut avoir lieu avec une particule de même type, l'élargissement des niveaux d'énergie est alors dit résonant, avec une particule lourde neutre responsable de l'élargissement de van der Waals (vdW), ou avec un électron ou un ion, on parle alors d'élargissement Stark. Tous ces élargissements sont modélisés par un profil Lorentz :

$$f_L(\sigma) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\sigma - \sigma_{ul})^2}, \quad (\text{II.16})$$

où γ_L est la demi-largeur à mi-hauteur du profil spectral.

Pour les atomes, cette demi-largeur est égale à la somme des demi-largeurs relatives aux élargissements collisionnels (γ_c) précédemment cités :

$$\gamma_L = \gamma_c = \gamma_{vdW} + \gamma_{Stark} + \gamma_{resonance}. \quad (\text{II.17})$$

Les expressions de ces trois types de demi-largeurs utilisées dans la base HTGR sont issues de données publiées dans la littérature et en particuliers des travaux de Rivière [105] concernant les largeurs dues à l'effet Stark, effet d'élargissement dominant pour des températures supérieures à 10000 K.

Pour les systèmes électroniques moléculaires référencés dans le tableau II.1, la demi-largeur γ_L est égale à la demi-largeur collisionnelle additionnée le cas échéant d'une demi-largeur prédissociative γ_{pred} :

$$\gamma_L = \gamma_c + \gamma_{pred} \quad (\text{II.18})$$

Peu de données existent dans la littérature sur les élargissements collisionnels des molécules. Des valeurs pragmatiques ont par conséquent été utilisées à partir de résultats expérimentaux ou théoriques. Ainsi, pour les systèmes du NO (sauf pour l'infrarouge) il a été retenu comme largeur collisionnelle [106] :

$$\gamma_{c,NO}^{UV} = 0.293 P \left(\frac{295}{T} \right)^{0.75} \text{ cm}^{-1}, \quad (\text{II.19})$$

pour NO infrarouge [107],

$$\gamma_{c,NO}^{IR} = P \left(\frac{300}{T} \right)^{0.62} \text{ cm}^{-1}, \quad (\text{II.20})$$

et pour les autres systèmes O_2 , N_2 et N_2^+ [108],

$$\gamma_c = 0.1 P \left(\frac{273}{T} \right)^{0.7} \text{ cm}^{-1}. \quad (\text{II.21})$$

Dans ces expressions P et T désignent la pression totale (en bar) et la température de translation des particules lourdes.

Pour les demi-largeurs prédissociatives γ_{pred} , hormis pour les systèmes de $NO(\beta, \beta', \gamma, \gamma')$, tous les autres systèmes indiqués dans le tableau II.1, ont des demi-largeurs prédissociatives qui dépendent de la bande vibrationnelle traitée. Ces données sont soit directement tirées de la littérature ou soit estimées à partir de durées de vie publiées. Les données utilisées sont répertoriées dans les travaux de Chauveau [101].

Élargissement Doppler :

L'effet Doppler a pour origine le déplacement de la particule émettrice ou absorbante par rapport au référentiel de l'observateur. Lorsque une particule de vitesse $\mathbf{v}$ dans un référentiel fixe, émet un rayonnement de fréquence ν_{ul} dans son référentiel propre, se propageant suivant la direction $\mathbf{n}$, cette fréquence sera observée dans le référentiel fixe à la fréquence :

$$\nu = \nu_{ul} \left(1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{c} \right). \quad (\text{II.22})$$

En considérant que l'élargissement Doppler est dû à l'agitation thermique caractérisée par une fonction de distribution Maxwellienne des vitesses des particules rayonnantes et en négligeant l'effet des collisions, le profil attribué à chaque transition est alors Gaussien. Ce profil s'exprime en fonction du nombre d'onde comme suit :

$$f_D(\sigma) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_D} \exp \left[-\ln 2 \left(\frac{\sigma - \sigma_{ul}}{\gamma_D} \right)^2 \right], \quad (\text{II.23})$$

où γ_D est la demi-largeur Doppler à mi-hauteur donnée par :

$$\gamma_D = \sigma_{ul} \sqrt{\frac{2k_b T \ln 2}{mc^2}}, \quad (\text{II.24})$$

avec m la masse de la particule rayonnante, σ_{ul} le nombre d'onde de la transition et T la température de translation de la particule.

Profils utilisés :

En supposant décorrélés les différents phénomènes d'élargissement, on peut exprimer le profil résultant comme le produit de convolution entre le profil Lorentz et le profil Gaussien associés à ces phénomènes. Le profil normalisé résultant est appelé profil Voigt, et a pour expression :

$$f_V(\sigma) = \frac{a}{\pi\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (b - y)^2} dy, \quad (\text{II.25})$$

avec

$$a = \frac{\gamma_L}{\gamma_D} \sqrt{\ln 2} \quad (\text{II.26})$$

$$b = \sqrt{\ln 2} \frac{\sigma - \sigma_{ul}}{\gamma_D}. \quad (\text{II.27})$$

Ce profil a été utilisé pour toutes les transitions lié-lié traitées dans les calculs raie par raie effectués dans ce travail. Les demi-largeurs à mi-hauteur γ_L et γ_D sont déterminées respectivement avec les expressions obtenues dans les deux paragraphes précédents.

II.2.2 Continuum

Les données nécessaires aux calculs des propriétés radiatives relatives aux transitions des continua sont des sections efficaces. La base HTGR [101] regroupe des sections efficaces pour traiter les transitions lié-libre et libre-libre susceptibles de jouer un rôle en absorption ou en émission. En absorption, il s'agit du bremsstrahlung inverse (ou bremsstrahlung en émission) électron-neutre et électron-ion, de la photoionisation et de la photodissociation - pour les molécules - (ou recombinaison radiative), du photodétachement atomique (ou recombinaison radiative). Il est important de souligner à ce stade que les sections efficaces dont nous disposons, sont généralement des sections en absorption et sont rarement détaillées état par état. Ceci n'a pas d'importance lorsque que l'on traite des milieux à l'ETL puisque le coefficient d'émission peut alors être exprimé en fonction du coefficient d'absorption via la loi de Kirchhoff, mais ce n'est pas le cas pour les milieux hors d'équilibre.

On présente dans les paragraphes suivants les expressions des coefficients d'absorption et d'émission pour les différents processus du continuum pour des milieux hors d'équilibre. Dans le cas des transitions lié-libre, ces expressions s'appuient sur une relation liant les sections efficaces (niveau par niveau) en émission et en absorption valable hors ETL. Cependant compte tenu du manque de données dans la littérature sur les sections efficaces de certains processus, les expressions niveau par niveau électronique que l'on cherche à obtenir ne sont pas toujours envisageables. Dans ce dernier cas, l'utilisation des données existantes nécessite faute de mieux d'utiliser des modèles multi-température de peuplement des niveaux des particules. Ceci est précisé le cas échéant. Pour le cas particulier des transitions libre-libre, des expressions valables à l'ETL sont utilisées dans la mesure où seuls les degrés de translation des électrons libres sont pris en compte dans la modélisation retenue.

II.2.2.1 Transitions lié-libre

Ce type de transition peut de manière générale s'écrire comme

$$X_k + h\sigma \rightleftharpoons Y_i + Z_j, \quad (\text{II.28})$$

où X , Y et Z sont les espèces mises en jeu dans la réaction. Les indices k , i et j indiquent les niveaux occupés par les particules. Les lois de conservation appliquées à ce type de réaction permettent d'établir la relation suivante :

$$\frac{1}{2}\mu g^2 = h\sigma + E_k^X - E_i^Y - E_j^Z - E_{\text{reac}}, \quad (\text{II.29})$$

dans laquelle μ désigne la masse réduite des produits Y et Z , E_l^A l'énergie du niveau l de l'espèce A référencée par rapport à son niveau fondamental, E_{reac} l'énergie de la réaction (par exemple l'énergie de dissociation dans le cas de la photodissociation, ou l'énergie d'ionisation dans le cas de la photoionisation - cette énergie est référencée par rapport au fondamental de la particule absorbante) et g désigne la vitesse relative des produits Y et Z . On suppose dans la relation II.29 que l'impulsion du photon est négligeable devant celle de la particule absorbante.

En introduisant, par analogie aux coefficients d'Einstein, des sections efficaces relatives à l'émission spontanée $\mathcal{S}_{ij,k}^{es}(\sigma)$, l'émission induite $\mathcal{S}_{ij,k}^{ei}(\sigma)$, et l'absorption $\mathcal{S}_{k,ij}^{abs}(\sigma)$ relatives à la réaction II.28, on obtient les expressions :

$$\eta_\sigma = \sum_{ijk} n_i^Y n_j^Z h\sigma g \mathcal{S}_{ij,k}^{es}(\sigma) 4\pi g^2 f^0(g) \frac{dg}{d\sigma} \quad (\text{II.30})$$

$$\kappa_\sigma^{ei} = \sum_{ijk} n_i^Y n_j^Z h\sigma g \mathcal{S}_{ij,k}^{ei}(\sigma) 4\pi g^2 f^0(g) \frac{dg}{d\sigma} \frac{1}{c} \quad (\text{II.31})$$

$$\kappa_\sigma^{abs} = \sum_{ijk} n_k^X h\sigma \mathcal{S}_{k,ij}^{abs}(\sigma) \frac{1}{c}, \quad (\text{II.32})$$

où κ_σ^{ei} et κ_σ^{abs} sont les coefficients d'émission induite et d'absorption pure, n_l^A désigne la population du niveau l de l'espèce A et $f^0(g)$ est la fonction de distribution des vitesses relatives des produits Y et Z qui est supposée être Maxwellienne à la température relative T_{rel} ³. Cette fonction est donc définie par :

$$f^0(g) = \frac{\mu^3}{h^3 \xi(\mu, T_{\text{rel}})} \exp\left(-\frac{\mu g^2}{2k_b T_{\text{rel}}}\right), \quad (\text{II.33})$$

où $\xi(\mu, T_{\text{rel}})$ est la fonction de partition translationnelle de la particule de masse μ à la température T_{rel} :

$$\xi(\mu, T_{\text{rel}}) = \left(\frac{2\pi\mu k_b T_{\text{rel}}}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (\text{II.34})$$

À l'ETL, les processus radiatifs lié-libre suivent comme les autres types de transitions la loi de Kirchhoff. Dans ce cas, l'insertion des expressions II.30 à II.32 dans la relation II.1

³Cette dernière hypothèse est justifiée dans la mesure où la description thermique des degrés de translation des particules lourdes et des électrons s'appuient, elles-mêmes sur des distributions de Maxwell

mène aux relations suivantes, similaires à celles de Milne-Einstein [109] :

$$\frac{\mathcal{S}_{ij,k}^{es}(\sigma)}{\mathcal{S}_{ij,k}^{ei}(\sigma)} = 2hc\sigma^3 \quad (\text{II.35})$$

$$\frac{4\pi\mu^2g^2}{h^2} g_i g_j \mathcal{S}_{ij,k}^{ei}(\sigma) = \frac{1}{c} g_k \mathcal{S}_{k,ij}^{abs}(\sigma), \quad (\text{II.36})$$

où g_i , g_j et g_k sont les dégénérescences des niveaux i , j et k des espèces Y , Z et X . L'établissement de ces relations qui relient les sections efficaces entre elles, est un point important pour des applications hors ETL. En effet, en termes de données disponibles dans la littérature, seules les sections efficaces en absorption pour les processus lié-libre sont généralement données. Hors ETL, se pose alors le problème de l'expression du coefficient d'émission qui ne peut plus être obtenu en passant par la loi de Kirchhoff comme à l'ETL. Les relations II.35 et II.36 nous permettent alors de pallier ce problème en obtenant des expressions des coefficients d'émission spontanée et d'émission induite, en fonction seulement des sections efficaces en absorption. Les relations obtenues sont les suivantes :

$$\eta_\sigma = 2hc^2\sigma^3 \sum_{ijk} \frac{n_i^Y n_j^Z}{\xi(\mu, T_{rel}) g_i g_j} \frac{g_k}{h\sigma \mathcal{S}_{k,ij}^{abs}(\sigma)} \exp\left(\frac{E_i^Y + E_j^Z + E_{reac} - E_k^X - hc\sigma}{kT_{rel}}\right) \quad (\text{II.37})$$

$$\kappa_\sigma = \sum_{ijk} h\sigma \mathcal{S}_{k,ij}^{abs}(\sigma) n_k^X \left[1 - \frac{g_k}{g_i g_j} \frac{n_i^Y n_j^Z}{\xi(\mu, T_{rel}) n_k^X} \exp\left(\frac{E_i^Y + E_j^Z + E_{reac} - E_k^X - hc\sigma}{kT_{rel}}\right) \right]. \quad (\text{II.38})$$

En fonction de la disponibilité des données sur les sections efficaces état par état existantes, les deux relations générales II.37 et II.38 peuvent être appliquées telles quelles ou adaptées à une description multi-température selon le processus.

Photoionisation atomique de N et O

Compte tenu du degré relativement faible d'ionisation du plasma rencontré dans les écoulements de rentrée, on considère seulement la photoionisation de N et de O . La réaction s'écrit :



où X désigne l'espèce N ou O . Pour cette réaction, compte tenu de la différence de masse entre l'ion X^+ et un électron, la température T_{rel} est prise égale à celle des électrons libres T_e . On dispose des sections efficaces en absorption de TOPBASE [103] qui sont tabulées en fonction de l'état k de la particule absorbante (*i.e.* sommées sur les états d'arrivée i). Ces sections efficaces, dépendantes du nombre d'onde, sont relatives à des valeurs multiplets puisque la base TOPBASE [103] n'est pas résolue en structure fine. Par rapport aux notations utilisées précédemment, ces sections efficaces $\mathfrak{S}_k^{abs}$ correspondent à :

$$\mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) = \sum_i h\sigma \mathcal{S}_{k,i}^{abs}(\sigma). \quad (\text{II.40})$$

Pour utiliser ces données dans les expressions II.37 et II.38, on doit supposer que les niveaux des produits sont peuplés suivant une distribution d'équilibre à T_e , autrement dit

que la population des niveaux électroniques des ions est à l'équilibre avec la translations des électrons libres. Suivant cette hypothèse, les coefficients d'émission η_σ^k et d'absorption κ_σ^k par niveau bas de la transition, désigné par k , s'exprime comme :

$$\eta_\sigma^k = 2hc^2\sigma^3 n_k^X \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \chi_k^{neq} \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \quad (\text{II.41})$$

$$\kappa_\sigma^k = n_k^X \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \left[1 - \chi_k^{neq} \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right], \quad (\text{II.42})$$

avec

$$\chi_k^{neq} = \frac{n_e n^{X+}}{2n_k^X \xi(\mu, T_e) Q_{X^+}(T_e)} g_k \exp\left(\frac{E_{ion} - E_k^X}{k_b T_e}\right), \quad (\text{II.43})$$

où E_{ion} est l'énergie d'ionisation *i.e.* la différence d'énergie entre les états fondamentaux de X^+ et de X . Le facteur χ_k^{neq} représente le rapport entre la population d'équilibre à T_e du niveau k de l'espèce X (*i.e.* celle qui découle de la loi de Saha) et la population réelle n_k^X . χ_k^{neq} représente dans ce cas un facteur de déséquilibre chimique niveau par niveau.

Dans le cadre d'une description Boltzmannienne des niveaux de X à une température quelconque d'excitation T_{el} (qui peut être différente de T_e) et en considérant toujours que les ions sont à l'équilibre avec les électrons, les coefficients η_σ et κ_σ s'obtiennent à partir des relations II.41 et II.42 en effectuant une sommation sur tous les états k :

$$\eta_\sigma = 2hc^2\sigma^3 \frac{n^X}{Q_X(T_e)} \chi^{neq} \sum_k \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) g_k \exp\left(-\frac{E_k^X + hc\sigma}{k_b T_e}\right) \quad (\text{II.44})$$

$$\kappa_\sigma^{ei} = \frac{n^X}{Q_X(T_e)} \sum_k \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) g_k \exp\left(-\frac{E_k^X}{k_b T_e}\right) \left[\chi^{neq} \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right] \quad (\text{II.45})$$

$$\kappa_\sigma^{abs} = \frac{n^X}{Q_X(T_{el})} \sum_k \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) g_k \exp\left(-\frac{E_k^X}{k_b T_{el}}\right), \quad (\text{II.46})$$

avec

$$\chi^{neq} = \frac{n_e n^{X+} Q_X(T_e)}{2n^X \xi(\mu, T_e) Q_{X^+}(T_e)} \exp\left(\frac{E_{ion}}{k_b T_e}\right). \quad (\text{II.47})$$

On distingue cette fois-ci le coefficient d'émission induite κ_σ^{ei} et celui d'absorption pure κ_σ^{abs} . Dans ces expressions, le facteur χ^{neq} exprime le rapport entre la densité totale de l'espèce X calculée avec la loi de Saha (exprimant l'équilibre chimique à la température T_e entre X , X^+ et les électrons), et la densité réelle n^X . Notez que dans le cas où l'on a l'équilibre thermique (*i.e.* $T_e = T_{el}$) et l'équilibre chimique *i.e.* $\chi^{neq} = 1$, les expressions de η_σ et κ_σ satisfont bien la loi de Kirchhoff.

Photodétachement de N^- et O^-

La réaction s'écrit de manière générale comme :



où X désigne l'espèce N ou O . Pour ces réactions, de même que pour la photoionisation atomique, la température T_{rel} est assimilée à celle des électrons libres T_e .

Pour le photodétachement de N^- , contribution controversée dans la littérature, certains travaux estiment que le terme 3P de la configuration $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$ contribuerait de manière prépondérante à la formation du continuum de photodétachement. Ce point de vue a été adopté par Chauveau [101]. La base de données HTGR pour cette contribution se résume alors à une valeur pragmatique de la section efficace d'absorption, associée à l'état 3P , choisie par Chauveau [101] comme moyenne de résultats expérimentaux et théoriques assez disparates à ce sujet. Le photodétachement de O^- est traité de manière similaire *i.e.* en considérant également un seul état, l'état fondamental de O^- , terme 2P de la configuration $(1s)^2(2s)^2(2p)^5$. La section efficace utilisée en absorption pour cette contribution a également été obtenue à partir d'une moyenne des sections expérimentales et théoriques disponibles dans la littérature. À noter que les sections pour ce type de contribution ne sont disponibles qu'en absorption. L'indice k dans la réaction II.48 désignera alors par la suite le niveau 3P pour le photodétachement de N^- ou 2P pour celui de O^- .

Ces données représentent des sections efficaces sommées sur l'état d'arrivée i :

$$\mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) = \sum_i h\sigma \mathcal{S}_{k,i}^{abs}(\sigma). \quad (\text{II.49})$$

La sommation sur l'indice k dans les relations II.37 et II.38 est alors faite sur un seul état. L'utilisation des sections $\mathfrak{S}_k^{abs}$ nécessite la même hypothèse que pour la photoionisation, à savoir que la population des produits doit suivre une distribution d'équilibre à T_e . De plus, la densité $n_k^{X^-}$ n'est généralement pas déterminée dans les codes hydrodynamiques, de même que la densité n^{X^-} de l'espèce X^- . La densité n^{X^-} étant généralement faible, elle peut être calculée perturbativement avec la loi de Saha en considérant un équilibre entre les densités de X , X^- et e^- à T_e . Finalement, les expressions des coefficients d'émission et d'absorption s'écrivent :

$$\eta_\sigma = 2hc^2\sigma^3 n_k^{X^-} \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \quad (\text{II.50})$$

$$\kappa_\sigma = n_k^{X^-} \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right], \quad (\text{II.51})$$

avec la densité $n_k^{X^-}$ déterminée avec la relation suivante :

$$n_k^{X^-} = \frac{n_e n^X}{2\xi(\mu, T_e) Q_X(T_e)} g_k \exp\left(\frac{E_{ion}}{k_b T_e}\right). \quad (\text{II.52})$$

Les données disponibles dans la littérature conduisent à considérer ce type de processus à l'ETL à la température des électrons T_e . On remarque que l'expression des coefficients obtenus satisfait la loi de Kirchhoff. Une description niveau par niveau pour le photodétachement n'est pas envisageable avec les sections efficaces dont nous disposons actuellement.

Photoionisation moléculaire de N_2 , O_2 et NO

Cette réaction est similaire à la réaction II.39 avec X désignant N_2 , O_2 et NO .

Un calcul rigoureux du coefficient d'absorption pour ces transitions nécessiterait de tenir compte de la contribution de l'ensemble des niveaux d'énergie rovibroniques de l'espèce

absorbante, une section efficace en absorption étant associée à chaque niveau. Ces sections efficaces ne sont pas disponibles dans la littérature. En pratique, Chauveau [101] a utilisé simplement des sections efficaces à température ambiante (≈ 300 K). L'utilisation de ces données ne permettent pas d'envisager une approche niveau par niveau électronique. On supposera par la suite que la population des niveaux d'énergie des espèces N_2^+ , O_2^+ et NO^+ sont à l'équilibre à la température T_e : ceci permet de simplifier les sommations sur i et k dans les relations II.37 et II.38 afin de tenir compte d'un écart par rapport à un équilibre chimique à T_e . Néanmoins les sections efficaces d'absorption sont prises à 300 K (les seules dont nous disposons). Nous utilisons donc pragmatiquement les expressions suivantes :

$$\eta_\sigma = 2hc^2\sigma^3 n^X \chi^{neq} \mathfrak{S}_0^{abs}(\sigma) \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \quad (\text{II.53})$$

$$\kappa_\sigma = n^X \mathfrak{S}_0^{abs}(\sigma) \left[1 - \chi^{neq} \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right], \quad (\text{II.54})$$

dans lesquelles, $\mathfrak{S}_0^{abs}$ est la section efficace en absorption pour des conditions standards (à 300 K) et le facteur χ^{neq} s'écrit de la même manière que celui de l'expression II.47 où tous les degrés sont pris à T_e . On remarque que l'équilibre chimique ($\chi^{neq} = 1$) entre X , X^+ et e^- mène bien à respecter la loi de Kirchhoff à la température T_e .

Photodissociation de O_2 (Schumann-Runge)

De manière générale, la réaction s'écrit :



La température T_{rel} caractérisant la vitesse relative des produits est égale dans ce cas à la température de translation des espèces lourdes T . Pour ce processus, les seules sections efficaces disponibles dans la littérature sont données à l'ETL. Ce sont celles préconisées par Churchill *et al.* [110] et Mnatsakanyan [111] issues de résultats théoriques et expérimentaux. Ce sont des sections globales qui dépendent du nombre d'onde et de la température d'équilibre ($< 10000K$). Ces sections efficaces sont définies comme :

$$\mathfrak{S}_{ETL}^{abs}(\sigma, T) = \frac{h\sigma}{Q_{O_2}(T)} \sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k^{O_2}}{k_b T}\right) \mathcal{S}_{k,i_0 j_0}^{abs}(\sigma). \quad (\text{II.56})$$

Dans cette expression, $E_k^{O_2}$ désigne l'énergie du niveau k de O_2 et, i_0 et j_0 désignent le seul couple de niveaux sur lequel on considère que les atomes d'oxygène sont produits, *i.e.* les niveaux 3P (le fondamental) et 1D de l'oxygène. Ces niveaux correspondent à l'état asymptotique de l'état électronique $O_2 B^3\Sigma_u^-$. Sous cette dernière hypothèse, la sommation sur les niveaux dans les relations II.37 et II.38 se résume simplement à celle sur les niveaux k . Sous ces différentes conditions, les équations II.37 et II.38 appliquées à la photodissociation de O_2 permettent d'obtenir :

$$\eta_\sigma = 2hc^2\sigma^3 n^{O_2} \chi^{neq} \mathfrak{S}_{ETL}^{abs}(\sigma, T) \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T}\right) \quad (\text{II.57})$$

$$\kappa_\sigma^{ei} = n^{O_2} \chi^{neq} \mathfrak{S}_{ETL}^{abs}(\sigma, T) \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T}\right), \quad (\text{II.58})$$

avec

$$\chi^{neq} = \chi_{chm}^{neq} \chi_{thm}^{neq} \quad (\text{II.59})$$

$$\chi_{chm}^{neq} = \frac{n^{O_2} Q_{O_2}(T)}{2n^{O_2} \xi(m_O, T) Q_O^2(T)} \exp\left(\frac{E_{diss}}{k_b T}\right) \quad (\text{II.60})$$

$$\chi_{thm}^{neq} = \frac{n_{i_0}^O n_{j_0}^O}{n_{i_0E}^O n_{j_0E}^O}, \quad (\text{II.61})$$

où E_{diss} est l'énergie de dissociation de l'espèce O_2 , $n_{i_0E}^O$ et $n_{j_0E}^O$ les populations des états i_0 et j_0 de O à l'équilibre à T et, $n_{i_0}^O$ et $n_{j_0}^O$ les populations réelles de ces derniers. Dans ces relations, les facteurs χ_{chm}^{neq} et χ_{thm}^{neq} représentent respectivement le déséquilibre chimique par rapport à la loi de Saha à T (donnant la densité n^{O_2} lorsque O_2 est à l'équilibre chimique avec O) et le déséquilibre thermique par rapport à un équilibre des populations de O à T .

Pour le coefficient d'absorption, on a supposé que les niveaux d'énergie de O_2 sont à l'équilibre à la température de vibration de O_2 (température d'équilibre qui semble plus adaptée que T) :

$$\kappa_{\sigma}^{abs} = n^{O_2} \mathfrak{S}^{abs}(\sigma, T_{v,O_2}). \quad (\text{II.62})$$

Par conséquent, pour traiter la photodissociation de O_2 avec les données publiées sur les sections efficaces, on peut au mieux considérer une approche niveau par niveau pour les deux premiers niveaux de O pour le calcul de l'émission spontanée et induite mais obligatoirement une distribution Boltzmannienne pour les niveaux vibrationnels de O_2 pour l'estimation de l'absorption vraie.

Dans le cas d'une description complètement multi-température où les niveaux de O suivent une distribution d'équilibre à T_{el} par exemple, le facteur χ_{thm}^{neq} devient :

$$\chi_{thm}^{neq} = \frac{Q_O^2(T)}{Q_O^2(T_{el})} \exp\left(\frac{E_{i_0} + E_{j_0}}{k_b T} - \frac{E_{i_0} + E_{j_0}}{k_b T_{el}}\right). \quad (\text{II.63})$$

De même que pour les autres contributions, la loi de Kirchhoff est vérifiée lorsque l'équilibre thermique et chimique est rencontré.

II.2.2.2 Transitions libre-libre

Ce type de réaction met en jeu un électron et une particule lourde. Elle s'écrit de manière générale comme :

$$X + e_i^- + hc\sigma \rightleftharpoons X + e_j^-, \quad (\text{II.64})$$

où i et j désignent des états translationnels de l'électron et X l'espèce lourde mise en jeu. Dans ces travaux Chauveau [101] a considéré ce type de processus pour les particules neutres N_2 , O_2 , N , O et les ions N^+ et O^+ . Dans la mesure où seuls les degrés de translation des électrons sont pris en compte dans la modélisation retenue, ces transitions peuvent être traitées à l'ETL à la température des électrons T_e . On utilise directement les expressions données par Chauveau [101] pour lesquelles la loi de Kirchhoff est évidemment vérifiée :

$$\eta_{\sigma} = 2hc^2 \sigma^3 n^X n_e \mathfrak{S}^{abs}(\sigma, T_e) \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \quad (\text{II.65})$$

$$\kappa_{\sigma} = n^X n_e \mathfrak{S}^{abs}(\sigma, T_e) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right] \quad (\text{II.66})$$

où $\mathcal{S}^{abs}$ est la section efficace en absorption. Pour les transitions mettant en jeu un ion, les sections efficaces utilisées sont tirées des travaux de Kramers [112] avec une correction quantique par l'intermédiaire d'un facteur de Gaunt calculé à partir des expressions de Stallcop *et al.* [113]. Pour les transitions mettant en jeu un neutre, les sections efficaces sont extraites des travaux de Mjolsness *et al.* [114].

II.3 Application à des écoulements de rentrée atmosphérique terrestre

La formulation des propriétés radiatives pour les milieux hors d'équilibre énoncée dans la section précédente a été mise en œuvre dans un cas de rentrée atmosphérique terrestre représentatif des rentrées à haute vitesse et hors d'équilibre. Ceci a été réalisé dans le cadre d'un workshop organisé par l'Agence Spatiale Européenne (ESA), dans lequel un cas test a consisté à reproduire numériquement les données radiatives obtenues en vol lors de l'expérience FIRE II. Les mesures radiatives à comparer sont des luminances spectrales et cumulées obtenues au point d'arrêt de l'engin de rentrée. Les calculs radiatifs ont été réalisés à partir de champs aérothermochimiques prescrits par l'ESA et sans couplage avec l'hydrodynamique.

II.3.1 Le projet FIRE

Le projet FIRE est une campagne d'essai en vol, effectuée dans les années 60 dans le cadre du programme Apollo, afin d'étudier l'échauffement pariétal d'un véhicule rentrant dans l'atmosphère terrestre à vitesse hypersonique [115, 116, 117]. Deux vols ont été réalisés (FIRE I et FIRE II, noms attribués aux sondes) suivant la même procédure. Initialement placée à l'étage supérieur d'un lanceur de type ATLAS, la sonde de forme similaire aux capsules Apollo a été séparée du lanceur à 300 km d'altitude pour entamer une descente dans l'atmosphère à une vitesse approximative de 11.4 km/s correspondant à la vitesse d'un retour lunaire. Au cours du vol, la sonde a rencontré différents régimes d'écoulement, allant des écoulements à haute altitude, grande vitesse et en fort déséquilibre aux écoulements à basse altitude, basse vitesse et à l'équilibre (ces différents régimes sont décrits dans la section I.2).

La forme générale et les dimensions des sondes FIRE sont indiquées sur les figures II.1 et II.2. Les sondes sont constituées d'un avant-corps sphérique et d'un arrière-corps conique. La figure II.1 montre par ailleurs les instruments qui équipent les sondes pour effectuer des mesures de flux de chaleur conducto-convectif et radiatif. Afin de faire des mesures dans une atmosphère libre de contaminants, le bouclier faisant office de calorimètre est en béryllium, métal ayant le point de fusion le plus élevé de tous les métaux légers ce qui permet de limiter les phénomènes d'ablation et qui offre par ailleurs une très bonne résistance mécanique. Cependant compte tenu de l'échauffement important rencontré pendant la phase de rentrée, même un calorimètre en béryllium n'est pas capable de résister aux flux de chaleur sans s'ablater et ainsi générer des produits d'ablation susceptibles de contaminer les mesures. Afin d'avoir des conditions de mesures « saines » pendant une grande partie de la descente, la solution envisagée a été alors d'empiler trois couches (boucliers) de béryllium, chacune

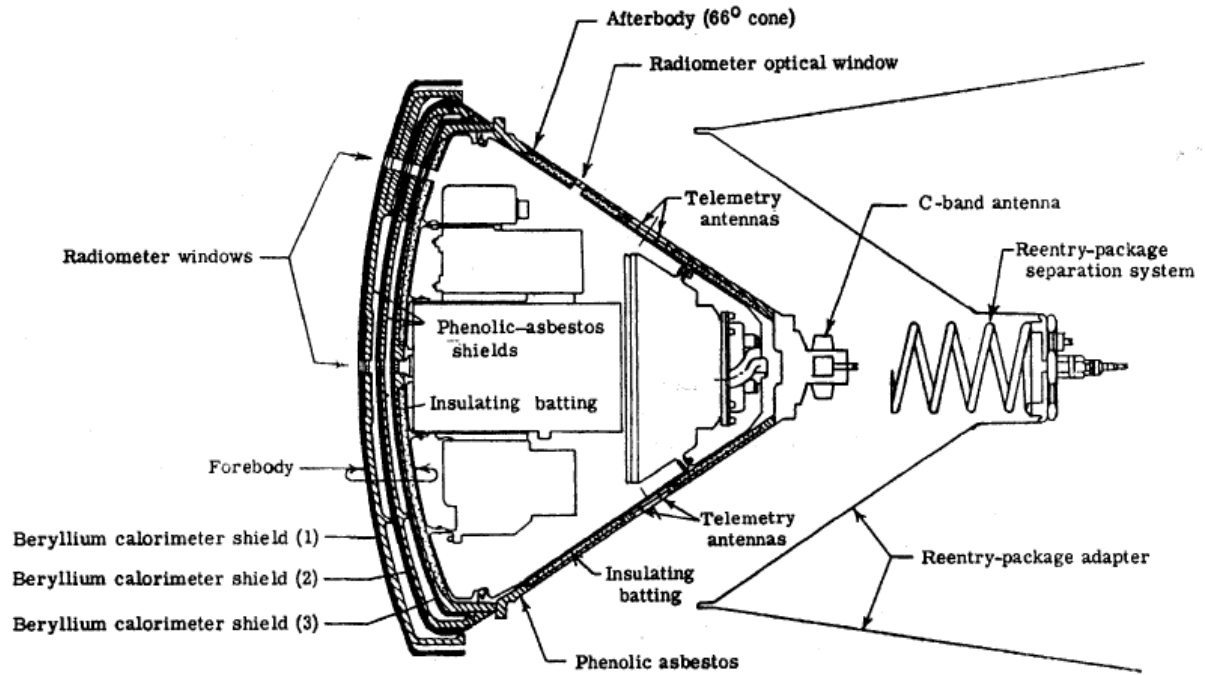
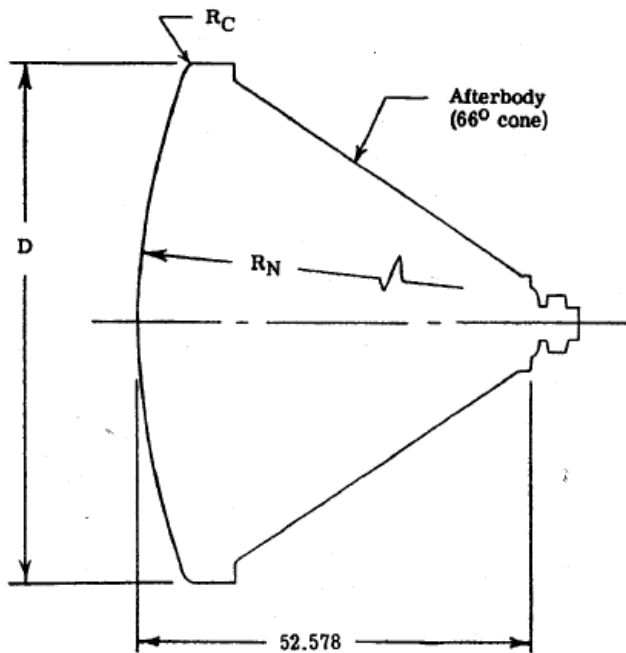


FIG. II.1: Schéma des sondes du projet FIRE avec leur équipement [117].



Experiment period	Reentry package dimensions		
	D	R_N	R_C
1	67.16	93.47	1.02
2	62.99	80.52	3.56
3	58.70	70.21	0.61

FIG. II.2: Géométrie et dimensions en centimètre des sondes du projet FIRE [117].

étant éjectée après un certain temps d'exposition aux échauffements, garantissant ainsi de bonnes conditions de mesures. Comme l'indique le tableau de la figure II.2, le rayon de nez de l'appareil prend donc trois valeurs différentes au cours du vol. Les trois périodes de mesures séparées par les deux éjections des boucliers correspondent à trois régimes d'écoulement distincts, le premier étant un régime fortement hors d'équilibre, le deuxième proche de l'équilibre et le troisième quasiment à l'équilibre.

Pour effectuer des mesures radiatives, la sonde était équipée de plusieurs radiomètres. Des radiomètres totaux donnant des valeurs intégrées de luminances directionnelles, étaient placés à trois endroits dans la sonde comme indiqué sur la figure II.1 : un situé au point d'arrêt pour mesurer le rayonnement de l'avant-corps, un deuxième positionné sur le haut des boucliers thermiques et le troisième sur la face arrière de la sonde. La plage spectrale de ces radiomètres est comprise entre $0.2 \mu\text{m}$ et $4 \mu\text{m}$ ($2500\text{-}50000 \text{ cm}^{-1}$). Un radiomètre spectral placé au niveau du point d'arrêt a permis de mesurer le spectre de luminance monochromatique directionnelle dans la plage plus restreinte $0.3\text{-}0.6 \mu\text{m}$ ($16666\text{-}33333 \text{ cm}^{-1}$) avec une résolution de $0.004 \mu\text{m}$.

Dans le cadre du cas test ESA, on s'intéresse uniquement aux mesures radiatives réalisées au point d'arrêt de la sonde FIRE II *i.e.* celles données par le radiomètre total et le radiomètre spectral situé dans l'alignement du point d'arrêt. Les données recueillies lors du vol FIRE I ne sont pas exploitables pour cause de bruit, de perte du signal et de manque de stabilité de l'engin au cours du vol.

II.3.2 Champs aérothermochimiques

Les champs aérothermochimiques fournis par l'ESA que nous avons utilisés pour réaliser les calculs radiatifs sont issus du code de calcul TINA [57]. Le code TINA est un code 3D qui résout les équations de Navier-Stokes qui régissent l'écoulement autour de l'engin. Le déséquilibre thermique est modélisé avec une approche à deux températures : une température T pour la translation et la rotation des particules et une autre température T_{ve} pour caractériser les niveaux électro-vibrationnels des particules lourdes et la translation des électrons libres. Le déséquilibre chimique est quant à lui pris en compte avec le schéma cinétique de Park [69]. Le couplage chimie/dissociation est modélisé avec l'approche semi-empirique de Park [68] qui consiste à utiliser une température égale à $\sqrt{TT_{ve}}$ comme température pilotant les réactions de dissociation par impact avec une particule lourde. Plus de détails sur la modélisation de l'écoulement sont donnés dans la définition du cas test [118].

TAB. II.2: Conditions de vol de la sonde FIRE II pour quatre points de trajectoire.

Temps [s]	1634	1637.5	1642.66	1648
Altitude [km]	76.42	67.05	53.86	42.14
Vitesse [km/s]	11.36	11.25	10.56	8.3
Densité [kg/m^3]	3.72E-5	1.47E-4	7.17E-4	3.00E-3
T_∞ [K]	195	228	273	267
T_{paroi} [K]	615	1030	480	1560

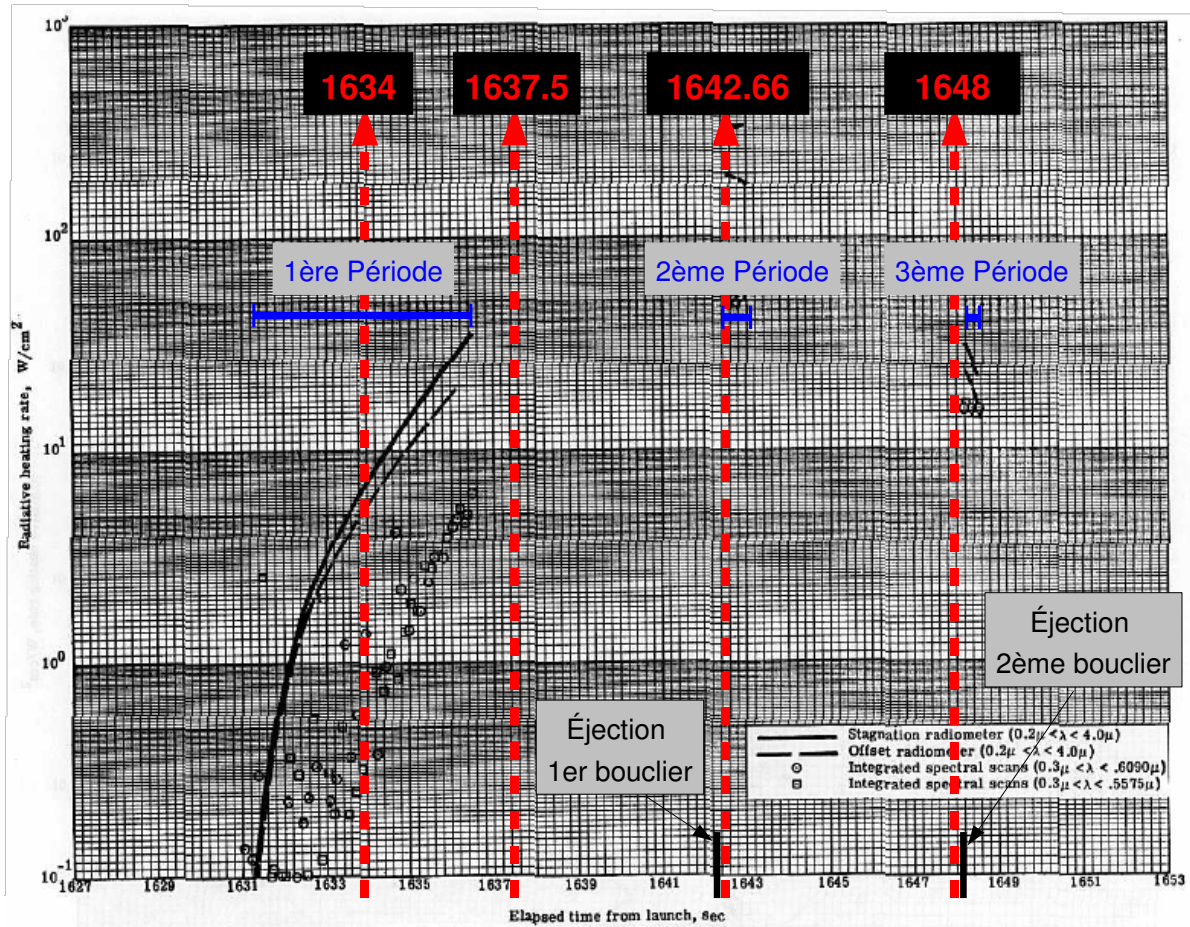


FIG. II.3: Estimation du flux radiatif en fonction du temps de vol à partir des mesures expérimentales (adaptée de [115]).

Quatre points de trajectoire de rentrée de la sonde FIRE II ont été simulés. Les conditions de vol correspondant à ces points sont indiquées dans le tableau II.2. Les deux premiers points de trajectoire sont situés temporellement avant l'éjection du premier bouclier ayant lieu approximativement à $t = 1642.5$ s et les deux suivants avant l'éjection du deuxième bouclier située approximativement à $t = 1648.1$ s. En terme de mesures, les données ont été recueillies de manière continue sur une grande partie de la trajectoire de rentrée (1628-1652 s), mais seulement trois plages temporelles correspondent à des conditions de mesure estimées « saines ». Il s'agit des intervalles 1631.3-1636.47 s, 1642.47-1642.9 s et 1648.16-1648.5 s. Suivant les termes introduits par Olynick *et al.* [7], qui ont également reconstruit ce cas d'épreuve, on désignera tous les points de mesures dans ces intervalles de « prime » et par opposition tous les points qui en sortent de « non-prime ». La figure II.3⁴ montre les trois plages de mesure, les temps d'éjection des boucliers ainsi que les quatre points étudiés dans le cadre du cas test. Les points de trajectoire 1634 s et 1642.66 s, sont situés dans les plages de mesure fiables et les deux autres, 1637.5 s et 1648 s, sont des points « non-prime » légèrement en dehors de ces plages de mesures. Les données en vol concernant ces deux derniers points sont donc susceptibles d'avoir été perturbées par le milieu ambiant. Ceci est en particulier le cas pour le point de mesure 1648 s, pour lequel les mesures ont été

⁴Cette figure indique des flux radiatifs. Ils ont été obtenus à partir des luminances mesurées en vol et de formules approchées [115].

effectuées juste avant l'éjection du deuxième bouclier. On relèvera une certaine incohérence dans le choix fait par l'ESA des points de trajectoire 1637.5 s et 1648 s.

La figure II.4 montre les profils de températures, de pression totale, et de concentrations sur la ligne d'arrêt pour les quatre points de trajectoire indiqués dans le tableau II.2. La discrétisation des champs fournis par l'ESA était de 200 points sur la ligne d'arrêt. Dans un souci de limiter les temps de calcul et le stockage des propriétés radiatives sur cette ligne d'arrêt, les champs fournis ont été dégrossis sur une grille réduite suivant les gradients de température et de concentrations. La discrétisation finale d'une trentaine de points est indiquée sur les profils de la figure II.4.

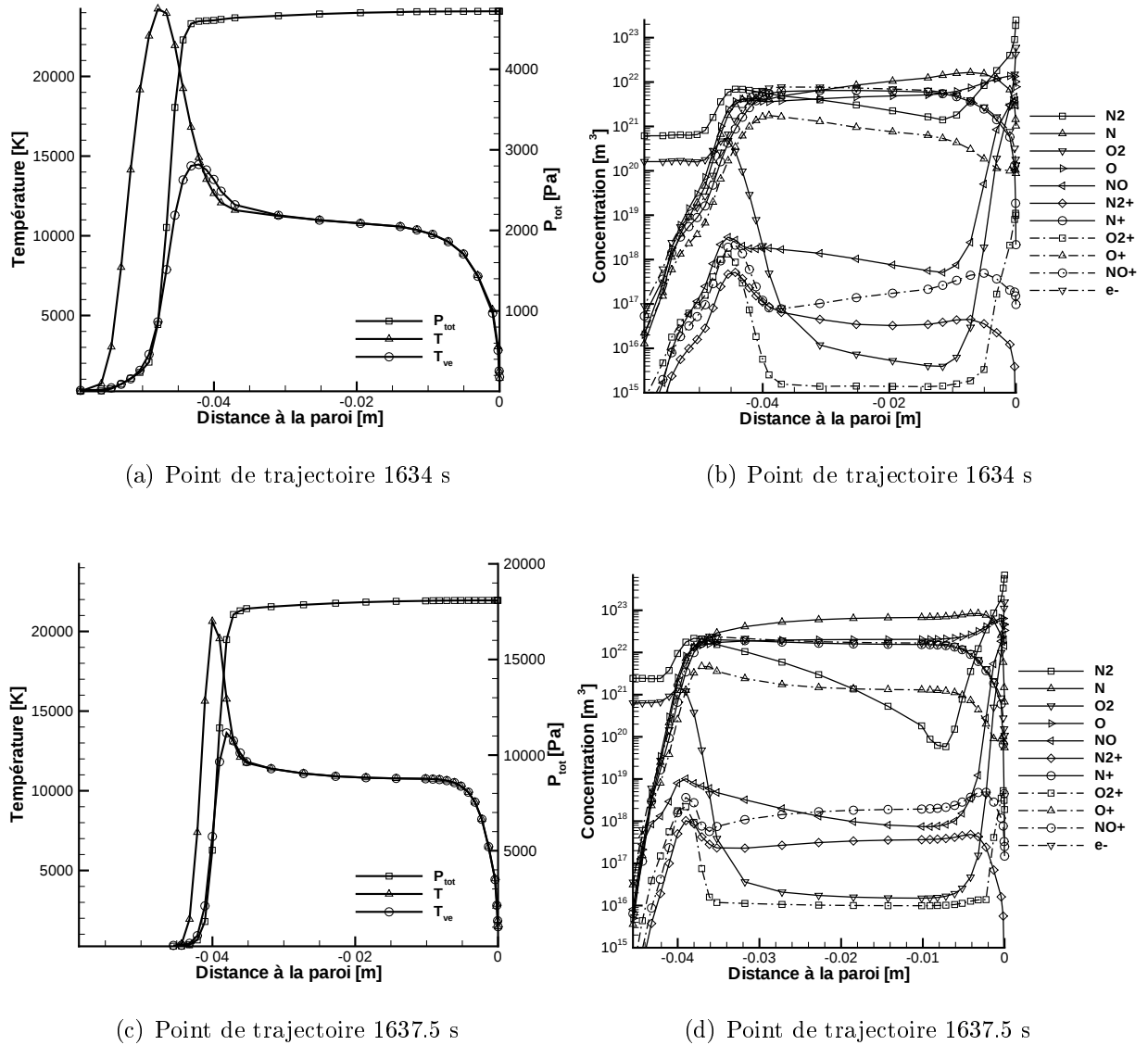
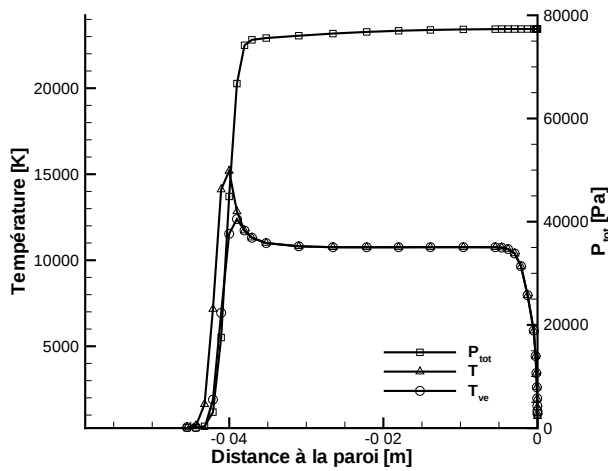


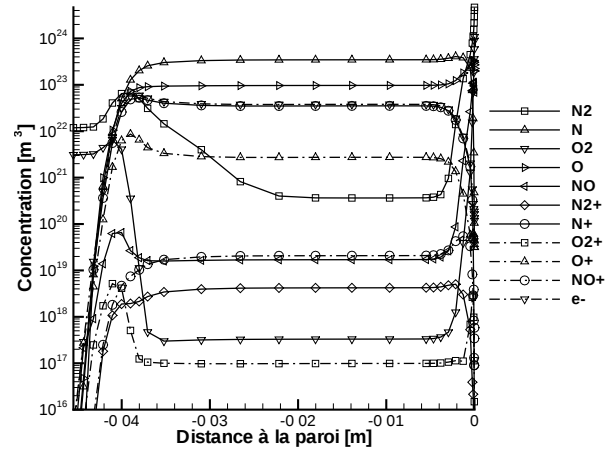
FIG. II.4: Profils des températures, de la pression et des concentrations le long de la ligne d'arrêt pour les deux premiers points de trajectoire étudiés (1/2).

Sur cette figure, on remarque que la distance choc-paroi diminue au cours du vol. Ceci est dû en partie à la chute de la vitesse et à l'accroissement de la densité amont mais aussi parce que le rayon de nez de la sonde diminue à chaque éjection de bouclier (Zel'dovich [16] estime

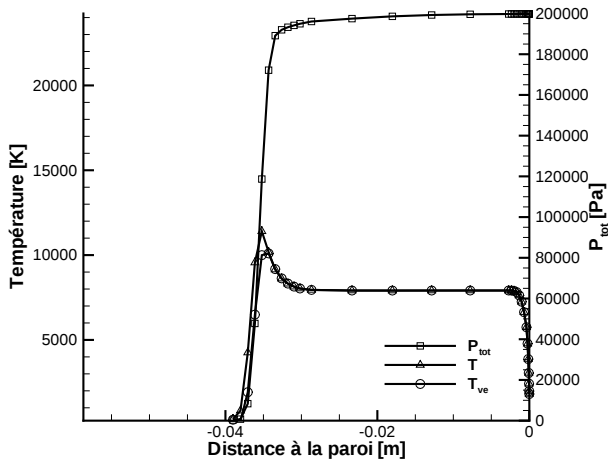
que la distance choc-paroi est d'environ un dixième du rayon de nez de l'engin). Les deux premiers points de trajectoire sont à basse pression (respectivement 4700 et 18000 Pa dans la couche de choc) et présentent une zone de déséquilibre thermique non négligeable (entre 15 et 30% de l'épaisseur de la couche de choc). La température de translation-rotation T augmente d'abord fortement avant de relaxer avec les modes électro-vibrationnels des particules et la translation des électrons libres décrits par la température T_{ve} . Les deux températures s'équilibrent alors et se stabilisent sur un plateau avant la couche limite. Comme le montrent les figures II.4(e) et II.4(g), cette zone de déséquilibre est plus étroite dans les deux autres cas, 1642.66 s et 1648 s qui correspondent à des cas plus hautes pressions (respectivement 77000 et 200000 Pa) et des vitesses plus réduites. Les collisions entre particules sont plus fréquentes, ce qui contribue à thermaliser plus rapidement l'écoulement.



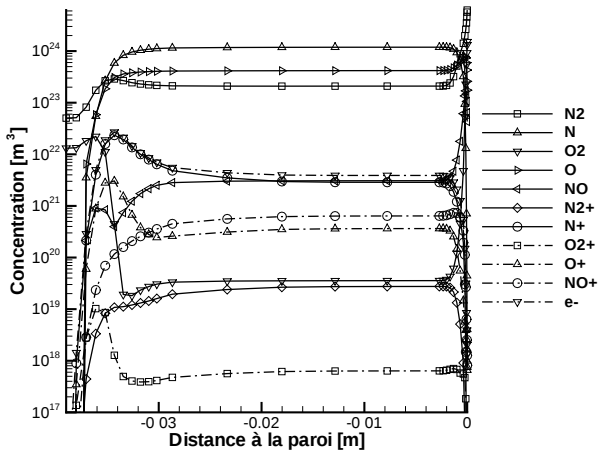
(e) Point de trajectoire 1642.66 s



(f) Point de trajectoire 1642.66 s



(g) Point de trajectoire 1648 s



(h) Point de trajectoire 1648 s

FIG. II.4: Profils des températures, de la pression et des concentrations le long de la ligne d'arrêt pour les derniers points de trajectoire étudiés (2/2).

Du point de vue de la chimie, à l'instar de la relaxation thermique qui est de plus en plus rapide au fur et à mesure que la sonde descend, les concentrations évoluent également vers

un plateau plus rapidement. Au niveau de la couche limite, la paroi étant considérée comme catalytique, les concentrations tendent alors vers leurs valeurs à l'ETL à la température de paroi. Par ailleurs on constate que le taux de dissociation de O_2 est beaucoup plus important que celui de N_2 et que l'évolution de la densité de N^+ suit étroitement celle des électrons. Le taux d'ionisation au niveau du plateau « thermique et chimique » est de 22.2 % pour le premier point de trajectoire 1634 s, de 14.6 % au point de vol 1637.5 s, de 7.3 % au point de vol 1642.66 s et enfin il n'est plus que de 0.23 % pour le dernier point simulé. Ceci est en accord avec la description thermochimique faite dans le chapitre I où l'on indique que le taux d'ionisation est d'autant plus petit que la vitesse amont de l'écoulement est faible.

II.3.3 Transferts radiatifs sur ligne d'arrêt

Des calculs de transferts radiatifs à haute résolution sur ligne d'arrêt ont été réalisés en utilisant les champs aérothermochimiques présentés dans la section précédente, afin de déterminer les luminances spectrales au point d'arrêt. L'équation de transfert radiatif (ETR) formulée précédemment dans la section I.3.2 a été résolue pas à pas et pour chaque nombre d'onde sous la forme intégrée suivante :

$$L_\sigma(z + \Delta z) = L_\sigma(z)e^{-\kappa_\sigma(z+\Delta z/2)\Delta z} + \frac{\eta_\sigma(z + \Delta z/2)}{\kappa_\sigma(z + \Delta z/2)} (1 - e^{-\kappa_\sigma(z+\Delta z/2)\Delta z}), \quad (\text{II.67})$$

où z désigne l'abscisse sur la ligne d'arrêt et Δz la longueur d'une cellule. La résolution de cette équation a nécessité au préalable le calcul des coefficients d'absorption κ_σ et d'émission η_σ pour chaque cellule du maillage (30 cellules). L'ensemble des processus radiatifs présentés dans la section II.2 ont été pris en compte pour déterminer les propriétés radiatives. En accord avec la description thermochimique utilisée dans les calculs CFD, des distributions de Boltzmann à T et T_{ve} ont été utilisées pour caractériser respectivement les niveaux rotationnels et électro-vibrationnels des particules. La température des électrons libres est prise égale à T_{ve} .

Les calculs ont été effectués sur l'intervalle spectral 1000-150000 cm^{-1} discrétisé à haute résolution sur une grille logarithmique telle que :

$$\log(\sigma_{i+1} - \sigma_i) = \log \alpha + (i - 1) \log \beta, \quad (\text{II.68})$$

où σ_i désigne le nombre d'onde du $i^{\text{ème}}$ point spectral et α et β deux paramètres caractérisant la grille. Dans nos calculs, on a utilisé les paramètres suivants :

$$\begin{aligned} \alpha &= (0.12 - 0.01) \frac{1000}{150000} + 0.01 \\ \beta &= 1 + \frac{0.12 - 0.01}{150000}. \end{aligned}$$

Cette grille spectrale, utilisée également dans les travaux de Babou [119] et Chauveau [101], assure une discrétisation suffisante pour nos applications.

II.3.4 Résultats et analyses

Pour estimer quels sont les processus radiatifs contribuant majoritairement à l'échauffement de la paroi, les coefficients d'émission et d'absorption ont été stockés pour différents

types de processus. À titre illustratif, la figure II.5 montre les spectres d'émission et d'absorption pour un point du choc correspondant au temps de vol 1642.66 s. Sont représentés les spectres globaux, les spectres sans la contribution des raies atomiques (essentiellement situées dans l'IR et le VUV), les continua, et les spectres des systèmes moléculaires de NO . Concernant les contributions des systèmes moléculaires, les systèmes prédominants sont les systèmes $N_2(1+)$, $N_2(2+)$, $N_2^+(1-)$, quelques systèmes de NO et surtout les systèmes de $N_2(VUV)$ (sous l'appellation $N_2(VUV)$, on regroupe les systèmes N_2 Birge-Hopfield 1 et 2, Worley, Worley-Jenkins et Carroll-Yoshino qui contribuent globalement dans l'intervalle 70000-120000 cm^{-1}).

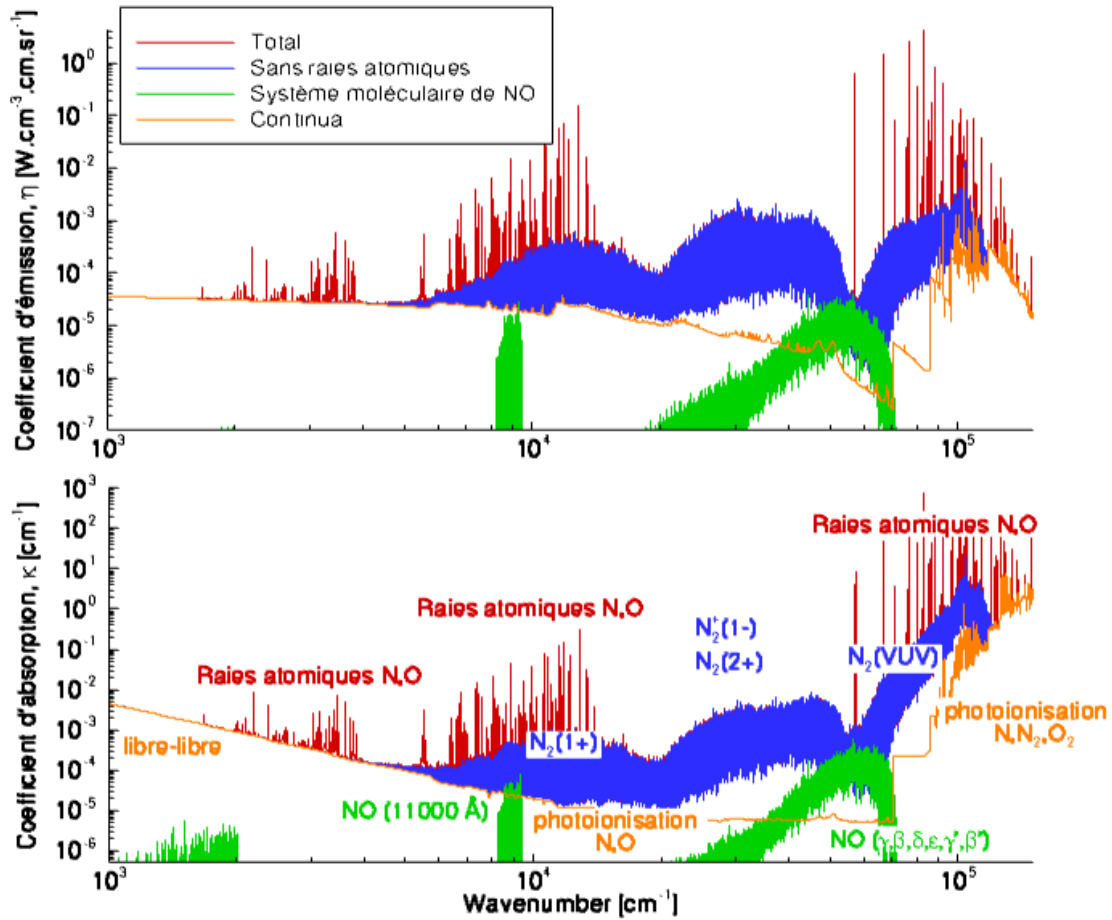


FIG. II.5: Coefficients d'émission et d'absorption calculés dans les conditions thermochimiques correspondant à un point dans le choc au temps de vol 1642.66 s - $P_{tot} = 45000$ Pa, $T = 15000$ K, $T_{ve} = 11500$ K.

II.3.4.1 Comparaison aux données en vol

Les calculs sur ligne d'arrêt ont été comparés aux données en vol dans les deux intervalles spectraux de mesure qui sont 16666-33333 cm^{-1} et 2500-50000 cm^{-1} . Le tableau II.3 donne les luminances intégrées au point d'arrêt issues des données en vol et des calculs. On indique les incertitudes de mesure en pourcent pour les données en vol correspondant aux points « prime », *i.e.* les points de trajectoire pour lesquels les mesures sont considérés comme

fiables (cf. §II.3.2). Les résultats expérimentaux sont à comparer aux calculs prenant en compte l'absorption.

Pour l'intervalle $16666-33333 \text{ cm}^{-1}$, les calculs donnent qualitativement la même tendance que les données en vol *i.e.* une augmentation jusqu'au point 1642.66 s puis une diminution de la luminance. D'un point de vue quantitatif, pour les points 1634 s et 1648 s, nos calculs surestiment la luminance en particulier pour le point 1634 s (cette surestimation est discutée par la suite). Pour les points 1637.5 s et 1642.66 s, les écarts sont respectivement de 26.6% et de 23.8 % avec les mesures ce qui est relativement satisfaisant dans la mesure où les données en vol sont données avec une précision de 23%.

Au niveau spectral, la figure II.6 montre des comparaisons entre luminance mesurée, issue de la Réf. [116], et luminance calculée à basse résolution. Pour cette dernière, une convolution de nos spectres calculés à haute résolution a été réalisée pour obtenir la même résolution que le spectromètre, à savoir $0.004 \text{ } \mu\text{m}$. Les amplitudes calculées sont globalement en bon accord avec celles des mesures et on distingue clairement dans le cas 1648 s la structure des transitions de $N_2(2+)$ et de $N_2^+(1-)$ dans l'intervalle $0.3-0.45 \text{ } \mu\text{m}$. On note un écart sur la position des têtes de bande de ces systèmes. Ceci est dû à un problème de calibration du spectromètre qui est expliquée dans la Réf. [116]. Ces figures et le tableau II.3 montre que dans cette gamme spectrale, les raies atomiques ne contribuent pas significativement contrairement aux processus de recombinaison radiative de N et O (processus inverse du photodétachement de N^- et O^-), aux systèmes moléculaires $N_2(2+)$ et de $N_2^+(1-)$ et à la recombinaison radiative de N^+ et O^+ . À noter par ailleurs que pour cette intervalle de mesure $16666-33333 \text{ cm}^{-1}$, l'absorption est quasiment négligeable.

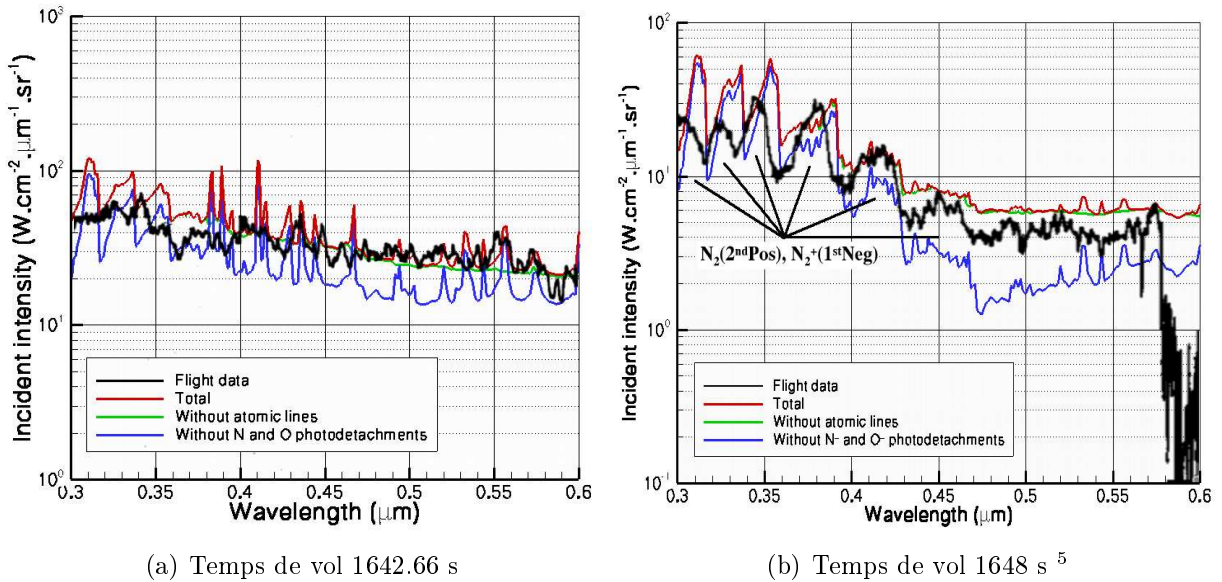


FIG. II.6: Luminance incidente à basse résolution spectrale au point d'arrêt.

Le tableau donne également les résultats obtenus dans l'intervalle de mesure $2500-50000 \text{ cm}^{-1}$ au point d'arrêt pour les quatre points de trajectoire. La comparaison entre nos calculs et les données en vol indique la même tendance que pour l'intervalle $16666-33333 \text{ cm}^{-1}$ *i.e.*

⁵Le spectre mesurée correspond au temps de vol 1648.19 s et non 1648 s dans la mesure où il n'est pas disponible pour ce temps de vol.

TAB. II.3: Luminance au point d'arrêt intégrée sur différents intervalles spectraux.

Intervalle spectral [μm ou cm^{-1}]	Point de trajectoire	Donnée en vol	$q^R[\text{W.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}]$					
			avec absorption			Nos calculs		
			avec absorption	sans absorption	continua	continua atomiques	continua moléculaires	Sans raies atomiques sans continua
0.3 – 0.6 ou 16666-33333	1634 s 1637.5 s 1642.66 s 1648 s	0.1 $\pm$ 23% 3 10.5 $\pm$ 23% 2.9	2.2 3.8 13 4.4	2.2 3.83 13.2 4.45	0.14 1.16 8.75 1.63	- - - -	- - - -	2.09 3.55 11.8 4.4
0.2 – 4 ou 2500-50000	1634 s 1637.5 s 1642.66 s 1648 s	1.3 $\pm$ 23% 13 63 $\pm$ 23% 5	6.25 15.9 62.6 12.5	6.58 17.9 78.8 13	0.505 3.85 25.5 3.54	- - - -	- - - -	3.14 7.15 30 9.34
0.066 – 10 ou 1000-150000	1634 s 1637.5 s 1642.66 s 1648 s	- - - -	62.3 80.8 149.8 21.4	375.9 1193.4 5505.6 552	7.57 26.4 81.3 5.32	6.28 27.5 85.2 5.18	2.99 1.84 0.89 0.39	55.4 63.4 94.3 17.7
								57.8 67.2 103.9 17.8

qu'il y a un bon accord global mais avec une surestimation des luminances calculées pour le premier et le dernier points de trajectoire. La figure II.7 montre les luminances obtenues expérimentalement en fonction du temps de vol et celles obtenues numériquement pour les quatre points de trajectoire étudiés. On indique sur cette figure les points « prime » (*i.e.* fiables) et « non-prime ». Pour les points 1637.5 s et 1642.66 s, les écarts sont inférieurs à 23%. Ce résultat est cependant à relativiser pour le point 1637.5 s car c'est un point « non-prime ». Une certaine confiance peut tout de même être accordée à ce point expérimental dans la mesure où c'est un point de vol se situant juste après un intervalle de mesure « sain » comme l'atteste la figure II.3.

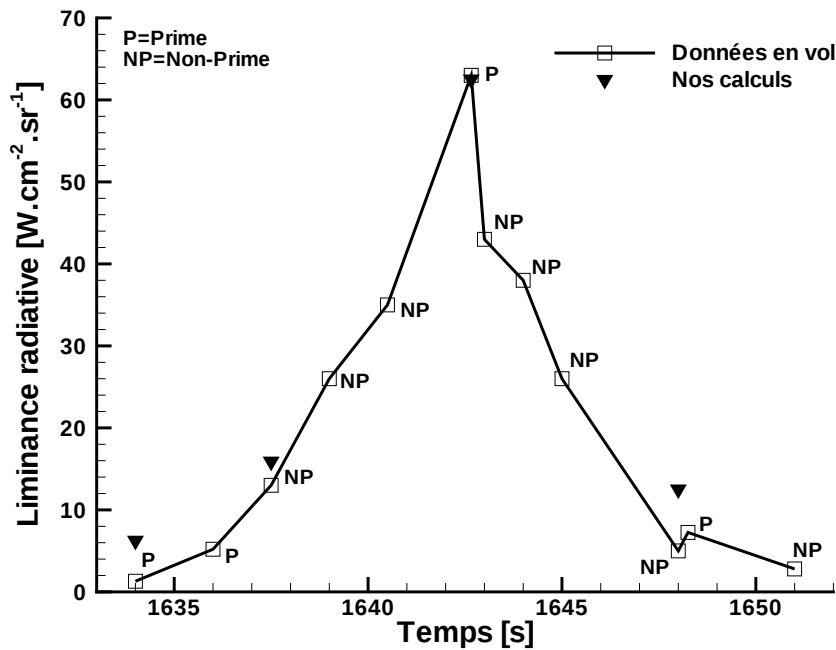


FIG. II.7: Luminance radiative au point d'arrêt intégrée dans l'intervalle $2500 - 50000 \text{ cm}^{-1}$.

Concernant la surestimation de la luminance au point 1634 s, une explication possible viendrait du champ de température obtenu pour ce point de trajectoire. La figure II.8 montre une comparaison du champ de température T_{ve} (température caractérisant le peuplement des niveaux électro-vibrationnels des particules) obtenu avec le code TINA (champ utilisé dans nos calculs) et le code LAURA (code hydrodynamique développé par la NASA - Langley [20] qui utilise également une approche à deux températures). Ce dernier champ est extrait des travaux de Olynick *et al.* [7]. On constate que le code TINA surestime T_{ve} par rapport au code LAURA dans la zone hors d'équilibre (15000 K au lieu de 10000 K au niveau du maximum). Les profils, le long de la ligne d'arrêt, d'émission totale, des raies atomiques, des systèmes moléculaires et des continua, obtenus à partir des champs produit par le code TINA, sont également représentés sur la figure II.8. Ces profils montrent clairement que l'émission des transitions lié-lié est la plus forte dans la zone où justement la surestimation de T_{ve} se produit. On peut donc légitimement penser que cette surestimation de la température électro-vibrationnelle qui est essentielle dans les calculs des propriétés radiatives entraîne une surestimation de la luminance au point d'arrêt. La validité de l'hypothèse d'une température T_{ve} peut aussi être mise en doute pour ce point en fort déséquilibre.

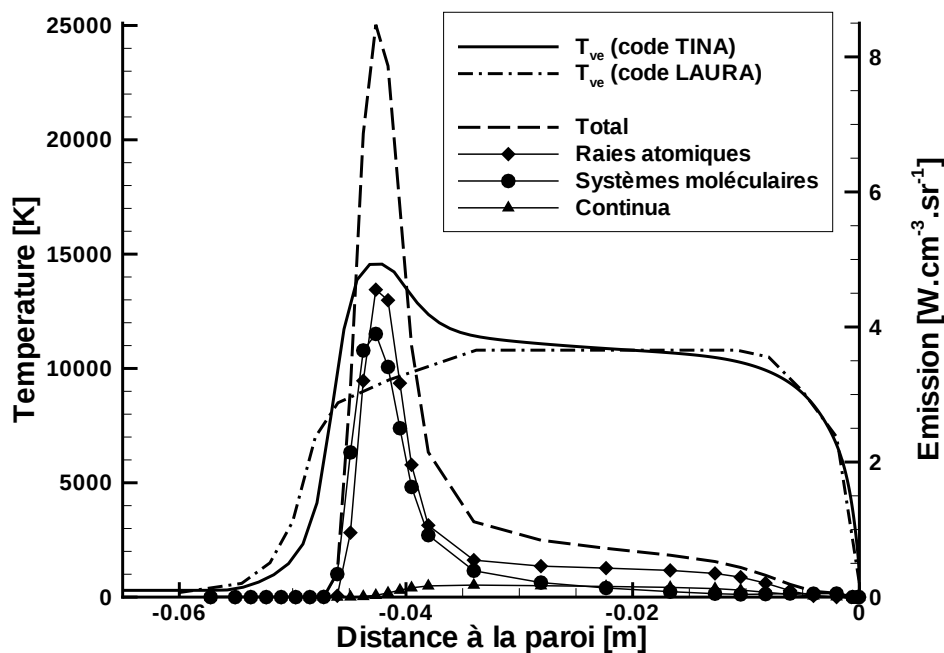


FIG. II.8: Profils de température T_{ve} obtenus resp. avec les codes TINA [118] et LAURA [7]. Profils d'émission calculés à partir des champs aérothermochimiques donnés par le code TINA le long de la ligne d'arrêt - Temps de vol 1634 s.

II.3.4.2 Analyses complémentaires

Processus radiatifs prédominants Les figures II.9 à II.12 montrent les luminances ainsi que leurs cumuls sur l'intervalle $1000\text{-}150000\text{ cm}^{-1}$. Ce cumul est également représenté dans le cas où la contribution des raies atomiques ou des continua n'est pas prise en compte. En parallèle de ces figures, le tableau II.3 indique les luminances intégrées sur $1000\text{-}150000\text{ cm}^{-1}$ pour différents cas de figures (continua, sans raies atomiques...). On note que la tendance générale d'une augmentation de la luminance au point d'arrêt jusqu'au point de trajectoire 1642.66 s puis une diminution, observée pour les intervalles spectraux de mesure $16666\text{-}33333\text{ cm}^{-1}$ et $2500\text{-}50000\text{ cm}^{-1}$, est également remarquée sur toute la gamme spectrale.

Pour le point de vol 1634 s, les résultats montrent que la partie VUV du spectre représente environ 90% de la luminance à la paroi. On relève la prédominance dans cet intervalle des systèmes du N_2 (VUV) essentiellement, mais aussi des raies atomiques et de la recombinaison radiative atomique (N^+) et moléculaire (N_2^+ , O_2^+ et NO^+) au-delà de 110000 cm^{-1} . Dans les autres parties du spectre, les raies dans l'IR et les systèmes $N_2^+(1-)$, $N_2(1+, 2+)$ sont les seuls contributeurs de la luminance à la paroi. De manière plus globale, les résultats du tableau II.3 montrent que le rayonnement provient essentiellement des transitions moléculaires lié-lié puisque la luminance sans les raies atomiques ou sans les continua représente respectivement encore environ 90% de la luminance totale. Cette prédominance du rayonnement moléculaire (en particulier celui de N_2 (VUV)) vient du fait que N_2 est relativement peu dissocié dans la couche de choc comme le montre la figure II.4(b).

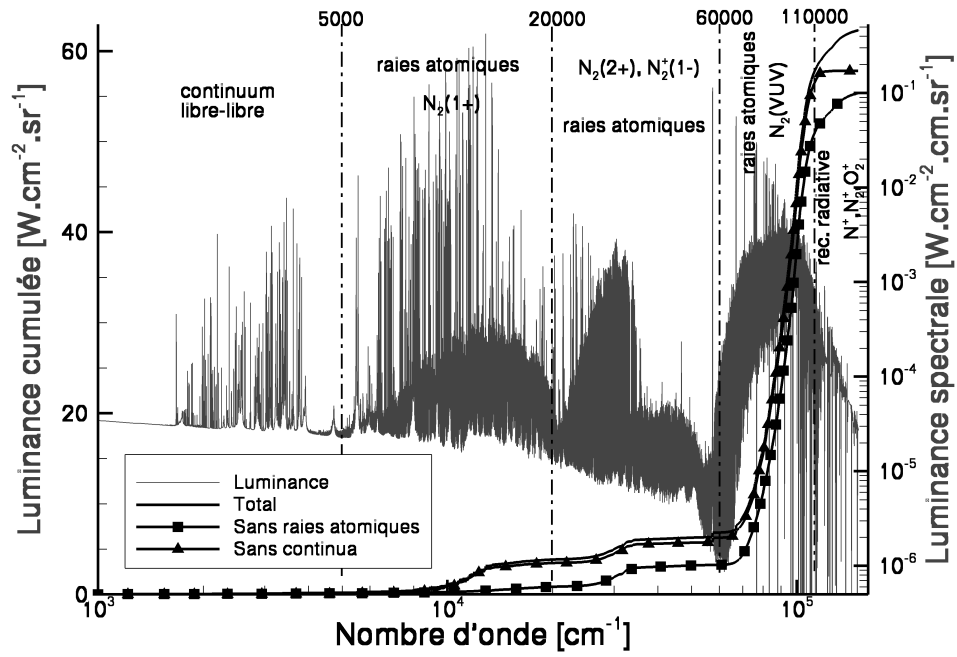


FIG. II.9: Luminance spectrale et cumulée à la paroi - Temps de vol 1634 s.

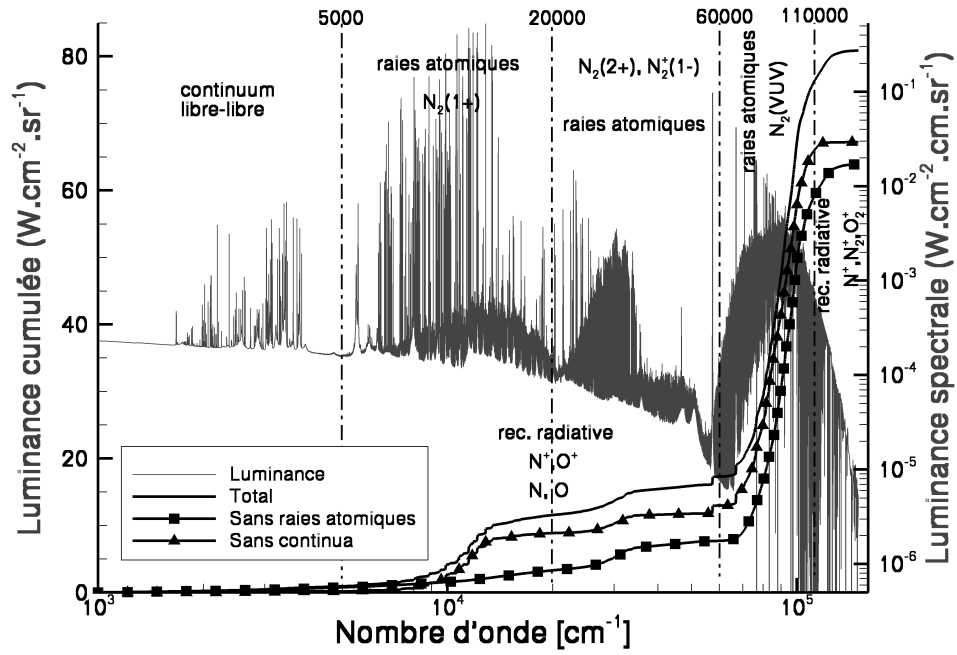


FIG. II.10: Luminance spectrale et cumulée à la paroi - Temps de vol 1637.5 s.

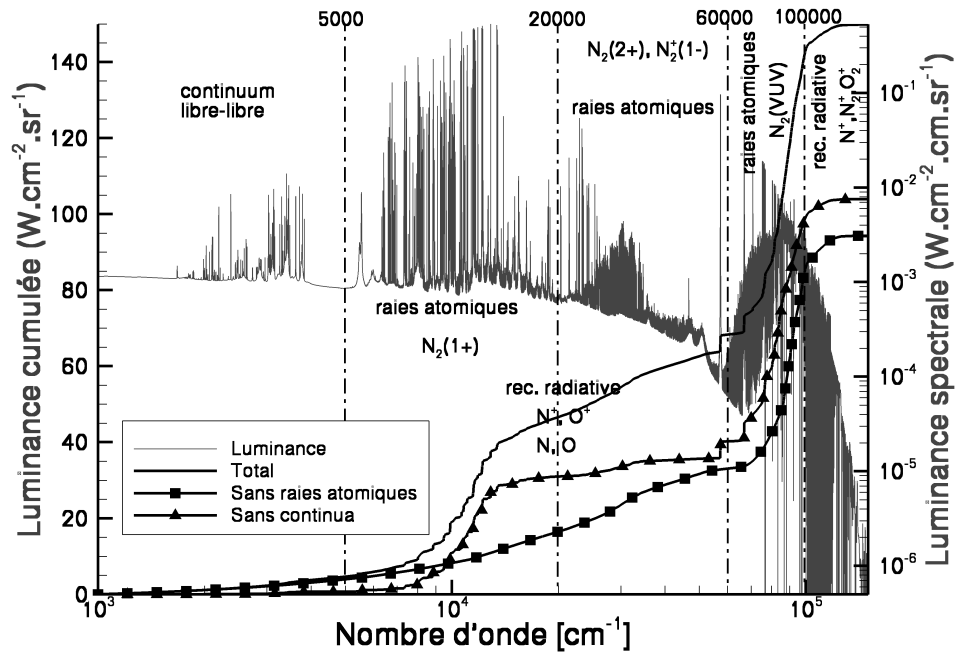


FIG. II.11: Luminance spectrale et cumulée à la paroi - Temps de vol 1642.66 s.

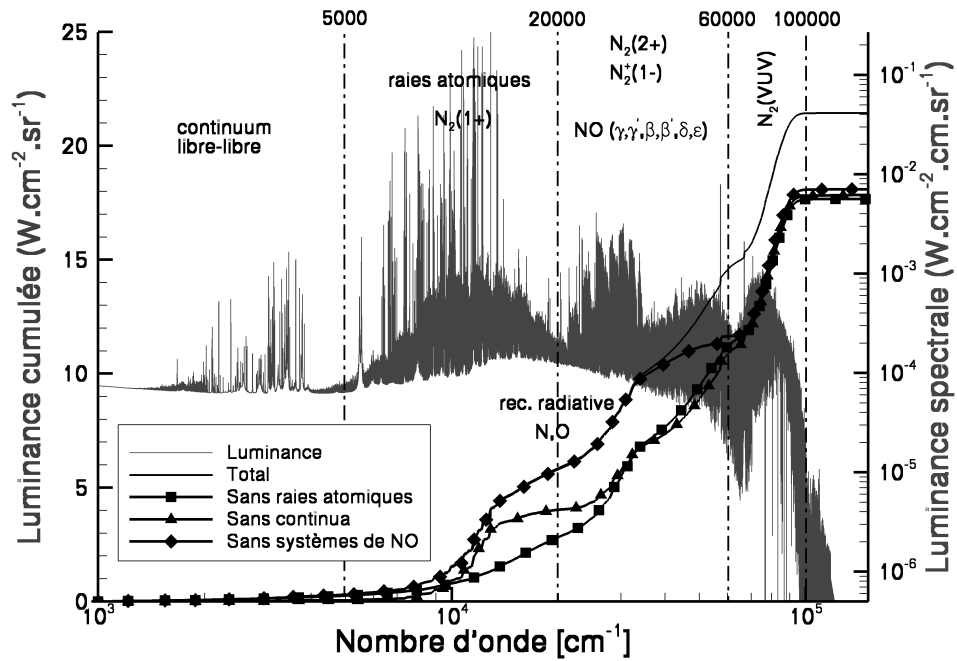


FIG. II.12: Luminance spectrale et cumulée à la paroi - Temps de vol 1648 s.

Pour le point de vol 1637.5 s (figure II.10), les résultats sont assez similaires au cas précédent. La partie VUV contribue encore à 80% à la luminance totale mais la contribution des continua et des atomes est en augmentation. Pour les continua, ceci provient essentiellement de la recombinaison radiative de N^+ , O^+ et du processus inverse de photodétachement de N^- et O^- situées dans l'intervalle 10000-50000 cm^{-1} . Ceci peu paraître surprenant de prime à bord puisque le taux d'ionisation diminue au cours de la trajectoire (22.2 % à 1634 s et 14.6 % à 1637.5 s). Cependant en valeur absolue, la densité électronique augmente de plus d'un facteur deux entre les deux points de vol (effet indirect de l'augmentation de la densité totale). L'augmentation du rayonnement atomique (lié-lié ou continuum) provient également du fait qu'on est un peu plus dissocié dans la couche de choc. La comparaison de la contribution des continua atomiques seuls et des continua moléculaires indiquées dans le tableau II.3 montre clairement cet effet. Par conséquent, de manière globale, la luminance à la paroi sans raies atomiques et sans continua représente respectivement 78 % et 83 % au lieu des 90 % dans le cas précédent.

Comme le montre la figure II.11, la contribution des continua et des raies atomiques continuent à augmenter dans le cas 1642.66 s pour les mêmes raisons que celles évoquées dans la paragraphe précédent. La luminance au point d'arrêt sans raies atomiques et sans continua représente désormais respectivement 63 % et 69 %. Le rayonnement moléculaire de N_2 (VUV) étant moins prédominant par rapport aux continua de recombinaison radiative dans l'intervalle 10000-50000 cm^{-1} , la partie VUV du spectre malgré la présence des raies atomiques dans cette gamme, ne contribue plus qu'à 58 % de la luminance totale.

Pour le dernier point de trajectoire, à la différence des autres points où leur contribution est négligeable, les systèmes moléculaires de NO dans l'UV contribuent de manière significative à la luminance totale dans l'intervalle 30000-60000 cm^{-1} . Ceci se voit clairement sur la figure II.12 en comparant les courbes cumulées « total » et « sans systèmes de NO ». Ceci est dû à un effet de densité puisque pour ce point de rentrée la densité de NO est égale à 3.10^{21} m^{-3} sur le plateau alors qu'elle est largement inférieure à 10^{20} m^{-3} pour les autres points de rentrée. Leur contribution représente alors 15 % de la luminance totale. Au niveau de l'ionisation, elle est très faible (0.23 % pour le taux d'ionisation contre 7.3 % pour le cas 1642.66 s) alors qu'il n'y a qu'un facteur de l'ordre de 2 au niveau de la densité totale entre les points 1642.66 s et 1648 s. La contribution des continua et en particulier de la recombinaison radiative de N^+ et de O^+ est alors moins importante que dans les cas 1637.5 s et 1642.66 s. Par ailleurs la partie VUV du spectre ne représente plus que 40 % de la luminance totale à la paroi. Ceci peut s'expliquer par le fait que le point 1648 s est un point moins chaud (8000 K sur le plateau contre 11000-12000 K pour les autres temps de vol) donc moins émetteur dans la partie VUV et à plus haute pression (2 bar dans la couche de choc) donc plus optiquement épais.

Effet de l'absorption Des calculs sans tenir compte de l'absorption ont également été réalisés. Le tableau II.3 regroupe les résultats obtenus pour les quatre points de trajectoire et les trois intervalles spectraux étudiés. La comparaison avec les calculs réalisés avec absorption montre que l'absorption est négligeable dans l'intervalle 16666-33333 cm^{-1} et qu'il commence à être significatif dans l'intervalle 2500-50000 cm^{-1} voire prédominant dans l'intervalle 1000-150000 cm^{-1} . Pour déterminer quels processus radiatifs contribuent à cette absorption, les luminances spectrales avec ou sans absorption ont été calculées. La figure II.13 illustre ces résultats pour le point de trajectoire 1642.66 s. Les principaux phénomènes

d'absorption y sont indiqués. Il s'agit de l'absorption des raies atomiques dans l'IR et dans le VUV (ces dernières étant très fortement auto-absorbées), des systèmes du N_2 (VUV) et de la photoionisation atomique et moléculaire également dans le VUV. Les figures II.14 montrent à ce titre les luminances à la paroi des systèmes de N_2 (VUV) uniquement en considérant ou non l'absorption de ces systèmes pour le point de trajectoire 1642.66 s. On remarque sur la figure de gauche que les systèmes de N_2 (Carroll-Yoshino, Worley et Worley-Jenkins) sont optiquement très épais. L'ensemble de ces résultats sont représentatifs de tous les points de trajectoire pour expliquer la différence observée entre les calculs avec et sans absorption.

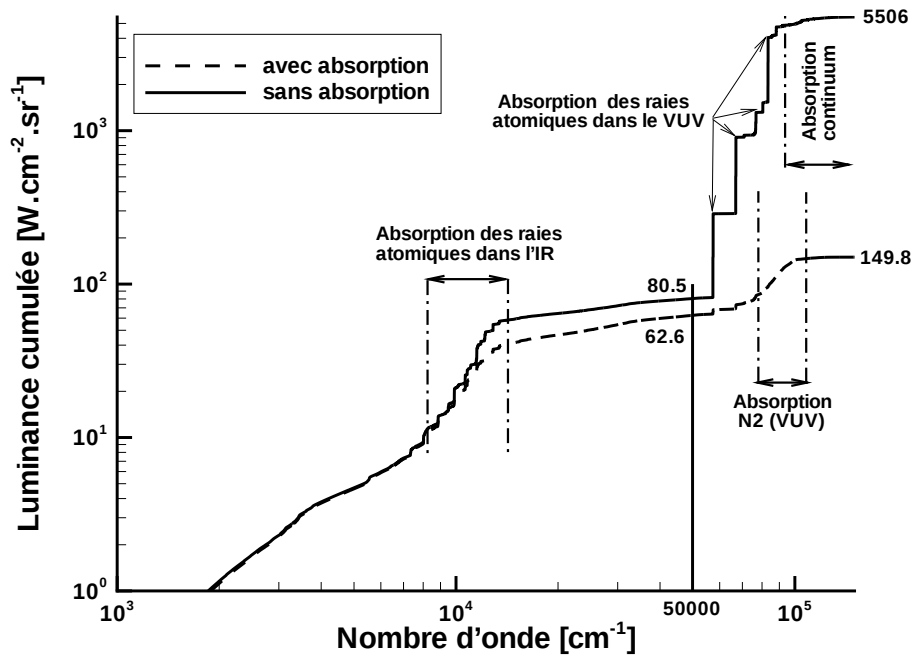


FIG. II.13: Effet de l'absorption sur la luminance cumulée au point d'arrêt - Temps de vol 1642.66 s.

Effet du déséquilibre thermochimique pour les continua Les processus de photoionisation et de photodissociation sont susceptibles d'être influencés par le déséquilibre thermochimique. En effet, dans la mesure où les réactifs et les produits d'une réaction ne sont pas à l'équilibre, l'émission ou l'absorption peut être plus ou moins intense qu'à l'équilibre. Cet effet est représenté par le facteur de déséquilibre χ^{neq} introduit dans la section II.2.2.1. De manière générale, ce facteur désigne le rapport :

$$\chi^{neq} = \frac{n^{eq}}{n^{réel}}, \quad (\text{II.69})$$

où n^{eq} est la densité fictive de particules absorbantes en équilibre thermochimique avec les produits de la réaction et $n^{réel}$ la densité réelle de particules absorbantes.

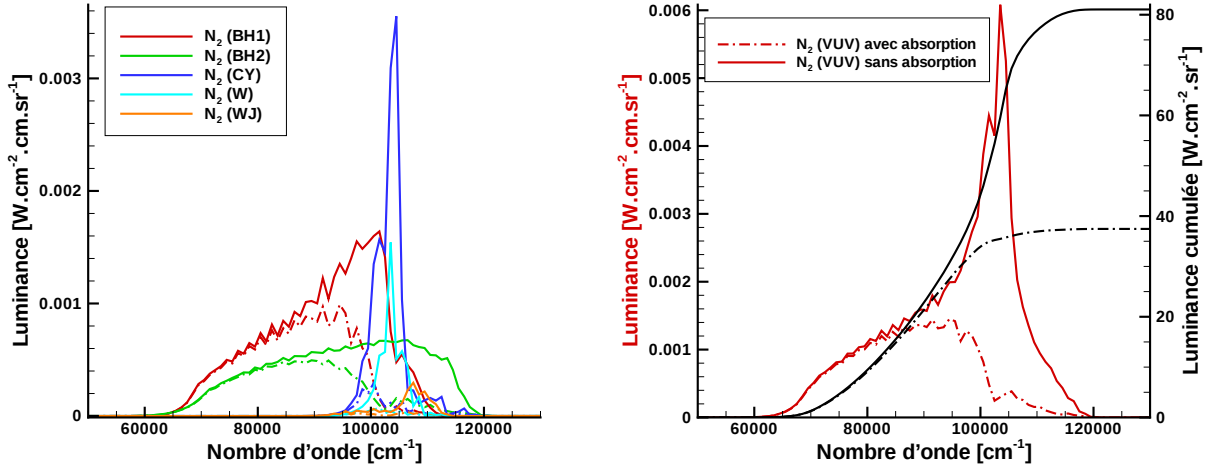


FIG. II.14: Effet de l'absorption sur la luminance spectrale (tracée à basse résolution) et la luminance cumulée au point d'arrêt des systèmes de N_2 (VUV) pour le point de trajectoire 1642.66 s. À gauche, l'effet est représenté pour chaque système (trait solide : sans absorption ; trait en pointillé : avec absorption). À droite, l'effet est représenté pour l'ensemble des systèmes.

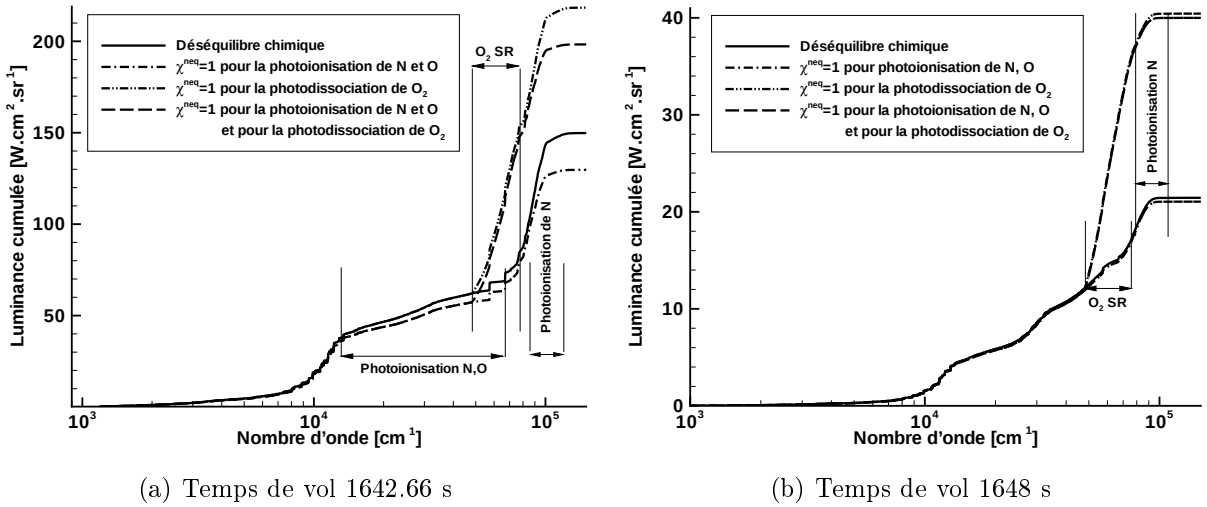


FIG. II.15: Effets du déséquilibre chimique sur la luminance cumulée au point d'arrêt pour les réactions de photoionisation atomique et de photodissociation de O_2 .

Pour étudier l'effet du déséquilibre sur les continua et en particulier sur la photoionisation atomique et la photodissociation de O_2 , les luminances à la paroi ont été calculées en ne tenant pas compte du déséquilibre *i.e.* en imposant suivant les réactions $\chi^{neq} = 1$ dans les expressions II.44 et II.45 ou II.57 et II.58 (l'effet est sur les phénomènes d'émission).

Sur les figures II.15, nous avons représenté les luminances cumulées issues de ces calculs ($\chi^{neq} = 1$) ainsi que les luminances cumulées calculées en tenant compte du déséquilibre et ceci pour deux points de trajectoire. Pour le point de trajectoire 1642.66 s (figure II.15(a)),

l'effet sur la photoionisation atomique revient à abaisser la luminance totale de 15 % au point d'arrêt. Compte tenu de la relation II.69 et des équations II.44 à II.46, ceci indique que l'ionisation de N et de O est plus forte que celle déterminée en supposant l'équilibre calculée à partir de la densité réelle d'atome. On est en avance sur l'ionisation ce qui provoque une augmentation de la luminance lorsque l'on tient compte de ce déséquilibre. L'effet est visible dans le VUV et également, mais dans une moindre mesure, dans l'intervalle 15000-70000 cm^{-1} . Pour la photodissociation, l'effet est contraire, ce qui indique qu'on est en retard sur la dissociation de O_2 . Le déséquilibre a pour effet de diminuer la luminance de plus de 30 %.

Pour le point de vol 1648 s (figure II.15(b)), l'effet sur la photoionisation atomique est faible, ce qui s'explique en parti par le fait que la photoionisation (ou recombinaison radiative en émission) contribue peu pour ce point de trajectoire (cf. le paragraphe précédent sur les processus prédominants). Par contre pour la photodissociation de O_2 l'effet est encore très important avec une augmentation de la luminance de près de 50 %. À souligner que la photodissociation calculée avec le déséquilibre ne contribue pas à la luminance totale et ce quelque soit le point de trajectoire considéré.

Les deux effets du déséquilibre, l'un sur la photoionisation atomique et l'autre sur la photodissociation de O_2 , sont antagonistes dans la mesure où l'un a pour effet d'augmenter la luminance et l'autre de la diminuer.

Évolution de la luminance le long de la ligne d'arrêt Les figures II.16 à II.19 montrent l'évolution de la luminance intégrée sur tout le spectre le long de la ligne d'arrêt pour différents types de contributions et pour les quatre points de trajectoire. L'essentiel de la luminance incidente provient de la zone où, par comparaison aux figures II.4, la température électro-vibrationnelle T_{ve} est la plus élevée, *i.e.* juste derrière le choc. En effet, passée ce choc, la densité des particules augmente fortement, et les molécules commencent à se dissocier. Par conséquent, le rayonnement lié-lié atomique et moléculaire est important voire prédominant dans cette zone.

La contribution des raies atomiques est observable dans la zone hors d'équilibre mais aussi le long de la ligne d'arrêt. Suivant le point de vol, soit l'écart entre la luminance totale et la luminance sans tenir compte des raies atomiques se réduit au fur et à mesure que l'on s'approche de la paroi (cas 1634 s) ce qui prouve dans ce cas que les raies atomiques absorbent plus qu'elles n'émettent sur le plateau, soit l'écart augmente ce qui indique que la situation est inversée, les raies atomiques émettent plus qu'elles n'absorbent (cas 1642.66 s), soit l'écart n'évolue presque pas ce qui représente une situation intermédiaire, les raies absorbent autant qu'elles émettent (cas 1637.5 s et 1648 s).

Au niveau des continua, la contribution de la recombinaison radiative moléculaire se situe également au niveau de la zone de déséquilibre où la dissociation n'est pas encore très forte. À noter que de manière générale les continua moléculaires jouent un rôle mineur en terme de luminance tout au long de la ligne d'arrêt. Par contre, les continua atomiques peuvent contribuer jusqu'à 30 % de la luminance totale au point d'arrêt pour le cas 1642.66 s par exemple et on note que leur contribution augmente tout au long de la ligne d'arrêt.

La représentation de la luminance sans tenir compte de l'absorption montre clairement que le plateau n'est pas optiquement mince et ce pour chacun des points de trajectoire. Pour le cas 1634 s, l'absorption sur le plateau provoque même une diminution de la luminance

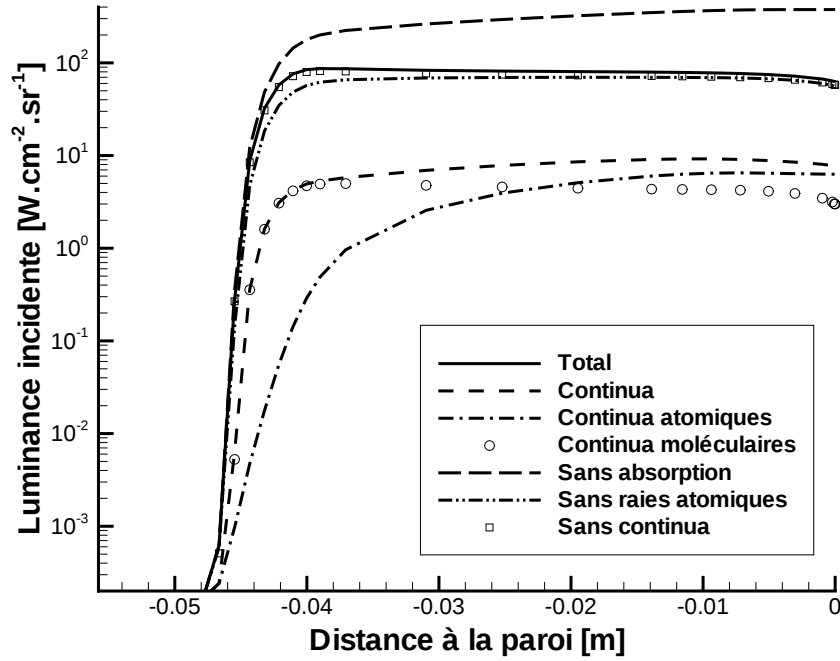


FIG. II.16: Évolution de la luminance radiative incidente intégrée sur tout le spectre le long de la ligne d'arrêt pour le point de trajectoire 1634 s.

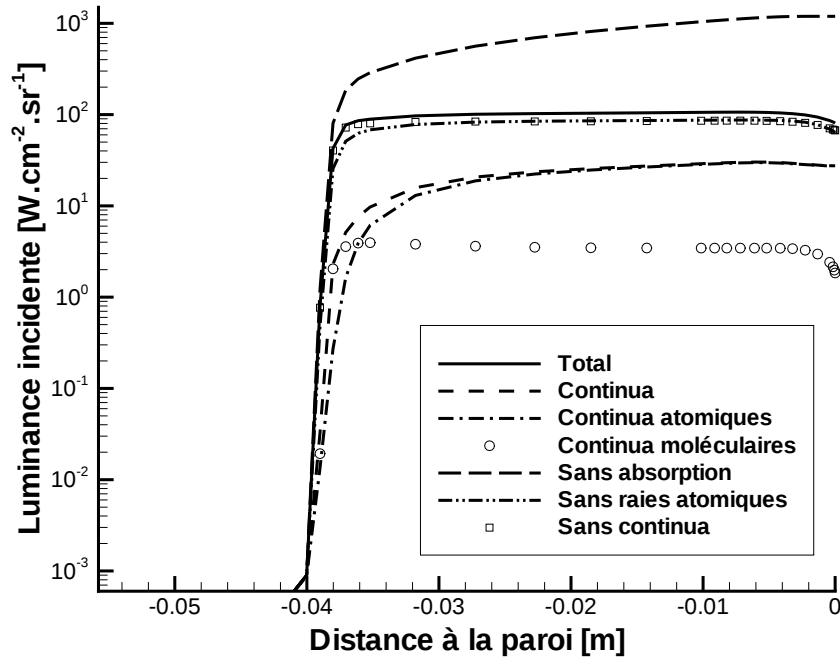


FIG. II.17: Évolution de la luminance radiative incidente intégrée sur tout le spectre le long de la ligne d'arrêt pour le point de trajectoire 1637.5 s.

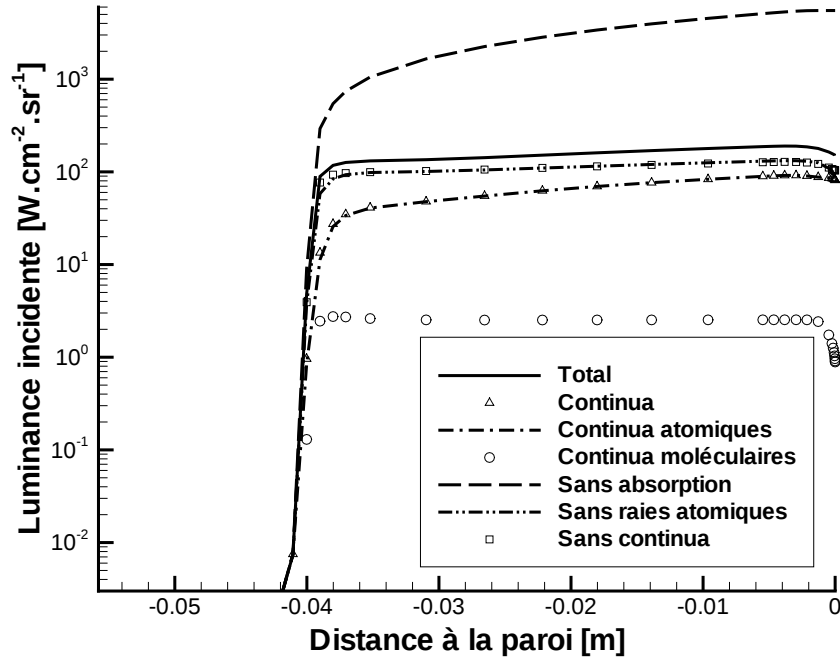


FIG. II.18: Évolution de la luminance radiative incidente intégrée sur tout le spectre le long de la ligne d'arrêt pour le point de trajectoire 1642.66 s.

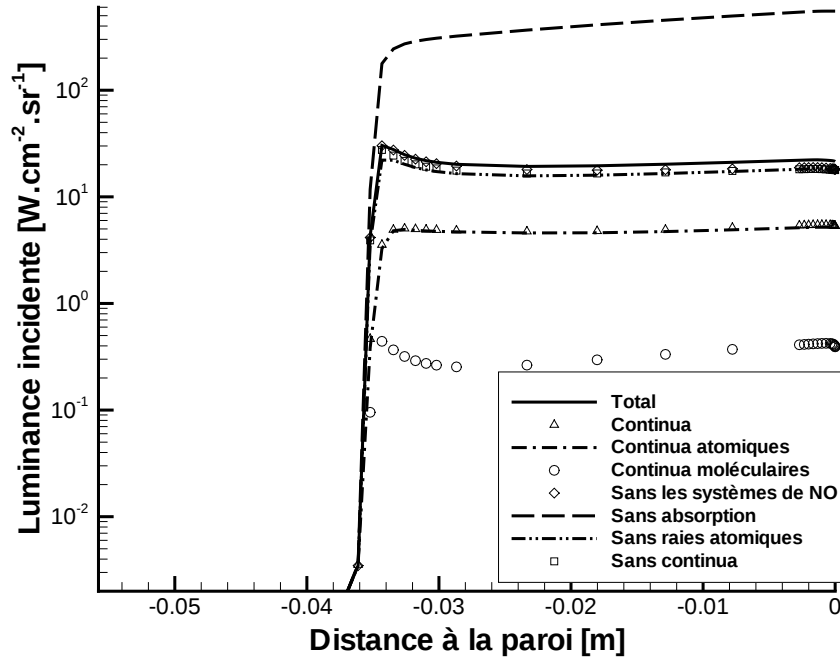


FIG. II.19: Évolution de la luminance radiative incidente intégrée sur tout le spectre le long de la ligne d'arrêt pour le point de trajectoire 1648 s.

incidente. Par ailleurs, on observe une absorption importante dans la couche limite où la température tend vers la température de paroi. La paroi étant considérée comme catalytique *i.e.* favorisant la recombinaison à la paroi, l'absorption est en particulier lié aux transitions moléculaires optiquement épaisses comme les transitions du N_2 (VUV).

Pour le cas particulier du point 1648 s, la figure II.19 montre que la contribution des systèmes de NO également visible sur la figure II.12 apparaît progressivement sur le plateau lorsque la densité de NO augmente (cf. fig. II.4(h)).

II.4 Conclusion

L'expression des propriétés radiatives de plasmas de N_2-O_2 à l'ETL a été étendue pour des milieux en déséquilibre chimique et thermique pour lesquels la loi de Kirchhoff n'est pas valable. Cette formulation s'appuie sur la base de données spectroscopiques HTGR [101] développée au laboratoire EM2C. Pour répondre aux enjeux exposés dans la section I.5, l'extension au milieu hors ETL a été réalisée dans le cadre d'une approche hybride pour modéliser le déséquilibre thermique *i.e.* une approche niveau par niveau pour la population des niveaux électroniques et une approche multi-température pour les niveaux rovibrationnels des particules lourdes. Pour la translation des espèces lourdes et la translation des électrons libres, on considère qu'elles sont caractérisées par deux températures d'équilibre distinctes ce qui correspond à notre cadre d'étude défini dans le chapitre I.

Pour les continua, ne disposant principalement que de sections efficaces en absorption, les expressions données s'appuient sur une relation reliant les sections efficaces en absorption, en émission induite et en émission spontanée (relation similaire à celle de Milne-Einstein) niveau par niveau. Son utilisation fait apparaître dans les expressions des coefficients d'émission (spontanée et induite) un facteur représentatif du déséquilibre thermochimique entre les espèces mises en jeu dans la transition radiative. En fonction des données disponibles dans la littérature sur les sections efficaces, les propriétés radiatives sont données par niveau électronique (par niveau du bas des transitions pour la photoionisation atomique par exemple) ou en considérant une distribution de Boltzmann.

Par la suite, nous avons mis en œuvre, lors d'un workshop organisé par l'ESA, l'ensemble des formulations des propriétés radiatives exposées dans ce chapitre pour déterminer des luminances au point d'arrêt d'un engin rentrant dans l'atmosphère terrestre. Le cas test a consisté à comparer les résultats prédits numériquement avec les données radiatives mesurées pour quatre points de trajectoire du vol FIRE II qui est représentatif d'un retour lunaire pour lequel des situations de fort déséquilibre puis de proche équilibre sont rencontrées dans la couche de choc en amont de l'engin. Les champs aérothermochimiques fournis par l'ESA ont été obtenus avec le code CFD TINA modélisant le déséquilibre avec une approche à deux températures. Le calcul des propriétés radiatives a été réalisé à partir de ces champs puis le calcul de transfert a été réalisé en 1D sur la ligne d'arrêt avec l'approche raie par raie sur toute la gamme spectrale. La comparaison expérience/calcul sur les gammes spectrales accessibles expérimentalement ($16666-33333\text{ cm}^{-1}$ et $2500-50000\text{ cm}^{-1}$) montrent un bon accord qualitatif. D'un point de vue quantitatif, pour le premier point de trajectoire fortement hors d'équilibre, les calculs surestiment de plus d'un facteur 5 les données en vol. Ceci s'explique en partie par le fait que la température servant à caractériser le peuplement des niveaux rovibroniques, est assez élevée dans la zone de relaxation, où a lieu l'essentiel

de l'émission de la couche de choc. Une température plus basse diminuerait le niveau de luminance à la paroi, mais c'est sans garantie de retrouver les valeurs expérimentales dans la mesure où l'approche Boltzmannienne dans les zones fortement hors d'équilibre n'est pas justifiée. Pour les trois autres points de trajectoire plus proche de l'équilibre, les résultats sont quasiment dans les barres d'erreur expérimentales hormis pour le dernier point, où le degré de confiance des mesures est faible.

D'un point de vue plus global, *i.e.* à partir des résultats sur toute la gamme spectrale, on a observé que la contribution des processus dans le VUV représente de 40 % à 90 % de la luminance à la paroi suivant le point de trajectoire. Les systèmes de N_2 et les raies atomiques ont été identifiés comme étant contributeur majoritaire dans cette gamme spectrale avec dans une moindre mesure la recombinaison radiative des ions. Dans les autres intervalles, les raies atomiques dans l'IR, les systèmes $N_2(1+)$, $N_2(2+)$ et $N_2^+(1-)$, la recombinaison radiative et les systèmes de NO (UV) dans les cas haute pression sont les autres transitions jouant un rôle en transfert. De manière générale, les contributions peuvent être réparties approximativement en trois selon : 1/3 raies atomiques, 1/3 systèmes électroniques moléculaires et 1/3 continua. Du point de vue de l'absorption, différents calculs montrent que les contributions optiquement épaisses sont essentiellement les raies atomiques et les systèmes N_2 (VUV). L'effet du déséquilibre a également été étudié. Il est montré qu'il joue un rôle significatif pour la photoionisation atomique et la photodissociation de O_2 avec des variations de luminance totale pouvant atteindre 50 %.

Le degré de confiance de l'ensemble de ces résultats est cependant limité par la validité des champs aérothermochimiques, obtenus avec une modélisation du déséquilibre relativement simple. Cependant ces résultats permettent d'obtenir une première comparaison à des données expérimentales, des tendances (contributions majeures, intervalles spectrales importants) et des effets de sensibilité sur différents phénomènes (absorption, déséquilibre...) et constituent une étape indispensable en amont de l'élaboration d'un modèle dégradé de rayonnement, et de l'établissement d'une stratégie de couplage afin d'étudier l'interaction rayonnement/hydrodynamique.

Chapitre III

Modèle de propriétés radiatives pour les plasmas d'air hors d'équilibre

Table des matières

III.1 Introduction	79
III.2 Modèles approchés classiques de propriétés radiatives	80
III.2.1 Modèles globaux	81
III.2.2 Modèles de bandes	84
III.2.3 Discussion	90
III.3 Formulation de l'équation de transfert radiatif avec un MSBE dans les milieux hors ETL	91
III.3.1 Épaisseurs optiques des systèmes	92
III.3.2 Corrélations spectrales	94
III.3.3 Formulation de l'ETR	102
III.4 Formulation et construction d'un MSBE	103
III.4.1 Formulation d'un MSBE en milieu uniforme	104
III.4.1.1 Profil de raie Lorentz	108
III.4.1.2 Profil de raie Doppler	111
III.4.1.3 Profil de raie Voigt	115
III.4.1.4 Comportement asymptotique extrême	116
III.4.2 Formulation du MSBE en milieu non uniforme	118
III.4.2.1 Approximation de Curtis-Godson classique	120
III.4.2.2 Approximation de Curtis-Godson alternative	121
III.4.2.3 Choix de l'approximation de Curtis-Godson pour la mise en œuvre du MSBE	122
III.4.3 Construction du MSBE	123
III.4.3.1 Paramétrisation du modèle	124
III.4.3.2 Systèmes moléculaires	128
Systèmes moléculaires optiquement minces	128
Systèmes moléculaires optiquement épais	130
III.4.3.3 Continua	134
Transitions libre-libre	134
Transitions lié-libre	135

III.4.3.4 Atomes	137
III.5 Validations et limites du MSBE	140
III.5.1 Milieux uniformes	141
III.5.1.1 Validations système par système	141
III.5.1.2 Validations pour un mélange	148
III.5.2 Milieux non uniformes	150
III.5.2.1 Configuration à deux colonnes	150
III.5.2.2 Configuration à trois colonnes	152
III.6 Application et validation sur un cas de rentrée atmosphérique 154	154
III.6.1 Équation de transfert radiatif discrétisée et adaptée à la modélisation hybride	155
III.6.2 Effet de l'épaisseur optique des cellules émettrices	157
III.6.3 Comparaison modèle hybride et approche raie par raie	159
III.6.4 Temps de calcul	163
III.7 Conclusion	164

III.1 Introduction

La résolution de l'équation de transfert radiatif (ETR) dans les gaz nécessite au préalable de discrétiser spatialement le milieu en éléments pouvant être considérés comme homogènes et isothermes. Un modèle de rayonnement est ensuite utilisé pour évaluer les propriétés radiatives sur le domaine discrétisé avant de résoudre l'ETR. L'approche raie par raie avec une discrétisation spectrale suffisante (assurant que le profil de chaque raie spectrale est représenté par plusieurs points) est le modèle le plus précis pour déterminer ces propriétés dans la mesure où les grandeurs obtenues sont monochromatiques. Ces calculs à haute résolution donnent des solutions de référence mais ont l'inconvénient d'être très coûteux en temps de calcul et en place mémoire. En effet, les propriétés radiatives doivent être évaluées sur tout le spectre c'est-à-dire sur une grille spectrale de plusieurs millions de points pour chaque élément spatial du domaine. Pour pallier ce problème et étant donné que l'on s'intéresse généralement à des grandeurs intégrées spectralement (puissance et flux radiatifs) dans les problèmes de rayonnement, des modèles approchés de propriétés radiatives moyennes par zone spectrale peuvent être utilisés. L'objectif de ce chapitre est de décrire les travaux réalisés sur la construction d'un modèle approché utilisé afin de résoudre de manière optimale et précise l'ETR dans des plasmas d'air hors d'équilibre pour des applications de rentrées atmosphériques.

Il existe deux types de modèles approchés : les modèles à bandes spectrales (de quelques dizaines à quelques milliers de cm^{-1}) et les modèles globaux, intégrés sur tout le spectre. Ces différents modèles peuvent être également classifiés suivant la formulation de l'ETR à utiliser : formulation en transmittivité ou en coefficient d'absorption. Une description générale des principaux modèles existant dans la littérature ainsi que la formulation de l'ETR associée à chaque modèle fait l'objet de la première partie de ce chapitre. À noter que ces formulations correspondent à des milieux supposés semi-transparentes et non diffusant (cas des plasmas de rentrée où l'on ne tient pas compte des produits d'ablation dans la couche limite pouvant diffuser le rayonnement) et qu'elles ont été développées avec l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local (ETL).

De l'étude bibliographique sur les modèles approchés, le modèle statistique à bandes étroites (MSBE) apparaît le plus adapté pour traiter des milieux réactifs multi-espèces absorbants et a été retenu pour traiter les milieux hors d'équilibre chimique et thermique rencontrés dans notre étude. La construction du modèle a nécessité au préalable une formulation adaptée de l'ETR pour tenir compte des corrélations spectrales existant entre les processus radiatifs dans ces cas hors d'équilibre ainsi que du caractère optiquement épais ou mince des systèmes rayonnants. Ces travaux font l'objet de la deuxième partie du chapitre. La troisième partie est consacrée à la construction proprement dite du modèle. Le cas du milieu homogène est d'abord considéré puis celui du milieu hétérogène. On présente aussi

dans cette partie le choix de la paramétrisation lié entre autre à ses différentes utilisations envisagées suivant le modèle de peuplement des états rovibroniques. Enfin la procédure de calcul ainsi que la nature des paramètres du modèle sont indiquées suivant le type de contribution. La section III.5 porte sur la validation et les limites d'utilisation du MSBE en milieu uniforme et non uniforme. De manière plus générale, la modélisation des propriétés radiatives et la formulation de l'ETR sont mises en œuvre dans la dernière section sur un cas de rentrée atmosphérique terrestre (l'expérience FIRE II). Les résultats obtenus sont comparés à ceux obtenus à partir d'une approche raie par raie.

III.2 Modèles approchés classiques de propriétés radiatives

Les premiers modèles approchés de propriétés radiatives sont apparus dans les années 20 pour des applications en combustion dans lesquelles les échanges de chaleur par rayonnement devenaient non négligeables. L'enjeu était alors d'estimer les effets du rayonnement des produits de combustion $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$. Les premiers modèles, issus des travaux respectifs de Schack [120] et de Hottel [121] dans les années 20, étaient formulés en émissivité, obtenue via un réarrangement par bande des spectres d'absorption. D'autres modèles approchés plus élaborés, issus cette fois de la physique de l'atmosphère, ont été développés à partir des années 40 pour répondre à des questions de rayonnement atmosphérique. À ce titre on peut citer entre autres les travaux d'Elsasser [122], Mayer [123] et Goody [124]. L'objectif de cette partie n'est pas d'exposer de manière exhaustive l'ensemble des modèles approchés existant à ce jour mais de présenter les plus utilisés et les plus répandus parmi les deux grandes classes de modèles, les modèles globaux très utilisés dans l'industrie et les modèles de bandes plus précis mais plus lourds à mettre en œuvre. Dans cette partie, nous décrivons brièvement le modèle WSGG (Weighted Sum of Gray Gases) développé par Hottel et Sarofim [125], qui est la base de la famille des modèles globaux, ainsi que les modèles plus récents du même type, SLW (Spectral Line-based Weighted sum of gray gases) développé par Denison et Webb [126], ADF (Absorption Distribution Function) développé par Rivière *et al.* [127] au laboratoire EM2C, et son extension le modèle MADF (Mixture Absorption Distribution Function). Concernant les modèles de bandes, nous nous sommes intéressés au modèle CK (correlated-K) introduit par Goody et Yung [128], au modèle CKFG (correlated-K Fictitious Gases) une extension du modèle CK développé par Levi Di Leon *et al.* [129], et le modèle SNB (Statistical Narrow band) introduit par Mayer et Goody [128] appelé dans ce manuscrit modèle statistique à bandes étroites (MSBE). Une description plus exhaustive des modèles peut être trouvée dans les travaux de thèse de Pierrot [130].

La formulation des modèles énoncés ci-dessus, est faite initialement dans le cas simple de milieux homogènes isothermes avec une seule contribution à l'absorption¹. À l'aide d'approximations supplémentaires, des extensions sont généralement introduites pour traiter des milieux anisothermes hétérogènes avec plusieurs espèces ou systèmes absorbants. Les écarts observés lors de comparaisons entre les modèles approchés et des calculs raie par raie

¹On désigne en général par contribution à l'absorption un système électronique d'une molécule donnée ou l'ensemble des raies d'un atome donné. Dans le cas particulier où les transitions radiatives concernent le même état électronique (cas des transitions IR de CO_2 ou de H_2O par exemple) la notion de contribution à l'absorption est représentée par une espèce.

(cf. à titre d'exemple les travaux synthétisés dans [131]) sont à imputer en partie aux hypothèses de corrélations spectrales faites entre les phénomènes d'émission, d'absorption et de transmission lorsqu'ils sont traités globalement ou par bande spectrale. Ces corrélations, liées à la dynamique spectrale des coefficients d'absorption et d'émission, traduisent par exemple le fait que l'absorption a lieu en des positions spectrales précises où le gaz émet et, corrélativement n'a pas lieu là où le gaz n'émet pas. Pour résoudre l'ETR avec un modèle approché, des hypothèses plus ou moins justifiées sont faites sur ces corrélations qui sont en particulier mises à mal dans les milieux anisothermes hétérogènes. Pour chaque modèle décrit par la suite, les hypothèses de corrélations spectrales utilisées sont exposées ainsi que la formulation de l'ETR associée. Il faut souligner que les modèles exposés dans cette partie sont formulés pour des applications à l'ETL.

III.2.1 Modèles globaux

Les modèles globaux traitent l'ensemble du spectre. Ils sont basés sur le fait que l'information spectrale sur les positions des raies n'est pas importante si on s'intéresse à des grandeurs intégrées. De manière générale, ils reposent sur une fonction de distribution cumulée du coefficient d'absorption κ_σ , qui est pondérée, sur tout le spectre, par la luminance à l'équilibre $L_\sigma^\circ(T)$ - cette pondération est nécessaire pour tenir compte des corrélations entre spectres d'absorption et fonction de Planck. Ce concept de fonction de distribution cumulée a été introduit en premier lieu par Hottel et Sarofim [125] et mis en œuvre initialement dans leur modèle WSGG pour des milieux isothermes et homogènes. Des extensions appropriées de ce modèle à des milieux non uniformes ont été récemment formulées par Denison et Webb [126] et Rivière *et al.* [127] avec les modèles SLW, ADF et MADF.

Modèle WSGG

On présente dans un premier temps ce modèle dans le cas où il n'y a qu'une seule contribution à l'absorption correspondant à l'espèce s . La fonction de distribution cumulée s'écrit sous la forme suivante :

$$\mathcal{F}(k, \mathfrak{C}(T), T_P) = \frac{\pi}{\sigma_b T_P^4} \int_{\sigma/k_\sigma(\mathfrak{C}(T)) \leq k} L_\sigma^\circ(T_P) d\sigma, \quad (\text{III.1})$$

où $k_\sigma(\mathfrak{C}(T))$ est le coefficient d'absorption de la contribution considérée au nombre d'onde σ par unité de pression de l'espèce s (k_σ est appelé coefficient d'absorption réduit) dans la condition thermochimique $\mathfrak{C}(T)$ caractérisée par la pression totale p , la fraction molaire x_s de l'espèce active s et la température T . T_P est la température à laquelle est évaluée la fonction de Planck et k désigne une valeur possible de k_σ . La fonction $\mathcal{F}(k, \mathfrak{C}(T), T_P)$ représente la fraction d'énergie émise par un corps noir à la température T_P dans les zones du spectre où $k_\sigma(\mathfrak{C}(T))$ est inférieur ou égal à k .

L'émissivité totale ϵ d'une colonne de gaz de longueur l homogène et isotherme dans les conditions $\mathfrak{C}(T)$ définie par

$$\epsilon(l, \mathfrak{C}(T)) = \frac{\pi}{\sigma_b T^4} \int_0^\infty [1 - \exp(-x_s p k_\sigma(\mathfrak{C}(T)) l)] L_\sigma^\circ(T) d\sigma, \quad (\text{III.2})$$

s'exprime à l'aide d'une intégration sur le coefficient d'absorption réduit en se servant de la fonction $\mathcal{F}$ comme suit :

$$\epsilon(l, \mathfrak{C}(T)) = \int_{k_{min}}^{k_{max}} [1 - \exp(-x_s p k l)] \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial k}(k, \mathfrak{C}(T), T) dk, \quad (\text{III.3})$$

où k_{min} et k_{max} sont les valeurs minimale et maximale sur tout le spectre du coefficient d'absorption réduit dans les conditions $\mathfrak{C}(T)$. Si on découpe l'intervalle $[k_{min}, k_{max}]$ en n éléments $[\tilde{k}_i, \tilde{k}_{i+1}]$ sur lesquels on assimile le coefficient d'absorption à la valeur moyenne k_i , l'équation précédente peut être approchée par

$$\begin{aligned} \epsilon(l, \mathfrak{C}(T)) &\simeq \sum_{i=1}^n [\mathcal{F}(\tilde{k}_{i+1}, \mathfrak{C}(T), T) - \mathcal{F}(\tilde{k}_i, \mathfrak{C}(T), T)] [1 - \exp(-x_s p k_i l)] \\ &= \sum_{i=1}^n a_i [1 - \exp(-x_s p k_i l)]. \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$

Hottel et Sarofim [125] interprètent à juste titre les poids a_i comme la fraction d'énergie radiative émise par un corps noir à la température de la colonne considérée dans les intervalles spectraux où le coefficient d'absorption est compris entre $[\tilde{k}_i, \tilde{k}_{i+1}]$. Les valeurs des poids a_i et k_i sont les paramètres du modèle WSGG. Ils sont déterminés dans les conditions thermophysiques correspondant à celle de la colonne homogène étudiée par ajustement à des courbes de croissance (cette notion de courbe de croissance est reprise en détails dans la section III.4.1) obtenues expérimentalement ou à partir d'autres modèles de rayonnement.

Pour traiter les milieux anisothermes et hétérogènes mais toujours avec un seul élément absorbant, une solution approchée, formulée et mise en œuvre par Taylor *et al.* [132] ou bien encore par Coppalle *et al.* [133], consiste à déterminer dans un premier temps les coefficients a_i et k_i dans une condition de référence, celle qui est la plus représentative pour décrire le milieu. Ensuite, pour traiter l'ensemble des conditions rencontrées dans le milieu, on suppose que le coefficient d'absorption réduit est invariant *i.e.* que les paramètres k_i sont supposés constants et égaux à ceux déterminés dans la condition de référence et ce quelque soit la colonne de gaz considérée. Ce sont les poids a_i qui dépendent de la température et qui sont ajustés suivant la condition thermophysique. L'utilisation de ce modèle pour les problèmes de transfert radiatif se fait avec une formulation spécifique de l'ETR. La luminance directionnelle au point d'abscisse z suivant un chemin optique s'exprime sous la forme :

$$L(z) = \sum_{i=1}^n L_i(z). \quad (\text{III.5})$$

Les $L_i(z)$ représentent les luminances partielles correspondant aux intervalles $[\tilde{k}_i, \tilde{k}_{i+1}]$ et vérifient l'équation de transfert radiatif suivante formulée en coefficient d'absorption :

$$\frac{\partial L_i(z)}{\partial z} = x_s(z) p(z) k_i \left[a_i(z) \frac{\sigma_b T^4(z)}{\pi} - L_i(z) \right]. \quad (\text{III.6})$$

L'hypothèse d'invariance du coefficient d'absorption réduit est une hypothèse très forte pour traiter correctement des milieux hétérogènes et anisothermes. En effet, k_σ est en réalité fortement dépendant des conditions de température. Ce modèle n'est donc applicable que pour des milieux où le spectre des coefficients d'absorption réduits est spatialement

uniforme.

Modèle SLW

Denison et Webb se sont affranchis dans la Réf. [126] de cette restriction en formulant le modèle SLW (Spectral Line-based Weighted sum of gray gases), une version améliorée du modèle WSGG qui se base sur l'introduction d'une condition thermophysique de référence $\mathfrak{C}(T_{ref})$, de température T_{ref} , représentative du milieu étudié. Pour cette condition de référence $\mathfrak{C}(T_{ref})$, l'intervalle $[k_{min}, k_{max}]$ (intervalle de variation du coefficient d'absorption réduit) est préalablement découpé en n éléments $[\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T_{ref})), \tilde{k}_{i+1}(\mathfrak{C}(T_{ref}))]$ sur lesquels on assimile le coefficient d'absorption à la valeur moyenne $k_i(\mathfrak{C}(T_{ref}))$. Pour déterminer les valeurs de $\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T))$ (resp. $k_i(\mathfrak{C}(T))$) pour une condition thermophysique quelconque $\mathfrak{C}(T)$, on impose qu'elles satisfont la relation :

$$\mathcal{F}(\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T_{ref})), \mathfrak{C}(T_{ref}), T_{ref}) = \mathcal{F}(\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T)), \mathfrak{C}(T), T_{ref}). \quad (\text{III.7})$$

Les $\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T))$ sont alors obtenus en inversant cette relation de corrélation.

Ensuite, les poids a_i qui dépendent uniquement de la température T sont évalués par la relation suivante :

$$a_i(T, \mathfrak{C}(T_{ref})) = \mathcal{F}(\tilde{k}_{i+1}(\mathfrak{C}(T_{ref})), \mathfrak{C}(T_{ref}), T) - \mathcal{F}(\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T_{ref})), \mathfrak{C}(T_{ref}), T). \quad (\text{III.8})$$

Le modèle est rigoureux lorsque l'on peut découpler les dépendances spectrales des dépendances spatiales des spectres d'absorption *i.e.* qu'il existe des fonctions ζ et ϕ telles qu'on puisse exprimer le coefficient d'absorption comme :

$$\kappa_\sigma(z) = \phi(z) \times \zeta(\sigma). \quad (\text{III.9})$$

Les spectres sont alors dits séparables. Cette hypothèse assure de faire correspondre les mêmes intervalles spectraux correspondant aux intervalles $[\tilde{k}_i, \tilde{k}_{i+1}]$ déterminés dans différentes conditions thermophysiques. La formulation de l'ETR donnée par l'équation III.6 est alors utilisée avec les paramètres k_i qui peuvent dépendre désormais de la variable d'espace.

Ce modèle permet au vu de l'équation III.8 de traiter correctement l'absorption, d'une colonne de gaz dans les conditions de référence $\mathfrak{C}(T_{ref})$, du rayonnement d'un corps noir à une température quelconque T . Cependant, l'émissivité totale d'une colonne homogène est évaluée à partir d'un spectre d'absorption dans les conditions $\mathfrak{C}(T_{ref})$ au lieu d'être évaluée dans les conditions locales $\mathfrak{C}(T)$. La précision de ce modèle est donc très dépendante du choix de la condition de référence.

Modèles ADF et MADF

Le modèle ADF (Absorption Distribution Function) développé par Rivière *et al.* [127] diffère du modèle SLW par le calcul des poids a_i : les poids dépendent désormais de la température locale mais aussi des conditions de pression et de densités locales. Ceci permet de traiter correctement l'émission totale d'une colonne homogène. L'équation suivante donne l'expression des poids a_i .

$$a_i(T, \mathfrak{C}(T)) = \mathcal{F}(\tilde{k}_{i+1}(\mathfrak{C}(T)), \mathfrak{C}(T), T) - \mathcal{F}(\tilde{k}_i(\mathfrak{C}(T)), \mathfrak{C}(T), T). \quad (\text{III.10})$$

Comme pour le modèle SLW, le modèle ADF suppose que les spectres sont séparables. Cette hypothèse s'avère non valide lorsque les intensités des raies présentent des variations importantes et différentes avec la température. Ceci peut se produire par exemple lorsque les énergies des niveaux bas des transitions radiatives sont très différents. Pour pallier cet inconvénient, Rivière *et al.* [127] ont formulé le modèle MADF (Mixture Absorption Distribution Function), dans lequel le mélange gazeux est considéré comme un mélange d'espèces fictives présentant chacune des variations similaires de leur propriétés radiatives avec la température. Ceci assure une prise en compte plus réaliste des corrélations spectrales. Plus de détails sur ce modèle peuvent être trouvés dans [127].

La formulation précédente des modèles SLW et ADF ne tient compte que d'une espèce ou système absorbant. Pour des milieux où plusieurs espèces (ou systèmes) absorbent sur la même gamme spectrale ou dans le cas du modèle MADF où il y a plusieurs espèces fictives, une méthode couramment employée est de considérer toutes les corrélations possibles entre chaque échelle d'absorption $[\tilde{k}_i, \tilde{k}_{i+1}]$ associée à chaque espèce (ou système). Les coefficients d'absorption réduits relatifs au mélange d'espèces sont alors la somme des coefficients d'absorption réduits de chaque espèce pour toutes les combinaisons possibles. Pour les poids du mélange, il y a deux alternatives : soit ils sont pris égaux au produit des poids (hypothèse de décorrélation), préalablement calculés pour chaque espèce (cas SLW et ADF), soit on utilise une fonction de distribution cumulée jointe pour les déterminer (cas MADF, cf. [134] par exemple). L'ETR associée à ces hypothèses s'écrit, dans le cas où il y a deux contributions à l'absorption correspondant aux espèces s_1 et s_2 :

$$L(z) = \sum_{i,j} L_{ij}(z), \quad (\text{III.11})$$

$$\frac{\partial L_{ij}(z)}{\partial z} = p(z)(x_{s_1}(z)k_i^{s_1}(z) + x_{s_2}(z)k_j^{s_2}(z)) \left[a_{ij}^{s_1,s_2}(z) \frac{\sigma_b T^4(z)}{\pi} - L_{ij}(z) \right]. \quad (\text{III.12})$$

Le poids $a_{ij}^{s_1,s_2}$ représente la fraction d'énergie dans la zone spectrale telle que $k_\sigma^{s_1} \in [\tilde{k}_i^{s_1}, \tilde{k}_{i+1}^{s_1}]$ et $k_\sigma^{s_2} \in [\tilde{k}_j^{s_2}, \tilde{k}_{j+1}^{s_2}]$. À noter que cette formulation nécessite d'avoir un nombre de points de discrétisation de la luminance égale au produit des nombres de points de discrétisation utilisés pour chaque espèce. Par exemple, si le mélange est composé de trois gaz, chacun nécessitant une discrétisation en 6 intervalles spectraux du coefficient d'absorption, ceci revient à utiliser $6 * 6 * 6 = 216$ gaz gris. La mise en œuvre devient alors beaucoup plus lourde.

III.2.2 Modèles de bandes

Pour cette famille de modèles, l'objectif est de travailler avec des propriétés radiatives moyennes par bandes spectrales assez étroites pour considérer la fonction de Planck constante sur chaque intervalle. Contrairement aux modèles globaux, une pondération par la fonction de Planck des paramètres du modèle n'est donc pas nécessaire. On distingue principalement deux types de modèles pour cette famille : le modèle CK (Correlated-K) avec son extension CKFG (Correlated-K Fictitious Gases) qui s'appuie sur un réordonnement des spectres dans chaque bande spectrale par valeurs croissantes du coefficient d'absorption et le modèle statistique à bandes étroites (MSBE) basé sur la répartition statistique des positions et des intensités des raies sur les bandes.

Modèles CK et CKFG

Le modèle CK, largement utilisé dans les applications de la physique de l'atmosphère (cf. par exemple les travaux de Goody et Yung [128]) est similaire aux modèles globaux dans le sens où il repose sur la notion de réarrangement du spectre suivant les valeurs croissantes du coefficient d'absorption excepté que dans ce cas, le réarrangement se fait pour chaque bande spectrale $\Delta\sigma$ correspondant à l'intervalle $[\sigma_j, \sigma_{j+1}]$. La fonction de distribution cumulée g du coefficient d'absorption sur une bande étroite est donnée par :

$$g(k) = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\sigma \in [\sigma_j, \sigma_{j+1}] / k_\sigma \leq k} d\sigma, \quad (\text{III.13})$$

pour $k \in [k_{min}, k_{max}]$, k_{min} et k_{max} étant les valeurs minimale et maximale du coefficient d'absorption réduit de la contribution considérée sur la bande spectrale $\Delta\sigma$. La transmittivité moyenne d'une colonne homogène isotherme de longueur l moyennée sur une bande spectrale s'exprime à l'aide de la fonction g selon :

$$\bar{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} \exp(-x_s p k_\sigma l) d\sigma = \int_{k_{min}}^{k_{max}} \exp(-x_s p k l) \frac{\partial g}{\partial k} dk. \quad (\text{III.14})$$

La fonction $\partial g / \partial k$ apparaît comme la transformée de Laplace inverse de la transmittivité moyenne. En introduisant la fonction réciproque de g , $G \rightarrow k(G)$, l'expression III.14 peut s'exprimer suivant :

$$\bar{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \int_0^1 \exp(-x_s p k(G) l) dG. \quad (\text{III.15})$$

G devient ainsi une sorte de nombre d'onde adimensionné. La fonction qui à σ associe G est une fonction de réordonnement du spectre d'absorption suivant les valeurs croissantes de k_σ . L'avantage de cette fonction est qu'elle est monotone et croissante contrairement à la fonction $\sigma \rightarrow \kappa_\sigma$ qui présente une importante dynamique spectrale. L'intégration exprimée par l'équation III.15 peut donc se faire en utilisant une quadrature de Gauss, par exemple d'une dizaine de points. La transmittivité moyenne peut alors être approximée sous la forme :

$$\bar{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \sum_{i=1}^n w_i \exp(-x_s p k(G_i) l), \quad (\text{III.16})$$

où les w_i représentent les poids de la quadrature, G_i les points associés et n le nombre de points. Les coefficients $k(G_i)$ représentent les valeurs réordonnées du coefficient d'absorption réduit. L'extension de ce modèle aux milieux anisothermes et hétérogènes se fait en supposant que la fonction de réordonnement $\sigma \rightarrow G$ est indépendante de la variable d'espace. C'est l'hypothèse de corrélation qui est faite afin d'associer les valeurs du coefficient d'absorption réduit réordonné pour différentes conditions thermophysiques. Cette hypothèse s'avère exacte dans le cas où les spectres sont séparables (cf. relation III.9). La transmittivité d'une colonne hétérogène est alors approximée par :

$$\bar{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} \exp \left[- \int_{z_1}^{z_2} x_s(z) p(z) k_\sigma(z) dz \right] d\sigma \quad (\text{III.17})$$

$$= \sum_{i=1}^n w_i \exp \left[- \int_{z_1}^{z_2} x_s(z) p(z) k(G_i, z) dz \right] \quad (\text{III.18})$$

Les poids w_i de la quadrature et les valeurs de $k(G_i, z)$ sont les paramètres du modèle CK. Les coefficients $k(G_i, z)$ dépendent en pratique de la température locale et éventuellement d'une composition du milieu. La formulation de la transmittivité moyenne donnée précédemment peut être utilisée de manière similaire pour d'autres grandeurs radiatives moyennes avec l'utilisation de la fonction de réordonnement. Ainsi la luminance moyennée sur une bande spectrale peut s'exprimer comme :

$$\overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z) = \sum_{i=1}^n w_i L_{G_i}(z), \quad (\text{III.19})$$

où $L_{G_i}(z)$ est la luminance pseudo-monochromatique au point z au pseudo-nombre d'onde G_i . Cette luminance vérifie l'équation de transfert formulée en coefficient d'absorption pour chaque point de quadrature :

$$\frac{\partial L_{G_i}}{\partial z}(z) = x_s(z)p(z)k(G_i, z)[\overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z) - L_{G_i}(z)]. \quad (\text{III.20})$$

À noter dans cette équation que la bande spectrale $\Delta\sigma$ doit être assez étroite pour considérer $\overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z)$ comme constante sur $\Delta\sigma$.

Cependant il est clair que l'hypothèse de corrélation formulée précédemment qui consiste à renvoyer aux valeurs $k(G_i, z_1)$ et $k(G_i, z_2)$ le même nombre d'onde n'est pas justifiée en présence de spectres réels dont la dynamique spectrale dépend de la température. Le problème similaire a été évoqué précédemment lors de la formulation des modèles globaux de type WSGG, SLW et ADF. Cette approximation qui engendre des erreurs constitue l'inconvénient majeur de ce type de modèles. De la même manière que le modèle MADF minimise les erreurs du modèle ADF (dues à la mauvaise représentation des corrélations spectrales) en regroupant par paquets (gaz fictifs) les raies évoluant de manière similaire avec la température, Levi Di Leon *et al.* [129] ont développé le modèle CKFG (correlated-K Fictitious Gases) suivant le même principe. L'hypothèse de corrélation appliquée cette fois à chaque gaz fictif est alors plus adaptée. On suppose par ailleurs que les phénomènes d'absorption des différents gaz fictifs sont décorrélés. Ainsi pour une colonne hétérogène anisotherme la transmittivité moyennée sur une bande spectrale du mélange de gaz fictifs est donnée par la relation :

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \prod_{\text{gaz fictif } j} \overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma,j}(l), \quad (\text{III.21})$$

$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma,j}$ étant la transmittivité moyenne du gaz fictif j déterminée avec le modèle CK. L'ETR avec le modèle CKFG est en pratique formulée en transmittivité contrairement au modèle CK pour lequel l'ETR peut être formulée en coefficient d'absorption. L'utilisation du modèle MSBE décrit ci-dessous, présente cette même particularité que le modèle CKFG. La formulation de l'ETR qui y est faite est donc applicable au modèle CKFG.

Modèle statistique à bandes étroites (MSBE)

Le modèle statistique à bandes étroites a été formulé initialement par Mayer et Goody [128] pour des applications de rayonnement dans l'atmosphère. La description de ce modèle est faite dans cette partie de manière succincte puisque sa formulation est reprise en détails dans la partie III.4. Les principales hypothèses ainsi que la formulation générale du modèle

sont exposées ici dans le cas de milieux à l'ETL, condition également supposée pour la formulation des modèles précédents. L'idée principale du modèle MSBE est de considérer un traitement statistique des caractéristiques des raies (positions, intensités, profils...) sur chaque bande spectrale afin d'en exprimer la transmittivité moyenne. Ceci se justifie par le fait que les spectres des espèces absorbantes présentent en général une dynamique et une densité spectrales de raies suffisamment importantes pour être représentés par des lois de distributions. La formulation d'un tel modèle s'effectue en deux étapes. Tout d'abord, une formulation de la transmittivité moyenne est obtenue dans le cas de milieux isothermes et homogènes puis une généralisation de la formulation est entreprise pour le cas hétérogène. De la même manière que pour la formulation des modèles CK et CKFG, les bandes spectrales étudiées doivent être suffisamment étroites pour considérer la fonction de Planck constante sur chacune d'elle. La formulation du modèle en milieu uniforme est obtenue en utilisant en premier lieu les hypothèses suivantes :

i) Chaque bande spectrale $\Delta\sigma$ contient un grand nombre N de raies (indiquées i).

ii) Les positions des centres de raie σ_i sont supposées suivre une distribution aléatoire uniforme $P_{pos}(\sigma_i)$ sur l'intervalle $\Delta\sigma$ et sont statistiquement indépendantes, ce qui se traduit par :

$$\forall i, P_{pos}(\sigma_i) = \frac{1}{\Delta\sigma}. \quad (\text{III.22})$$

iii) Toutes les raies d'une bande spectrale ont la même largeur de raie. Cette hypothèse dans notre cas d'étude est discutée dans la section III.4.1.

iv) Dans chaque bande spectrale $\Delta\sigma$, l'effet de l'absorption des raies situées à l'extérieur de la bande est supposé négligeable et les largeurs des raies appartenant à $\Delta\sigma$ sont suffisamment petites devant l'intervalle $\Delta\sigma$ pour s'assurer que l'absorption de ces raies se produise uniquement dans la bande. Ceci est équivalent à considérer que l'intervalle spectral $\Delta\sigma$ est entouré d'une infinité de bandes spectrales caractérisées par les mêmes propriétés statistiques sur les raies (tout ce qui « sort » est alors égale à tout ce qui « rentre »).

Par la suite on désignera par $P(S_i)$ la fonction de distribution des intensités S_i des raies. À noter que pour l'instant aucune hypothèse n'a été faite sur cette fonction.

La transmittivité moyenne d'un élément absorbant correspondant à l'espèce s pour une colonne de gaz de longueur l aux propriétés thermophysiques uniformes s'exprime pour un agencement donné des raies $(\sigma_1, \dots, \sigma_N, S_1, \dots, S_N)$ appartenant à une bande spectrale $\Delta\sigma$:

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} \tau_\sigma(\sigma_1, \dots, \sigma_N, S_1, \dots, S_N, l) d\sigma = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} \exp\left(-\sum_{i=1}^N x_s p l S_i f(\sigma - \sigma_i)\right) d\sigma. \quad (\text{III.23})$$

Dans cette expression, $f(\sigma - \sigma_i)$ est le profil de la raie i centrée en σ_i évalué au nombre d'onde σ . Le coefficient d'absorption réduit k_σ^i est alors égal à $S_i f(\sigma - \sigma_i)$. En moyennant sur les divers agencements possibles, on peut écrire la moyenne statistique de la transmittivité monochromatique pour une bande spectrale :

$$\langle \tau_\sigma(l) \rangle = \int_{\Delta\sigma_1} \dots \int_{\Delta\sigma_N} \dots \int_{S_1=0}^{S_1=\infty} \dots \int_{S_N=0}^{S_N=\infty} \tau_\sigma(\sigma_1, \dots, \sigma_N, S'_1, \dots, S'_N, l) \prod_{i=1}^N P_{pos}(\sigma_i) P(S'_i) d\sigma_i dS'_i, \quad (\text{III.24})$$

avec $\Delta\sigma_i = \Delta\sigma$ pour tout i appartenant à $[1, N]$. Avec le passage de la somme au produit d'exponentielles dans l'équation III.23 et avec l'hypothèse ii, l'équation précédente devient :

$$\langle \tau_\sigma(l) \rangle = \left(\frac{1}{\Delta\sigma} \right)^N \prod_{i=1}^N \int_0^{+\infty} P(S_i) dS_i \int_{\Delta\sigma} \exp \left[-x_s p l S_i f(\sigma - \sigma_i) \right] d\sigma_i. \quad (\text{III.25})$$

En introduisant la largeur de raie noire équivalente W_i d'une raie d'intensité S_i et de largeur γ_i :

$$W_i(S_i, \gamma_i) = \int_0^\infty [1 - \exp(-x_s p l S_i f(\sigma - \sigma_i))] d\sigma, \quad (\text{III.26})$$

et avec l'hypothèse iv, on obtient :

$$\langle \tau_\sigma(l) \rangle = \prod_{i=1}^N \left(1 - \frac{1}{\Delta\sigma} \int_0^{+\infty} P(S_i) W_i(S_i, \gamma_i) dS_i \right). \quad (\text{III.27})$$

où il n'y a plus de dépendance en σ . Cette expression est donc égale à la transmittivité moyenne $\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l)$ de la bande spectrale. De plus, d'après l'hypothèse iii, il n'y a pas de dépendance de W_i en γ_i ce qui permet de simplifier la relation III.27 et d'écrire :

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \prod_{i=1}^N \left(1 - \frac{1}{\Delta\sigma} \int_0^\infty P(S_i) W_i(S_i) dS_i \right) = \left(1 - \frac{\overline{W}}{\Delta\sigma} \right)^N, \quad (\text{III.28})$$

où $\overline{W}$ est la largeur de raie noire équivalente moyenne définie par :

$$\overline{W} = \int_0^\infty P(S_i) W_i(S_i) dS_i. \quad (\text{III.29})$$

L'hypothèse i permet alors le passage à la limite quand N tend vers $+\infty$,

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \exp \left(-\frac{\overline{W}}{\delta} \right) \quad (\text{III.30})$$

où $\delta = \Delta\sigma/N$ est l'espacement moyen entre deux raies. Il est à noter que l'équation III.30 a été obtenue de manière générale sans formuler d'hypothèse supplémentaire que celles énoncées précédemment (i à iv). Il est montré dans la section III.4 que suivant la fonction de distribution des intensités et le profil des raies, $\overline{W}/\delta$ peut s'écrire dans le cas de milieux uniformes à l'aide d'expressions analytiques relativement simples dépendant de paramètres qui caractérisent le comportement des raies pour chaque bande spectrale. Ces expressions sont détaillées dans la partie en question.

Le traitement de colonnes hétérogènes avec ce type de modèles a fait l'objet de nombreuses études. On peut citer à ce titre les travaux de Young [135] qui a réalisé une importante synthèse des différentes approximations formulées dont les deux plus utilisées sont celles de type Curtis-Godson et Lindquist-Simmons exposées dans la section III.4.2. Cependant, de la même manière que le modèle CK, les résultats obtenus avec un MSBE pour des milieux hétérogènes peuvent être imprécis. Par analogie à l'extension du modèle CK au modèle CKFG et du modèle ADF au modèle MADF, différents auteurs dans la littérature ont formulé des MSBE par espèce et/ou par classe (gaz fictif) (on désignera par la suite ce type de modèle MSBE-multi) dépendant par exemple dans ce dernier cas de l'énergie des

états bas des transitions. On peut citer notamment les travaux de Soufiani *et al.* [136] et de Ludwig *et al.* [137].

En bonne approximation (cf. Taine et Soufiani [131]), une hypothèse de décorrélation est ensuite généralement faite sur les processus d'absorption des différentes contributions, *i.e.* classes ou espèces (hypothèse similaire formulée pour le cas du modèle CKFG). Ceci se traduit par la formulation suivante de la transmittivité moyenne du mélange similaire à l'équation III.21 :

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \prod_{\text{contribution } j} \overline{\tau}_\sigma^j{}^{\Delta\sigma}(l). \quad (\text{III.31})$$

L'utilisation de ce type de modèle (MSBE ou MSBE-multi) permet de caractériser les propriétés d'absorption du milieu en terme de transmittivité. Son utilisation nécessite par conséquent une formulation en transmittivité de l'équation de transfert radiatif. Exprimée en monochromatique et en ne considérant pas le phénomène de diffusion, la luminance au point z sur une chemin optique (z_0, z) peut se mettre sous la forme intégrée suivante (issue de la formulation I.38 de l'ETR) :

$$L_\sigma(z) = L_\sigma(z_0)\tau_\sigma(z_0 \rightarrow z) + \int_{z_0}^z \frac{\eta_\sigma(z')}{\kappa_\sigma(z')} \frac{\partial \tau_\sigma(z' \rightarrow z)}{\partial z'} dz'. \quad (\text{III.32})$$

Pour des milieux à l'ETL, on peut simplifier cette équation en utilisant la fonction de Planck pour exprimer le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$. De plus pour des bandes spectrales assez étroites la luminance d'équilibre peut être considérée comme constante sur chacune d'elles. L'équation III.32 formulée par bande devient :

$$\overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z) = \overline{L}_\sigma(z_0)\tau_\sigma(z_0 \rightarrow z)^{\Delta\sigma} + \int_{z_0}^z \overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z') \frac{\partial \overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(z' \rightarrow z)}{\partial z'} dz'. \quad (\text{III.33})$$

Une autre simplification revient à décorréler la luminance du début du chemin optique $L(z_0)$ de la transmittivité $\tau_\sigma(z_0, z)$. Cette hypothèse de décorrélation est discutée dans Taine et Soufiani [131] et peut engendrer d'importantes erreurs dans des géométries incluant des parois réfléchissantes. Signalons que cette hypothèse n'est pas requise dans le cadre d'une méthode de type Monte Carlo. En effet, dans notre étude, il n'y a qu'une seule paroi, la paroi de l'engin qui est considérée comme un corps noir. Et le traitement par bande spectrale suffisamment étroites permet de considérer la luminance d'équilibre émise par la paroi comme constante à l'intérieur des bandes. Au final, pour des milieux à l'ETL, le MSBE (et le modèle CKFG) est utilisé avec la formulation suivante.

$$\overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z) = \overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z_0)\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(z_0 \rightarrow z) + \int_{z_0}^z \overline{L}_\sigma^{\Delta\sigma}(z') \frac{\partial \overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(z' \rightarrow z)}{\partial z'} dz' \quad (\text{III.34})$$

De manière plus générale dans la section III.3.2, nous reviendrons en détails pour ce type de modèle sur les hypothèses de décorrélation faites en particulier dans le cas des milieux hors d'équilibre où la loi de Kirchhoff n'est pas valide.

III.2.3 Discussion

Un modèle approché de rayonnement est utilisé lorsque les calculs à haute résolution (approche raie par raie) ne sont pas praticables pour des raisons de temps de calcul et de place mémoire. Les transferts radiatifs sont alors traités par zones spectrales ou de façon globale avec des propriétés radiatives obtenues à l'aide de paramètres pré-tabulés (en fonction des conditions thermophysiques rencontrées). Le choix du type de modèles à utiliser dépend du milieu à traiter (réactif ou non, mono ou multi-espèces absorbantes,...), de la géométrie à considérer (présence ou non de paroi réfléchissante) et de la formulation de l'ETR (en coefficient d'absorption ou en transmittivité) liée à la méthode à pratiquer pour la résoudre (lancé de rayon, ordonnées discrètes, P_N , Monte Carlo...). Dans le cadre de nos travaux, l'enjeu est de simuler les transferts radiatifs dans un milieu hors d'équilibre thermique, réactif, multi-espèces absorbantes avec le solveur radiatif ASTRE (code 3D formulé en Monte Carlo). Une revue des avantages et inconvénients de chaque type de modèle est faite dans Taine et Soufiani [131].

Les modèles globaux moins précis que les modèles de bandes, sont pratiques pour traiter des milieux homogènes, mais deviennent très lourds à paramétrer pour des conditions hétérogènes (en milieu réactif par exemple) faisant perdre l'intérêt de cette approche. Le modèle global MADF développé par Rivière *et al.* [127] s'avère par exemple efficace dans un milieu non forcément isotherme mais à l'équilibre chimique et uniforme en pression (cf. par exemple Deron [134]) ce qui n'est pas le cas dans notre application.

Concernant les modèles de bandes (CK et MSBE), de manière générale lorsqu'ils sont praticables, la précision des résultats est assez similaire entre les deux modèles, le modèle CK offrant de plus la possibilité de travailler avec la formulation locale ou intégrale de l'ETR puisque ce modèle est basé sur des coefficients d'absorption. Cependant ces modèles sont peu praticables dans les milieux réactifs très hétérogènes à cause de leurs hypothèses de corrélation spectrale partiellement représentatives de la réalité. Leurs extensions, modèles CKFG et MSBE-multi, construits pour différentes espèces et/ou gaz fictifs dont les spectres évoluent de manière similaire suivant les conditions thermochimiques, présentent une alternative plus précise et plus adaptée aux milieux hétérogènes.

Contrairement au modèle CK, l'utilisation d'un modèle CKFG ou d'un modèle MSBE-multi impose cependant de travailler avec une formulation de l'ETR en transmittivité. Ceci reste néanmoins compatible avec une approche de Monte Carlo pour résoudre l'ETR.

Par rapport au modèle CKFG, le MSBE-multi a l'avantage d'offrir une paramétrisation plus souple car les paramètres tabulés ne dépendent pas de la composition mais seulement des températures et de la pression totale contrairement aux modèles type CK et CKFG. Au niveau de la précision attendue pour le MSBE-multi, ce type de modèle a déjà été mis en œuvre par Rivière *et al.* [96] pour des applications à des écoulements de rentrée martienne (espèces CO_2 , CO) où le milieu pouvait être considéré à l'ETL sans ionisation et a montré des résultats satisfaisants en comparaison à des calculs raie par raie.

Par conséquent afin de résoudre l'ETR avec un modèle approché dans le cas où le milieu est anisotherme multi-espèces réactif, notre choix s'est porté sur le modèle statistique à bandes étroites de MSBE-multi. La construction de ce MSBE pour des plasmas de rentrée terrestre et la formulation de l'ETR pour utiliser ce type de modèles dans le cas hors d'équilibre font l'objet des deux parties suivantes.

III.3 Formulation de l'équation de transfert radiatif avec un MSBE dans les milieux hors ETL

L'objectif de cette partie est d'établir une formulation en transmittivité de l'ETR par bande spectrale dans des conditions hors d'équilibre afin d'utiliser un MSBE. De manière générale, l'équation de transfert radiatif en monochromatique pour des milieux semi-transparents non diffusant tels que ceux rencontrés dans les plasmas de rentrée est donnée par I.38. Cette équation est rappelée ici :

$$\frac{dL_\sigma(z)}{dz} = \eta_\sigma(z) - \kappa_\sigma(z)L_\sigma(z). \quad (\text{III.35})$$

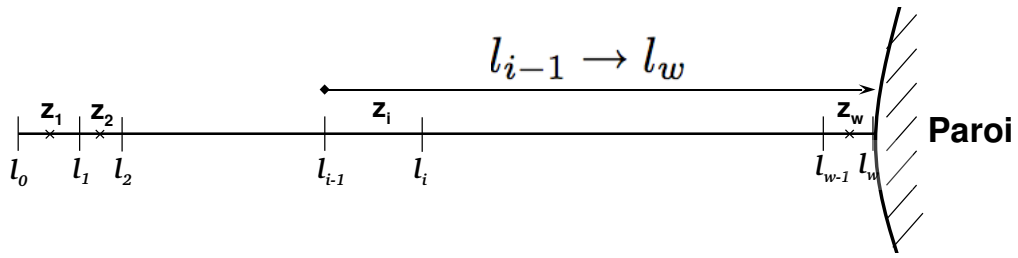


FIG. III.1: schéma de la ligne d'arrêt discrétisée en colonne homogène z_i .

Pour obtenir la luminance à la paroi provenant du chemin optique (l_0, l_w) correspondant par exemple à la ligne d'arrêt schématisé par la figure III.1, on peut intégrer l'équation précédente entre l_0 et la paroi l_w en faisant intervenir la transmittivité $\tau_\sigma(l \rightarrow l_w)$ d'une colonne comprise entre l et l_w et le coefficient d'émission $\eta_\sigma(l)$ au point référencé par l'abscisse l tel que la luminance à la paroi s'écrive :

$$L_\sigma(l_0 \rightarrow l_w) = L_\sigma(l_0)\tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w) + \int_{l_0}^{l_w} \eta_\sigma(l)\tau_\sigma(l \rightarrow l_w)dl \quad (\text{III.36})$$

En décomposant la ligne (l_0, l_w) en éléments supposés homogènes z_i puis en décomposant suivant toutes les contributions radiatives j (ou j'), la relation III.36 devient :

$$L_\sigma(l_0 \rightarrow l_w) = L_\sigma(l_0)\tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w) + \sum_j \int_{l_0}^{l_w} \eta_\sigma^j(l) \prod_{j'} \tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)dl \quad (\text{III.37})$$

$$= L_\sigma(l_0)\tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w) + \sum_j \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \eta_\sigma^j(z_i) \prod_{j'} \tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)dl \quad (\text{III.38})$$

L'utilisation d'un modèle statistique à bandes étroites permet d'obtenir des transmittivités de colonnes homogènes ou hétérogènes moyennées sur une bande spectrale. L'objectif est alors d'exprimer la luminance par bande en fonction des transmittivités moyennes des contributions tout en tenant compte des corrélations spectrales qui existent entre les différents processus radiatifs. En moyennant la formulation précédente sur une bande $\Delta\sigma$, on obtient l'équation suivante :

$$\overline{L_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} = \overline{L_\sigma(l_0)\tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} + \sum_j \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \overline{\eta_\sigma^j(z_i) \prod_{j'} \tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl \quad (\text{III.39})$$

De manière générale, le choix des bandes spectrales doit correspondre à deux objectifs : leur nombre doit être suffisamment petit pour optimiser le temps de calcul et leurs largeurs suffisamment étroites pour que $L_{\sigma}^{\circ}(T)$ puisse être considérée comme constante dans chaque bande (ou du moins décorrélée du spectre d'absorption du gaz). Le nombre et la largeur des bandes sont donc dépendants de la gamme spectrale étudiée et des niveaux de température rencontrés. Par exemple, dans le cadre de la rentrée martienne, le MSBE développé par Rivière *et al.* [96] tient compte des espèces CO , CO_2 pour des températures comprises entre 1000 et 4000 K. Dans ce modèle, l'objectif étant de modéliser le rayonnement infrarouge pour ces températures, une discrétisation de la fonction de Planck en 118 intervalles de 25 cm^{-1} a été effectuée. Dans notre étude, une gamme spectrale beaucoup plus importante doit être considérée car les niveaux de température sont de quelques milliers à quelques dizaines de milliers de kelvin. Dans ce contexte, une largeur plus importante peut être utilisée, *i.e.* de l'ordre de plusieurs centaines de cm^{-1} , ce qui est suffisamment étroit pour discrétiser correctement la fonction de Planck entre 50000 et 200000 cm^{-1} pour une température de 10000 K par exemple. Pour des nombres inférieurs à 50000 cm^{-1} , comme tenu des épaisseurs optiques des contributions discutées par la suite (les contributions sont essentiellement optiquement minces en dessous de 50000 cm^{-1}), il n'est pas nécessaire d'avoir une discrétisation élevée de la fonction de Planck dans la gamme 1000-50000 cm^{-1} .

Différentes largeurs de bandes ont été testées, de 500 cm^{-1} à quelques milliers de cm^{-1} , par comparaison à des calculs raie par raie de transmittivité de colonnes homogènes et isothermes et finalement, pour la construction du modèle, exposée dans la partie III.4.3, une largeur de 1000 cm^{-1} a été retenue offrant ainsi un bon compromis entre précision et gain en temps de calcul.

III.3.1 Épaisseurs optiques des systèmes

Avant de résoudre l'ETR, il est important d'avoir un ordre de grandeur des épaisseurs optiques relatives aux contributions radiatives du milieu étudié afin de traiter ou non l'absorption de chacune d'entre elles. Suivant le cas, la résolution de l'équation III.39 peut ainsi être simplifiée. Pour ce faire, nous nous sommes intéressés au cas d'épreuve FIRE II, rentrée terrestre à vitesse hypersonique déjà présentée dans le deuxième chapitre où le rayonnement joue un rôle significatif dans l'échauffement de la paroi. On considère un point de rentrée où les épaisseurs optiques sont à priori élevées, *i.e.* sur un point de la trajectoire caractérisé par une haute pression et une température relativement basse dans la couche de choc. Le point de trajectoire au temps de vol 1648 s correspond à cette situation. Des calculs de rayonnement à haute résolution ont été effectués dans le chapitre II sur la ligne d'arrêt pour ce point de trajectoire à partir de champs aérothermochimiques obtenus avec le code TINA (champs présentés dans le paragraphe II.3.2). Nous avons évalué les épaisseurs optiques $\kappa_{\sigma}\mathcal{L}$ (coefficient d'absorption $\times$ longueur) sur un point du plateau (point situé dans la zone d'équilibre à 2 cm de la paroi, $T = 7900 \text{ K}$, $P = 2 \text{ bar}$) et pour une longueur caractéristique de l'épaisseur d'un choc de rentrée ($\mathcal{L} = 10 \text{ cm}$).

Les figures III.2 et III.3 montrent les épaisseurs optiques sur toute la gamme spectrale pour l'ensemble des contributions. La valeur $\kappa_{\sigma}\mathcal{L} = 0.1$ représente une épaisseur optique de référence² (symbolisée par une ligne), au-dessus de laquelle les systèmes ne peuvent plus être

²Pour donner un ordre de grandeur, une colonne homogène qui a une épaisseur optique de 0.1, a une

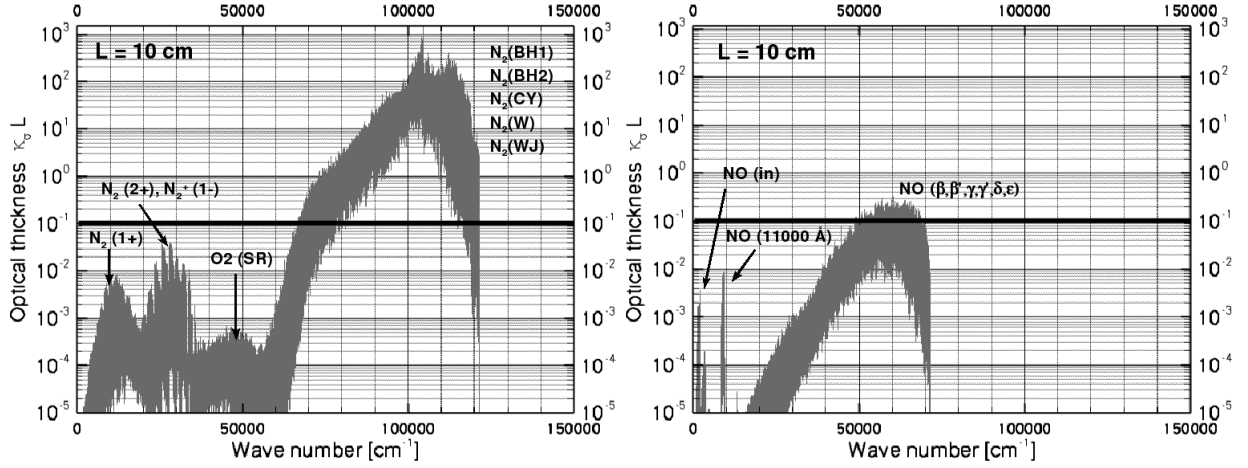


FIG. III.2: Épaisseurs optiques des systèmes moléculaires de N_2 , N_2^+ , O_2 (à gauche) et NO (à droite) évaluées pour un chemin optique $\mathcal{L} = 10$ cm pour une condition de rentrée de la sonde FIRE II correspondant au temps de vol 1648 s ($T = 7900$ K, $P = 2$ bar - champs aérothermochimiques obtenus avec le code TINA, cf. II.3.2).

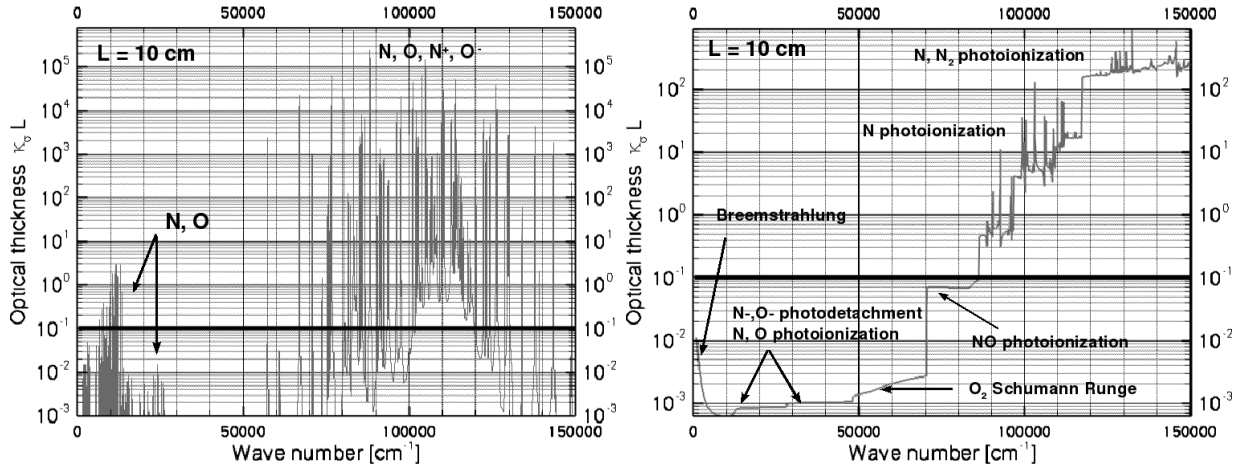


FIG. III.3: Épaisseurs optiques des raies des atomes N , O , N^+ et O^+ (à gauche) et des continua (à droite) évaluées pour la même condition que celle indiquée sur la figure III.2.

considérés comme mince (par la suite nous appellerons ces systèmes, les systèmes optiquement épais) et au-dessous comme optiquement minces. Sous cette considération, il apparaît que l'ensemble des systèmes moléculaires dans l'infrarouge et le visible sont optiquement minces ainsi que le système O_2 Schumann-Runge lié-lié. Les systèmes de N_2 dans le VUV sont très épais, en particulier sur les têtes de bandes. Les systèmes NO ($\beta, \beta', \gamma, \gamma', \delta, \epsilon$) sont légèrement épais avec des épaisseurs optiques allant jusqu'à 0.3. Pour les atomes, l'ensemble des raies (y compris celles de l'IR) doit être considéré comme optiquement épais et en particulier les raies du VUV qui sont sans surprise très optiquement épaisses. Concernant les continua, la figure III.3 (à droite) indique que ce sont principalement les phénomènes de photoionisations atomiques et moléculaires qui sont optiquement épais. Les transitions libre-libre et le photodétachement sont minces dans le cas étudié ici. Pour conforter ces considérations, d'autres estimations ont été réalisées en prenant d'autres points de trajec-

transmittivité de $\exp(-0.1) = 0.904$ ce qui signifie que la colonne transmet plus de 90 % de la luminance.

toire (temps 1634 s, 1637.5 s et 1642.66 s) et dans différents endroits de la couche de choc (couche limite et choc). Il s'avère que pour le point de trajectoire au temps de vol 1642.66 s, le taux d'ionisation dans la couche de choc est plus élevé que dans le cas 1648 s et que dans cette situation le bremsstrahlung est optiquement épais. D'autre part, dans la couche limite, les systèmes lié-lié et lié-libre de O_2 (Schumann Runge) présente également une épaisseur optique non négligeable pour des longueurs de l'ordre de 1 cm. Le tableau III.1 récapitule le caractère optiquement épais ou mince des systèmes qui résulte de l'ensemble des estimations précédentes. Ces résultats sont par la suite utilisés afin de considérer l'absorption des différentes contributions radiatives.

TAB. III.1: *Caractère optiquement épais ou mince des contributions radiatives considérées dans notre étude.*

Contributions	Systèmes moléculaires	Atomes	Continua
Optiquement mince	$N_2^+(1-,2-,Meinel)$ $N_2(1+,2+)$ $NO(11000 \text{ Å}, \text{infrared})$		photodétachement ($N-, O-$)
Optiquement épais	$N_2(BH1, BH2, WJ, W, CY)$ $NO(\beta, \beta', \gamma, \gamma', \delta, \epsilon)$ O_2 (Schumann Runge)	N, N^+ O, O^+	Photoionisation de N, O, N_2, O_2, NO Bremmstrahlung Photodissociation de O_2

III.3.2 Corrélations spectrales

Afin de simplifier la formulation du modèle, des hypothèses sont faites sur les corrélations spectrales des différents processus radiatifs afin d'aboutir à une formulation basée sur des transmittivités moyennes système par système. Comme nous le verrons par la suite, le problème des corrélations se pose en particulier pour les contributions représentées par des spectres de raies (transitions lié-lié).

Premièrement on suppose que l'émission d'une contribution j et l'absorption des autres contributions $j' \neq j$ sont décorrélées, ce qui est légitime puisqu'il n'y a pas de raison physique pour que les raies d'émission du système j soient toujours en face (ou jamais en face) des raies d'absorption des autres systèmes. Une autre hypothèse du même type consiste à décorréler les phénomènes d'absorptions des différentes contributions. On obtient ainsi une première simplification de l'équation III.39 :

$$\overline{L_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} = \overline{L_\sigma(l_0)\tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} + \sum_j \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \overline{\eta_\sigma^j(z_i)\tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl. \quad (\text{III.40})$$

À partir des considérations précédentes sur les épaisseurs optiques, on peut distinguer dans l'équation III.40 les systèmes optiquement épais des systèmes optiquement minces. Pour ces derniers, on peut approcher :

$$\overline{\eta_\sigma^j(z_i)\tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \approx \overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma} \exp\left(-\int_l^{l_w} \overline{\kappa_\sigma^j(l')}^{\Delta\sigma} dl'\right). \quad (\text{III.41})$$

De plus, pour les systèmes optiquement épais du continuum, compte tenu de la très faible dynamique spectrale de ces contributions, on peut décorréler leur émission de leur absorption et approcher alors le produit $\overline{\eta_\sigma^j(z_i)\tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}$ (pour j désignant un continuum optiquement épais) de la même manière que pour les systèmes minces avec la relation (III.41). Ainsi, pour les continua optiquement épais et les systèmes optiquement minces (ce qui correspond aussi à tous les continua et les systèmes moléculaires optiquement minces si on se réfère au tableau III.1), le développement d'un MSBE n'est pas nécessaire. Ces contributions peuvent être traitées avec un « box model » *i.e.* en utilisant la relation III.41 avec simplement une tabulation des coefficients d'émission et d'absorption pour chaque bande spectrale et pour chaque système. Par la suite, on désignera par « box » les systèmes traités en box model *i.e.* les continua et les systèmes moléculaires optiquement minces.

Pour les systèmes lié-lié optiquement épais regroupés sous l'appellation « *bb-épais* » (*bb* pour « bound-bound »), l'émission d'un système est de manière générale, fortement corrélée à son absorption. La figure III.4 illustre cette corrélation spectrale pour le système Birge-Hopfield 2 de N_2 . Sur cette figure, le coefficient d'émission-transmission moyenné sur des bandes spectrales de 1000 cm^{-1} est tout d'abord calculé correctement *i.e.* avec la formule exacte $\overline{\eta_\sigma\tau_\sigma}^{\Delta\sigma}$ (trait plein) en tenant compte des corrélations spectrales, puis avec l'expression $\overline{\eta_\sigma}^{\Delta\sigma}\overline{\tau_\sigma}^{\Delta\sigma}$ (trait en pointillés) en supposant totalement décorrélée l'émission de l'absorption, et ceci dans des conditions d'équilibre (figure de gauche) et de déséquilibre (figure de droite). On remarque clairement que décorréler l'émission d'un système de son absorption entraîne d'importantes erreurs. Pour contourner cette difficulté, il est alors utile de remarquer que la transmittivité d'un système peut s'écrire :

$$\tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w) = \frac{1}{\kappa_\sigma^j(z_i)} \frac{\partial \tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w)}{\partial l}. \quad (\text{III.42})$$

En utilisant la relation III.42 pour les systèmes optiquement épais et la relation III.41 pour les systèmes traités en « box model » (continua et systèmes moléculaires optiquement minces), l'équation III.40 devient :

$$\begin{aligned} \overline{L_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} &= \overline{L_\sigma(l_0)\tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \\ &+ \sum_j^{bb\text{-}\acute{e}pais} \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \frac{\overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}}{\kappa_\sigma^j(z_i)} \frac{\partial \tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w)}{\partial l} \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl \\ &+ \sum_j^{box} \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma} \prod_{j'} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl. \end{aligned} \quad (\text{III.43})$$

Dans le cas où le milieu traité est considéré à l'ETL on retrouve une formulation similaire à l'équation III.34 pour les contributions lié-lié optiquement épais. Cependant dans notre cas, le milieu est hors d'équilibre, ce qui nous interdit l'utilisation de la loi de Planck pour simplifier l'expression des rapports $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ dans l'équation III.43. La figure III.5 montre à titre d'exemple les rapports $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ à l'équilibre ($T = 10000 \text{ K}$ et $T = 20000 \text{ K}$) représentés par la fonction de Planck et ce même rapport dans des conditions de déséquilibre représentatif d'un choc de rentrée avec une température $T_{ve} = 10000 \text{ K}$ pour caractériser les modes électro-vibrationnels et une température $T_r = 20000 \text{ K}$ pour le mode rotationnel. Les rapports sont exposés pour deux systèmes, N_2 (Birge-Hopfield 2) et NO (γ), considérés comme optiquement épais dans notre application. Dans le cas hors d'équilibre, le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$

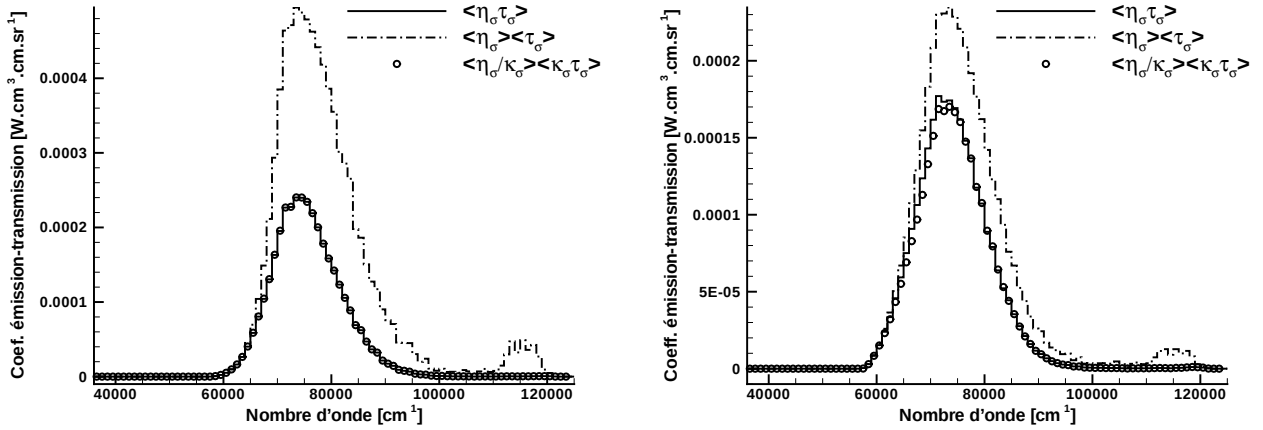


FIG. III.4: Coefficient d'émission-transmission, moyenné par bandes spectrales de 1000 cm^{-1} , du système Birge-Hopfield 2 de N_2 pour une colonne homogène de 10 cm dans les conditions suivantes : N_2 pur à 1 bar en équilibre thermique $T = 10000 \text{ K}$ (à gauche) et en déséquilibre $T_{ve} = 10000 \text{ K}$ et $T_r = 20000 \text{ K}$ (à droite).

présente pour les deux systèmes une forte dynamique spectrale et qui n'est de plus pas pilotée par la température T_r ou T_{ve} ni par une sorte de moyenne de ces deux températures. En effet, suivant le système étudié, le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ peut être supérieur ou même, ce qui peut paraître surprenant, inférieur à la fonction de Planck calculée à la plus basse température qu'est dans ce cas T_{ve} . En réalité si l'on détermine le rapport $L_\sigma^\circ(T_{ve})\kappa_\sigma(T_r, T_{ve})/\eta_\sigma(T_r, T_{ve})$ pour une transition donnée entre le niveau haut (E'_{el}, E'_v, E'_r) et le niveau bas (E''_{el}, E''_v, E''_r), on obtient la relation suivante :

$$\frac{L_\sigma^\circ(T_{ve})}{\eta_\sigma(T_r, T_{ve})/\kappa_\sigma(T_r, T_{ve})} = \exp\left(\frac{E'_r - E''_r}{k_b}\left(\frac{1}{T_r} - \frac{1}{T_{ve}}\right)\right) \quad (\text{III.44})$$

À noter que pour obtenir cette relation, on a supposé que les profils en émission et en absorption étaient égaux et que l'émission induite était négligeable (cette dernière hypothèse est raisonnable pour les systèmes moléculaires considérés qui sont dans l'UV et le VUV). Au vu de l'équation III.44, le rapport des $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ à l'équilibre et hors d'équilibre dépend de T_r et T_{ve} mais aussi du signe de $\Delta E_r = E'_r - E''_r$. Cet écart d'énergie de rotation dépend en particulier des constantes spectroscopiques rotationnelles B_e des états électroniques de la transition considérée, utilisée dans le développement de Dunham pour déterminer les énergies des niveaux rotationnels. Il s'avère que pour le système Birge-Hopfield 2 de N_2 la différence des B_e est négative ($\Delta B_e = B_e(N_2 b'^1 \Sigma_u^+) - B_e(N_2 X^1 \Sigma_g^+) = 1.1591 - 1.998 < 0$; valeurs des constantes prises dans [101]) et que pour le système NO (γ), ΔB_e est positive ($\Delta B_e = B_e(NO A^2 \Sigma^+) - B_e(NO X^2 \Pi_r) = 1.9965 - 1.7049 > 0$; valeurs prises [101]) ce qui explique la position des rapports $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ pour ces systèmes dans les conditions de températures précédentes par rapport à la fonction de Planck à T_{ve} . Par ailleurs, l'enveloppe de $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ suit le comportement de la fonction de Planck à T_{ve} plutôt qu'à T_r puisque dans les transitions, la variation d'énergie électro-vibrationnelle mise en jeu est plus grande que celle de rotation. Concernant la dynamique spectrale de ces rapports hors d'équilibre, elle est due au mélange des raies rotationnelles provenant de bandes vibrationnelles différentes. La figure III.6 illustre cette remarque en montrant le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ pour seulement deux

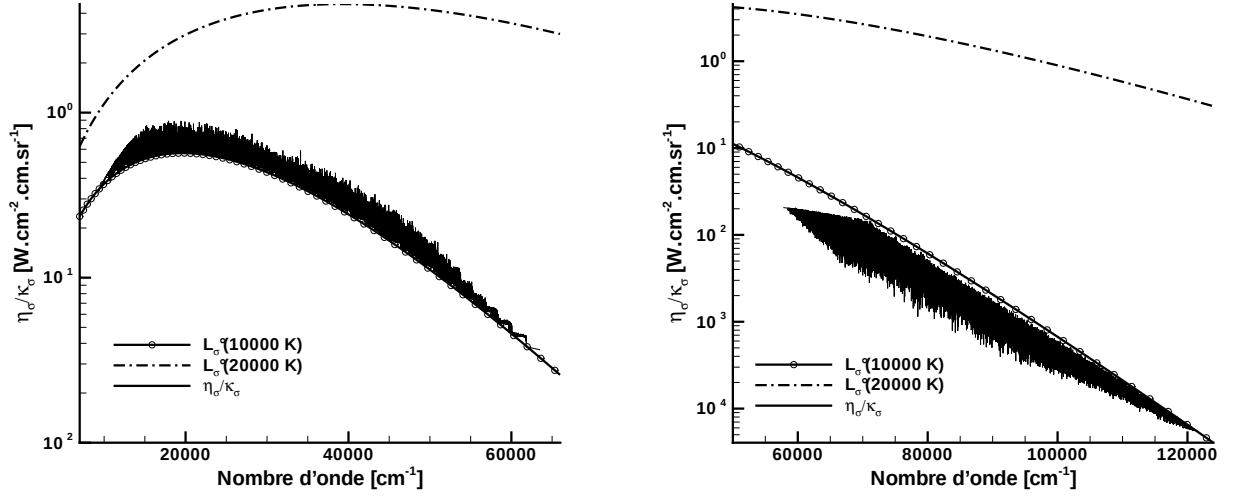


FIG. III.5: Rapport du coefficient d'émission sur le coefficient d'absorption à l'équilibre 10000 K (trait plein avec des ronds) - 20000 K (trait en pointillé) et en déséquilibre $T_{ve} = 10000$ K et $T_r = 20000$ K (trait plein) pour le système NO (γ) à gauche et pour le système N_2 (Birge-Hopfield 2) à droite.

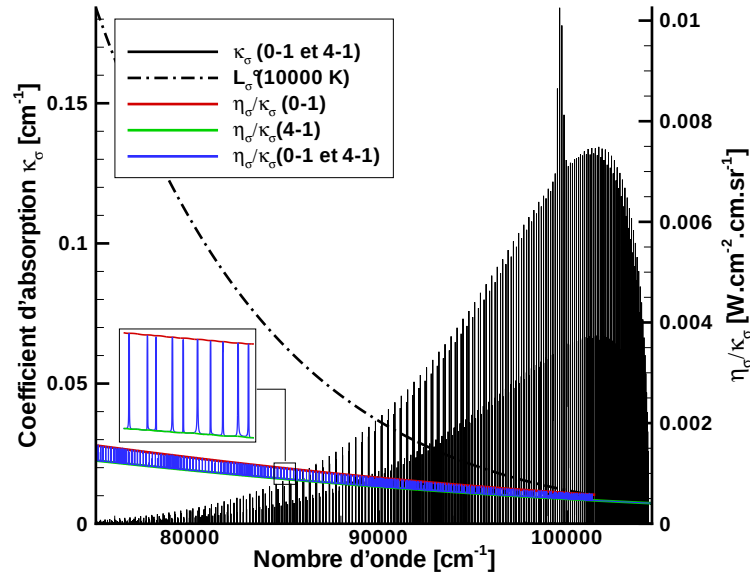


FIG. III.6: Exemple de rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ du système N_2 (Birge-Hopfield 2) pour les bandes vibrationnelles (0-1) et (4-1). La condition thermophysique est $T_{ve} = 10000$ K et $T_r = 20000$ K (courbe verte) pour 1 bar de N_2 .

bandes vibrationnelles du système Birge-Hopfield 2 N_2 . Tout d'abord les rapports $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ pour les deux bandes ($v' = 0 - v'' = 1$) et ($v' = 4 - v'' = 1$), s'étalant respectivement sur $[71000-101500]$ cm^{-1} et sur $[73500-104500]$ cm^{-1} , sont représentés en prenant chaque bande séparément. Leurs allures sont lisses puisque pour une même bande, les transitions présentent une variation d'énergie rotationnelle très faible. En revanche, elles s'éloignent

progressivement de la fonction de Planck calculée à T_{ve} au fur et à mesure qu'on s'éloigne des têtes de bande compte tenu de la relation III.44. D'autre part, pour une simple question de peuplement (le niveau vibrationnel correspondant à $v' = 0$ est plus peuplé que celui à $v' = 4$), le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ de la bande (0-1) est supérieur à celui de la bande (4-1). Lors du mélange de ces deux bandes, cette différence de niveau engendre une dynamique spectrale du comportement du rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ de ces deux bandes. En effet, la figure III.6 indique que $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ pour les deux bandes oscille entre les deux rapports $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ de chaque bande prise séparément suivant si $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ est piloté par une raie de la bande (0-1) ou (4-1). Pour un système électronique complet dans des conditions hors ETL, chaque bande vibrationnelle étant caractérisée par un rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ différent, le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ du système présente par conséquent une forte dynamique spectrale, comme le montre la figure III.5.

Ces résultats montrent qu'en déséquilibre le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ ne s'apparente pas à une fonction de Planck. Pour traiter les contributions lié-lié optiquement épaisses dans l'équation III.43, ne pouvant se ramener à l'utilisation d'une fonction de Planck, nous avons dû nous intéresser aux corrélations spectrales existant entre les grandeurs $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $\partial\tau_\sigma/\partial l (= \kappa_\sigma\tau_\sigma)$ pour chaque système j optiquement épais, ceci afin de simplifier le calcul de l'intégrale $\int_{l_{i-1}}^{l_i} \frac{\eta_\sigma(z_i)}{\kappa_\sigma(z_i)} \frac{\partial\tau_\sigma(l \rightarrow l_w)}{\partial l} \Delta\sigma dl$ dans l'équation III.43³. Notre étude s'est basée sur le cas simple d'une colonne homogène. Dans un premier temps, nous avons étudié les corrélations spectrales existants entre $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $\kappa_\sigma\tau_\sigma$ *i.e.* sans considérer d'intégration spatiale sur la colonne puis en considérant cette intégration en étudiant les corrélations entre $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $1 - \tau_\sigma$.

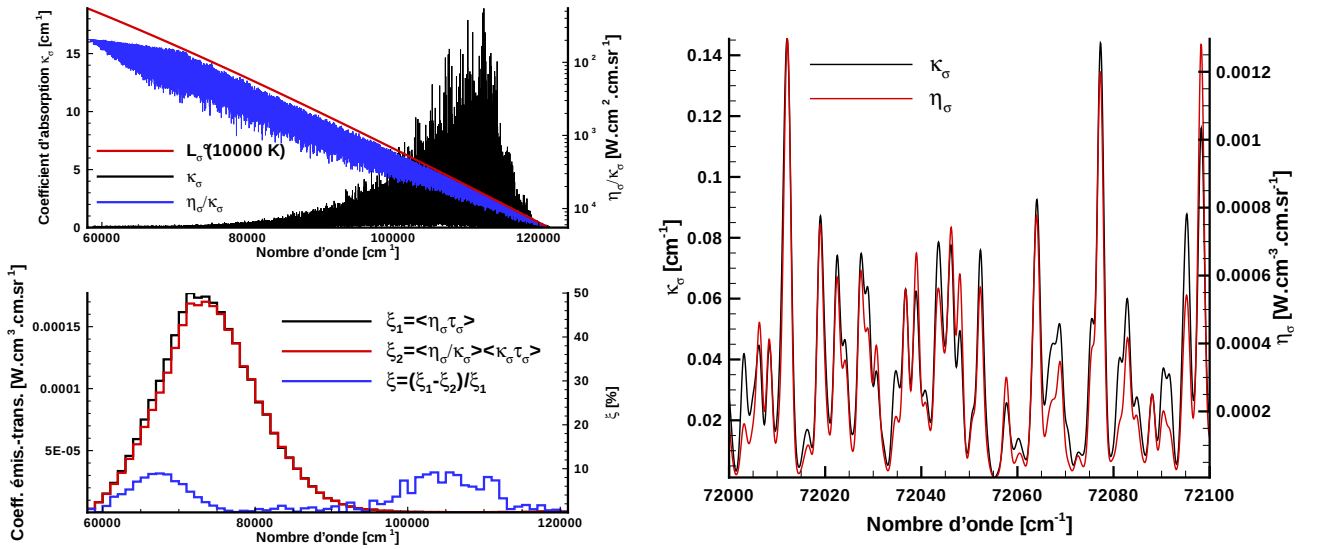


FIG. III.7: Propriétés radiatives du système N_2 (Birge-Hopfield 2) moyennées sur des bandes de 1000 cm^{-1} pour une colonne homogène de 10 cm dans des conditions de déséquilibre $T_{ve} = 10000 \text{ K}$, $T_r = 20000 \text{ K}$ et $P = 1 \text{ bar}$ de N_2 .

- Pour le premier type d'étude, la figure III.4 montre à titre d'exemple que sur des calculs de coefficients d'émission-transmission du système Birge-Hopfield 2 de N_2 pour 1 bar de N_2 pur en situation d'équilibre ($T = 10000 \text{ K}$) ou de fort déséquilibre thermique ($T_{ve} = 10000$

³Pour étudier l'effet des corrélations spectrales existant entre les processus radiatifs d'un même système, il est inutile de prendre en compte dans cette intégrale le produit des transmittivités des autres systèmes qui sont supposés décorrélés.

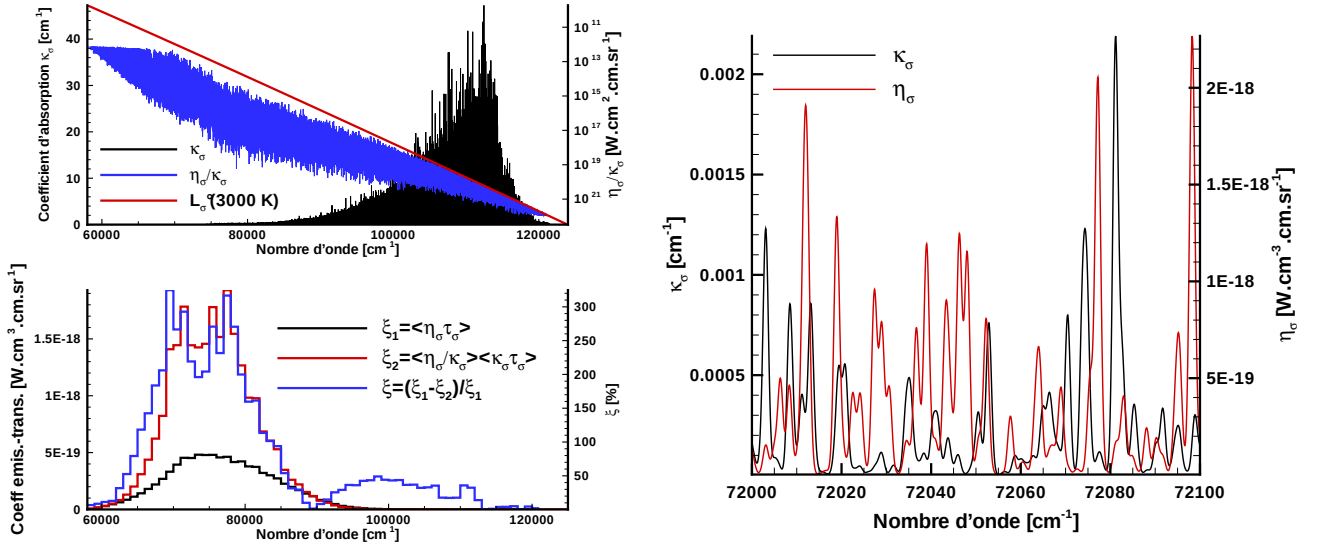


FIG. III.8: Propriétés radiatives du système N_2 (Birge-Hopfield 2) moyennées sur des bandes de 1000 cm^{-1} pour une colonne homogène de 10 cm dans des conditions de déséquilibre $T_{ve} = 3000 \text{ K}$, $T_r = 20000 \text{ K}$ et $P = 1 \text{ bar}$ de N_2 .

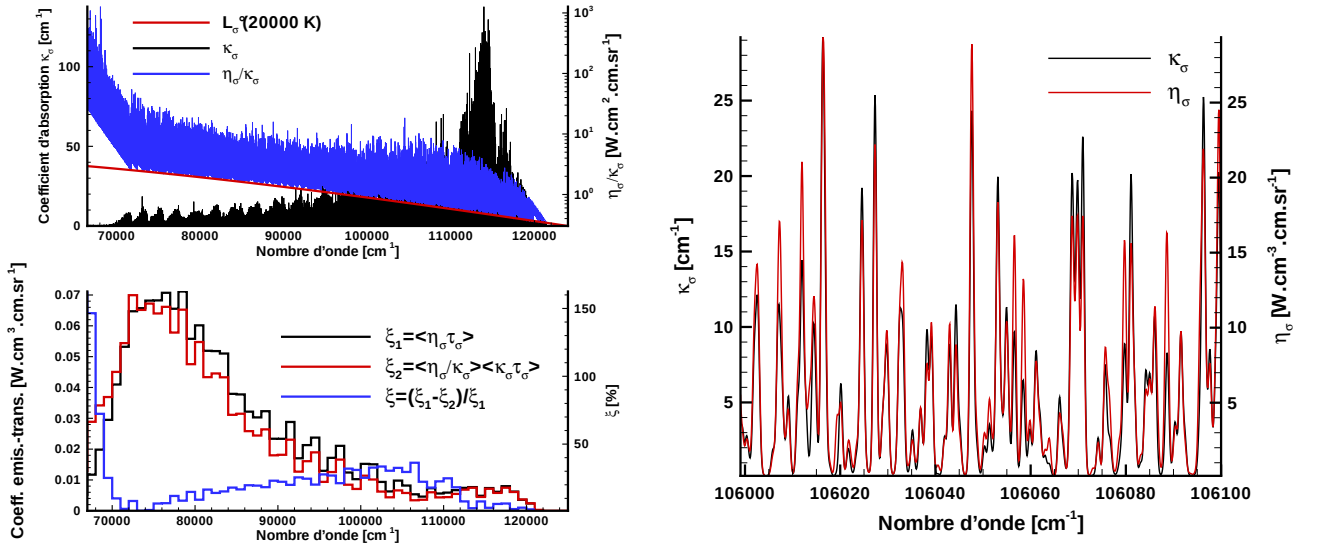


FIG. III.9: Propriétés radiatives du système N_2 (Birge-Hopfield 2) moyennées sur des bandes de 1000 cm^{-1} pour une colonne homogène de 10 cm dans des conditions de déséquilibre $T_{ve} = 20000 \text{ K}$, $T_r = 3000 \text{ K}$ et $P = 1 \text{ bar}$ de N_2 .

K et $T_r = 20000 \text{ K}$) la décorrélation des grandeurs $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $\kappa_\sigma\tau_\sigma$ (symbole « o ») n'entraîne pas d'erreur significative en comparaison d'une approche corrélée (trait plein). À noter que ce résultat n'est pas surprenant à l'équilibre car pour une largeur de bande de 1000 cm^{-1} la fonction de Planck est pratiquement constante sur chaque bande spectrale ce qui permet dans cette situation de décorréler systématiquement les grandeurs $\eta_\sigma/\kappa_\sigma = L_\sigma^\circ$ et $\kappa_\sigma\tau_\sigma$. Par contre, dans une situation de déséquilibre, vu la forte dynamique spectrale que peut présenter le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ (cf. figure III.5) il est plus surprenant de voir que l'hypothèse de décorrélation est raisonnable. Pour expliquer ce résultat, les figures III.7, III.8 et III.9

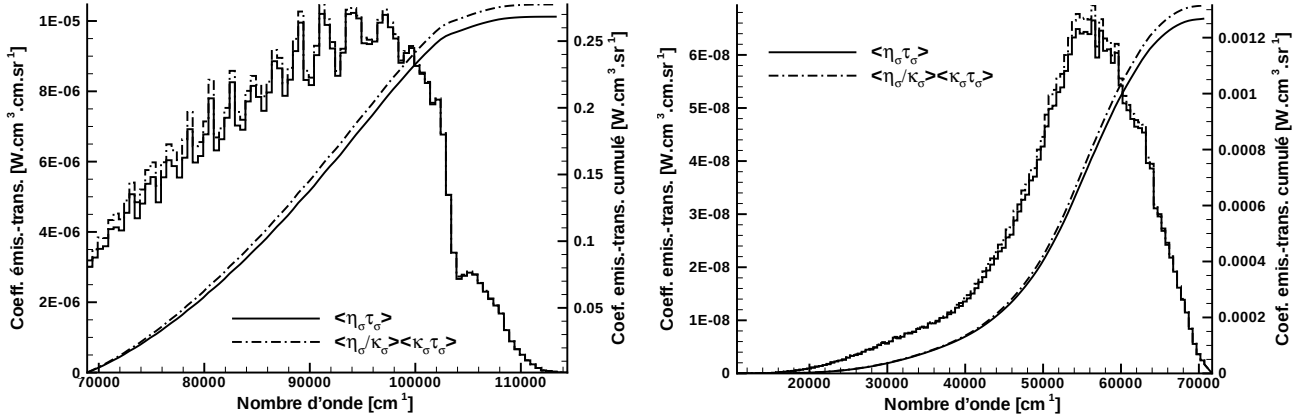


FIG. III.10: Coefficient d'émission-transmission moyenné par bandes spectrales de 500 cm^{-1} et coefficient d'émission-transmission cumulé du système N_2 (Birge-Hopfield 1) (à gauche) et NO (β) pour une colonne homogène de 10 cm dont les propriétés radiatives sont prises égales à celles d'un point dans le choc du point de la trajectoire de FIRE II à 1634 s ($T_{ve} = 9800 \text{ K}$, $T_r = 23300 \text{ K}$ et $P = 3000 \text{ Pa}$).

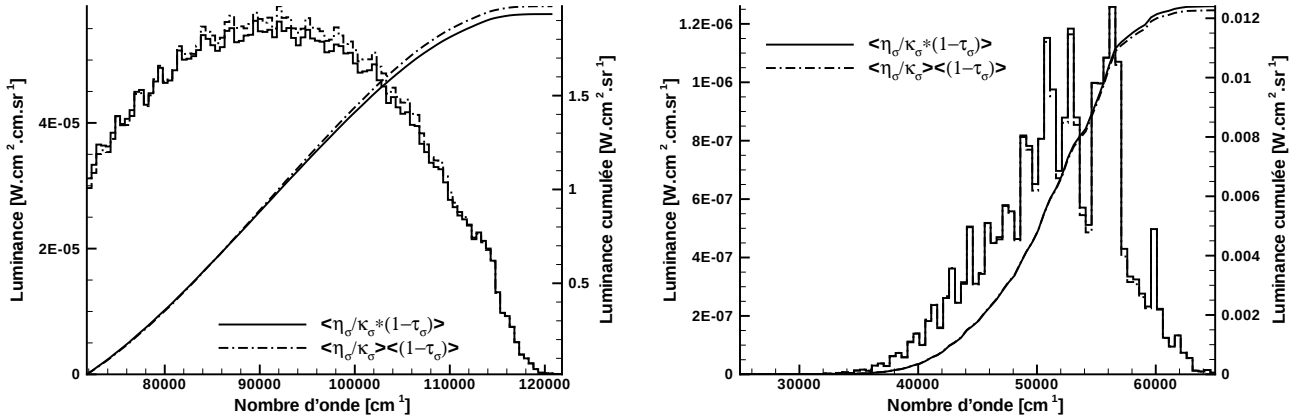


FIG. III.11: Luminance moyennée par bandes spectrales de 500 cm^{-1} , et luminance cumulée émises par le système N_2 (Birge-Hopfield 2) (à gauche) et NO (δ) pour une colonne homogène de 10 cm dont les propriétés radiatives utilisées sont celles indiquées sur la figure III.10.

montrent des propriétés radiatives moyennes et les écarts relatifs engendrés par l'hypothèse de décorrélation énoncée précédemment dans des situations de très fort déséquilibre pour le système Birge-Hopfield 2 de N_2 . La figure III.7 montre que pour le cas ($T_r=20000 \text{ K}$ et $T_{ve}=10000 \text{ K}$) l'hypothèse de décorrélation ne donne pas plus de 10% d'erreur au maximum. Ceci est dû au fait qu'à ces températures, les raies en émission et en absorption dans une bande spectrale sont très corrélées car elles sont issues de bandes vibrationnelles similaires (v' et v'' proches d'une bande à l'autre). De ce fait le rapport $\eta_\sigma / \kappa_\sigma$ devient décorrélié de κ_σ et par conséquent décorrélié du produit $\kappa_\sigma \tau_\sigma$. Pour des déséquilibres plus extrêmes, cas des figures III.8 et III.9, l'hypothèse de décorrélation n'est plus valable car elle entraîne des erreurs importantes. Dans le cas ($T_r=20000 \text{ K}$ et $T_{ve}=3000 \text{ K}$) de la figure III.8, la

décorrélation des grandeurs $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $\kappa_\sigma\tau_\sigma$ peut engendrer des erreurs pouvant atteindre 200 à 300 %. Dans ce cas particulier où les bandes vibrationnelles sont très étalées et peu intenses en tête de bande, on retrouve dans une bande spectrale de 1000 cm^{-1} , des raies à très haut nombre rotationnel J qui peuvent venir de bandes très différentes, par exemple une raie d'une bande $v' \rightarrow v''$ avec v' le nombre vibrationnel de l'état du haut qui peut être grand ou petit. Cette configuration assure alors que les coefficients η_σ et κ_σ sont beaucoup moins corrélés que dans le cas précédent comme le montre la figure III.8 de droite ; le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ gardant ainsi une corrélation forte avec κ_σ et donc avec $\kappa_\sigma\tau_\sigma$. Les erreurs dues à la décorrélation peuvent être importantes mais dans cette situation le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ étant très faible (zone spectrale dans le VUV et T_{ve} à 3000 K), ce cas de figure n'engendre pas d'erreur significative dans un calcul réel de transfert. La situation inverse ($T_r=3000 \text{ K}$ et $T_{ve}=20000 \text{ K}$) de la figure III.9 est plus problématique puisque le niveau du rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ est cette fois très élevée. Dans ce cas, les bandes vibrationnelles sont très intenses mais peu étalées. Le mélange de bandes est peu important ce qui explique que η_σ et κ_σ soient corrélés comme dans le cas de la figure III.7 de droite. Cependant, la différence de température de vibration et de rotation est si grande (T_{ve} élevée et T_r faible) que la dynamique spectrale du rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ est très importante ; au vu de la relation III.44, elle est en effet pilotée dans ce cas par $\exp\left(\frac{E'_r - E''_r}{k_b T_r}\right)$ qui peut croître très rapidement d'une raie rotationnelle à une autre. La figure III.9 en haut à gauche montre la dynamique spectrale de $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ à comparer à celle de la figure III.7. Le rapport $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ est alors moins corrélé à κ_σ que dans le cas (20000-10000 K). L'hypothèse de décorrélation produit alors des erreurs pouvant atteindre 30 à 40% dans ces conditions. Ce dernier cas sort cependant du cadre de notre application puisque nous traitons des milieux en compression tels que $T_{ve} \leq T_r$ ou T_{ve} légèrement supérieur à T_r et non pas en détente où T_{ve} peut être beaucoup plus grand que T_r .

L'ensemble de ces résultats portant sur l'hypothèse de décorrélation entre les grandeurs $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $\kappa_\sigma\tau_\sigma$ a été vérifié sur tous les systèmes moléculaires optiquement épais dans notre étude et dans des cas réalistes de rentrée atmosphérique terrestre. La figure III.10 montre une de ces vérifications pour les systèmes N_2 (Birge-Hopfield 1) et NO (β) dans un cas fortement hors d'équilibre de la trajectoire de FIRE II (temps 1634 s) pour lequel les propriétés radiatives utilisées sont celles d'un point dans le choc, dont les calculs sont présentés dans le chapitre II.

- La deuxième étude a été faite pour tous les systèmes moléculaires optiquement épais sur des luminances en comparant l'effet de la décorrélation des grandeurs $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $(1 - \tau_\sigma)$. La figure III.11 montre par exemple le résultat pour les systèmes N_2 (Birge-Hopfield 2) et NO (δ) dans les mêmes conditions énoncées précédemment. L'hypothèse de décorrélation donne encore des résultats satisfaisants avec des différences de quelques pourcents lors de la comparaison les luminances cumulées et moyennées. La situation étudiée ici, en fort déséquilibre ($T_{ve} = 9800 \text{ K}$ et $T_r = 23300 \text{ K}$), est un des cas de rentrée où l'hypothèse de décorrélation a le plus de risque d'être mise en défaut.

L'ensemble des résultats montre des accords raisonnables entre les grandeurs précédentes (émission nette et luminance) calculées en tenant compte ou non d'éventuelles corrélations, et ceci quelque soit la longueur considérée pour évaluer τ_σ .

En conclusion, pour chaque système j lié-lié optiquement épais, nous utiliserons l'ap-

proximation de décorrélation suivante :

$$\frac{\overline{\eta_{\sigma}^j(z_i)}}{\overline{\kappa_{\sigma}^j(z_i)}} \frac{\overline{\partial \tau_{\sigma}^j(l \rightarrow l_w)}}{\partial l}^{\Delta\sigma} \simeq \frac{\overline{\eta_{\sigma}^j(z_i)}}{\overline{\kappa_{\sigma}^j(z_i)}}^{\Delta\sigma} \frac{\overline{\partial \tau_{\sigma}^j(l \rightarrow l_w)}}{\partial l}^{\Delta\sigma}. \quad (\text{III.45})$$

III.3.3 Formulation de l'ETR

Au terme de l'étude précédente sur les épaisseurs optiques des systèmes et des corrélations spectrales existant entre les différents processus et grandeurs radiatives caractérisant des milieux hors d'équilibre, la formulation de l'ETR adaptée à un modèle statistique à bandes étroites peut s'exprimer en terme de luminance moyennée par bande spectrale $\Delta\sigma$ provenant du chemin optique (l_0, l_w) comme :

$$\begin{aligned} \overline{L_{\sigma}(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} &= \overline{L_{\sigma}(l_0) \tau_{\sigma}(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \\ &+ \sum_j^{bb-epais} \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \frac{\overline{\eta_{\sigma}^j(z_i)}}{\overline{\kappa_{\sigma}^j(z_i)}}^{\Delta\sigma} \frac{\overline{\partial \tau_{\sigma}^j(l \rightarrow l_w)}}{\partial l}^{\Delta\sigma} \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_{\sigma}^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl \\ &+ \sum_j^{box} \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \overline{\eta_{\sigma}^j(z_i)}^{\Delta\sigma} \prod_{j'} \overline{\tau_{\sigma}^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl. \end{aligned} \quad (\text{III.46})$$

Quelques remarques concernant cette formulation :

Premièrement, dans le deuxième terme du membre de droite pour les systèmes optiquement épais, malgré une discrétisation en éléments homogènes, l'intégration sur la maille est indispensable car elle permet de tenir compte de son épaisseur optique. En effet, sur une maille et pour une contribution donnée, ce terme s'écrit :

$$\int_{l_{i-1}}^{l_i} \frac{\overline{\eta_{\sigma}^j(z_i)}}{\overline{\kappa_{\sigma}^j(z_i)}}^{\Delta\sigma} \frac{\overline{\partial \tau_{\sigma}^j(l \rightarrow l_w)}}{\partial l}^{\Delta\sigma} dl = \frac{\overline{\eta_{\sigma}^j(z_i)}}{\overline{\kappa_{\sigma}^j(z_i)}}^{\Delta\sigma} \left[\overline{\tau_{\sigma}^j(l_i \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} - \overline{\tau_{\sigma}^j(l_{i-1} \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \right]. \quad (\text{III.47})$$

Cependant la prise en compte de l'absorption des autres systèmes (*i.e.* le produit sur les j') ne permet pas d'écrire une formulation intégrée à moins d'assurer que les mailles soient suffisamment petites pour considérer les éléments (l_{i-1}, l_i) optiquement minces. Ceci est discuté dans la section III.6.1.

Ensuite, il est à noter que pour les atomes, il n'a pas été utile de tester l'hypothèse de décorrélation entre les moyennes de $\eta_{\sigma}/\kappa_{\sigma}$ et $\partial \tau_{\sigma}/\partial l$ puisque si l'on considère que le peuplement des états électroniques suit une distribution de Boltzmann à une température d'excitation T_{el} , le rapport $\eta_{\sigma}/\kappa_{\sigma}$ est égal alors à la fonction de Planck à T_{el} ramenant le problème à l'ETL. Si on considère par contre un peuplement hors d'équilibre à l'aide par exemple d'un modèle collisionnel-radiatif, on peut tout d'abord simplifier le problème en regroupant les niveaux électroniques par terme et traiter chaque terme comme espèce à part entière. L'hypothèse de décorrélation doit alors être testée pour chaque type de transition. Ce travail n'a pas été effectué car la construction d'un modèle statistique pour les raies atomiques et ioniques (cf. §III.4.3.4) n'a pas donné de résultats satisfaisants. L'approche raie par raie est par la suite mise en œuvre pour traiter le rayonnement atomique écartant par conséquent le problème des corrélations spectrales.

La formulation hybride de l'ETR (raie par raie pour les atomes et modèle de bandes pour les continua et les systèmes moléculaires) est détaillée dans la section III.6.1.

III.4 Formulation et construction d'un MSBE

Un modèle statistique à bandes étroites (MSBE) permet d'obtenir des transmittivités, moyennées par bandes spectrales, de colonnes uniformes ou non uniformes en fonction de paramètres pré-tabulés suivant les caractéristiques thermophysiques du milieu. Dans le cadre de notre étude, on s'intéresse à la formulation et à la construction d'un modèle de bandes pour les systèmes lié-lié optiquement épais indiqués dans le tableau III.1. Le cas particulier des systèmes moléculaires optiquement minces et des continua est traité simplement avec un box model.

La première étape de la construction d'un MSBE consiste à travailler avec des colonnes homogènes pour lesquelles à partir de l'équation III.30 on peut exprimer analytiquement les transmittivités suivant des hypothèses statistiques faites sur l'intensité et le profil des raies. De telles formulations analytiques basées sur différentes hypothèses existent dans la littérature et permettent d'exprimer les transmittivités moyennes en fonction seulement de quelques paramètres caractérisant l'absorption des raies sur une bande spectrale. Dans notre étude, le calcul de ces paramètres se fait ensuite par ajustement des courbes de croissance (notion abordée dans la section III.4.1) obtenues avec ces expressions analytiques sur des courbes de croissance issues du calcul raie par raie pour une condition thermophysique donnée. On s'intéressera dans un premier temps au choix de ces expressions analytiques qui dépendent du régime d'élargissement des raies à considérer (Lorentz, Doppler ou Voigt) et des hypothèses statistiques formulées sur la distribution des intensités des raies afin d'obtenir le meilleur ajustement possible des courbes de croissance. Cette étude présentée dans la partie III.4.1 constitue la formulation du MSBE en milieu uniforme. Le traitement de colonnes non uniformes se fait par la suite avec une extension de la formulation du MSBE aux cas hétérogènes. Ce point est discuté dans la section III.4.2.

Une partie importante de cette section est ensuite consacrée à la paramétrisation (températures, pression, grilles spectrales...) et à la construction du modèle. Dans le cadre de notre étude sur les rentrées atmosphériques terrestres à vitesse hypersonique, les niveaux de température et de pression atteints généralement dans la couche de choc sont de l'ordre de plusieurs milliers de Kelvin et quelques bars de pression [11, 12]. Nous nous sommes fixés comme limite de température et de pression 50000 K et 2 bar. Plus de détails sont données dans la section III.4.3.1.

Concernant la construction du modèle, pour les systèmes moléculaires optiquement minces et les continua, comme expliqué dans la section III.3.2, il suffit d'une tabulation des valeurs moyennes des coefficients d'absorption et d'émission. La paramétrisation de ces systèmes est discutée dans la section III.4.3.2. Pour les systèmes lié-lié optiquement épais, en plus de la tabulation de $\overline{\eta/\kappa}^{\Delta\sigma}$ et $\overline{\kappa}^{\Delta\sigma}$, une procédure systématique d'ajustement des courbes de croissance a été mise en place afin de déterminer les paramètres du MSBE permettant d'obtenir la transmittivité de colonnes homogènes. Ces travaux ont abouti à une tabulation exhaustive des paramètres utiles pour traiter tous les systèmes par bande spectrale (hormis pour les atomes) pour l'ensemble des conditions de température et de pression

rencontrées dans notre étude et qui est précisé dans la section III.4.3.2. La formulation et la construction du modèle laisse la possibilité d'utiliser un modèle collisionnel-radiatif ou une approche Boltzmannienne pour peupler les niveaux électroniques.

Les atomes, qui présentent contrairement aux autres systèmes lié-lié une faible densité spectrale de raies, sont un cas particulier de notre étude. Leur traitement est abordé dans la section III.4.3.4.

III.4.1 Formulation d'un MSBE en milieu uniforme

Dans la section III.2.2, l'équation III.30 donne l'expression générale de la transmittivité d'une colonne homogène moyennée sur une bande spectrale obtenue sans hypothèse sur les intensités des raies et le type de profil (Gaussien, Lorentz ou Voigt) qui caractérise toutes les raies. Son expression est rappelée ici :

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \exp\left(-\frac{\overline{W}}{\delta}\right). \quad (\text{III.48})$$

Cette expression a été obtenue en partie en considérant que les raies à l'intérieur d'une bande spectrale ont la même demi-largeur à mi-hauteur égale à γ_0 (hypothèse iii dans la section III.2.2). Compte tenu des expressions et des données utilisées pour déterminer les demi-largeurs (cf. §II.2.1.3) des différents processus d'élargissement de raies, de la largeur des bandes spectrales utilisée dans notre étude, à savoir 1000 cm^{-1} , et de la région spectrale occupée par les systèmes moléculaires optiquement épais à traiter (de l'UV au VUV), cette hypothèse s'avère justifiée quelque soit le type de profil à considérer.

La largeur de raie noire équivalente moyenne $\overline{W}$ s'exprime en fonction de la distribution des intensités des raies, $P(S)$, et de la largeur de raie noire équivalente d'une raie, $W(S)$:

$$\overline{W} = \int_0^\infty P(S)W(S)dS. \quad (\text{III.49})$$

Des expressions analytiques de $\overline{W}$ existent dans la littérature suivant le type de profil pour exprimer $W(S)$ et pour différentes distributions $P(S)$.

Dans un premier temps, pour déterminer le type de profil à considérer, nous avons déterminé les largeurs engendrées par les différents types d'élargissement (Doppler, collisionnel et prédissociatif pour certains systèmes). La figure III.12 donne l'évolution des demi-largeurs à mi-hauteur en fonction de la température pour deux systèmes dont l'état haut de la transition est prédissocié, N_2 (Birge-Hopfield 2) et NO (β). La largeur Doppler est estimée avec l'expression II.23 pour des nombres d'onde représentatifs du domaine spectral du système étudié. Les largeurs collisionnelles sont quant à elles estimées à l'aide des formules II.21 et II.19 pour différentes pressions rencontrées dans notre application. Les largeurs prédissociatives données diffèrent suivant les raies rotationnelles considérées [101] (on indique pour ces largeurs le nombre vibrationnel v' de l'état haut de la transition et le nombre rotationnel J' le cas échéant) et sont représentatives de l'ensemble des largeurs prédissociatives utilisées pour les deux systèmes. On remarque sur la figure de gauche que pour le système N_2 (Birge-Hopfield 2), le régime Doppler est dominant sur toute la gamme de température et de pression. Les figures III.13 de gauche illustrent ce résultat pour une condition de température et de pression donnée. On voit que le profil des raies est pilotée par le régime

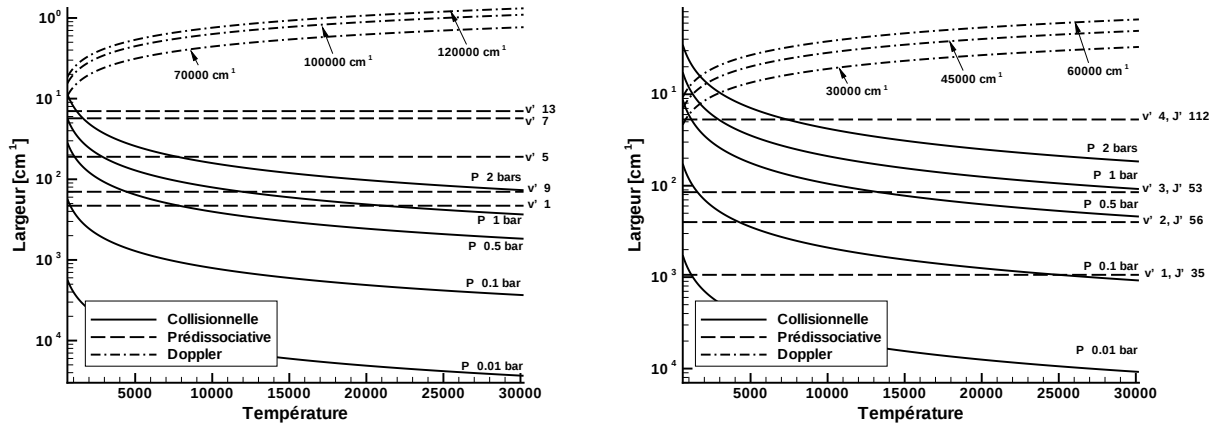


FIG. III.12: Largeur des raies par élargissement Doppler, collisionnel et prédissociatif pour le système N₂ (Birge-Hopfield 2) (à gauche) et le système NO (δ) (à droite).

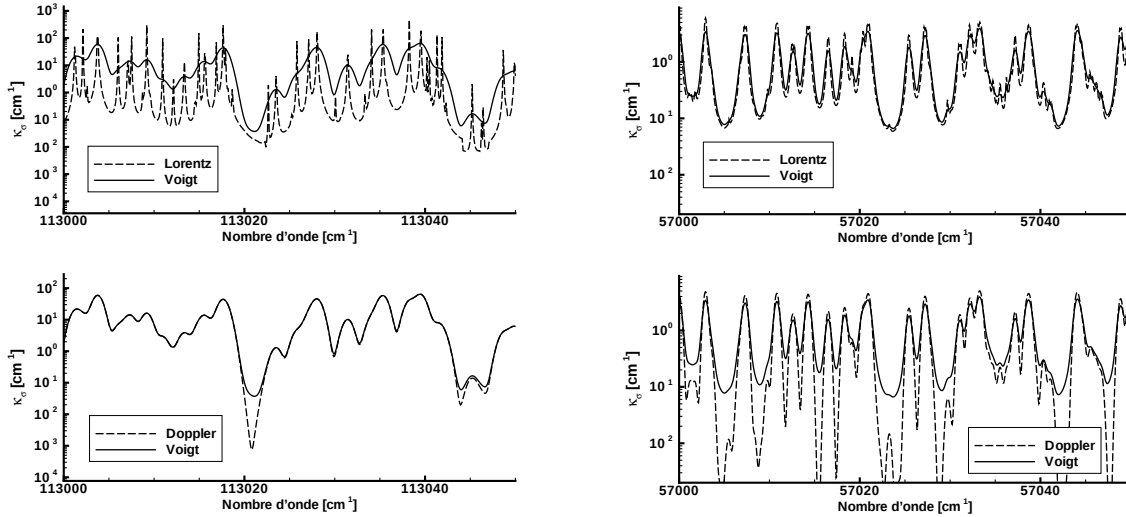


FIG. III.13: Parties de spectres des systèmes N₂ (Birge-Hopfield 2) (à gauche) et NO (δ) (à droite) suivant le type d'élargissement considéré. Pour les spectres à gauche la condition thermophysique est 1 bar, 80% de N₂ à 8000 K et à droite 2 bar, 20% de NO à 5000 K.

Doppler. On observe les mêmes résultats pour les autres systèmes de N₂ dans le VUV. Pour le système NO (δ) (figure III.12), le régime dominant est aussi le régime Doppler hormis à faible température (en dessous de 5000-6000 K) et haute pression où la largeur collisionnelle additionnée d'une largeur prédissociative significative peut donner une largeur Lorentzienne équivalente à la largeur Doppler. Dans cette situation, le régime d'élargissement de raies est plutôt de type Lorentz. En effet à largeur à mi-hauteur équivalente, un profil Lorentz s'étale plus qu'un profil Gaussien. Ce résultat est illustré par la figure III.13 où contrairement aux systèmes N₂ (VUV), le profil des raies est piloté essentiellement par l'élargissement collisionnel et prédissociatif. Ce résultat est commun à tous les systèmes moléculaires de NO considérés comme optiquement épais dans notre application (cf tableau III.1). Cette étude permet de caractériser le type de régime dominant qui peut être rencontré, en l'occurrence le régime Doppler pour tous les systèmes optiquement épais dans la majeure partie des

conditions thermophysiques rencontrées hormis les systèmes de NO et O_2 (SR) (non présenté ici) pour lesquels l'élargissement collisionnel et prédissociatif des raies est dominant à faible température et haute pression.

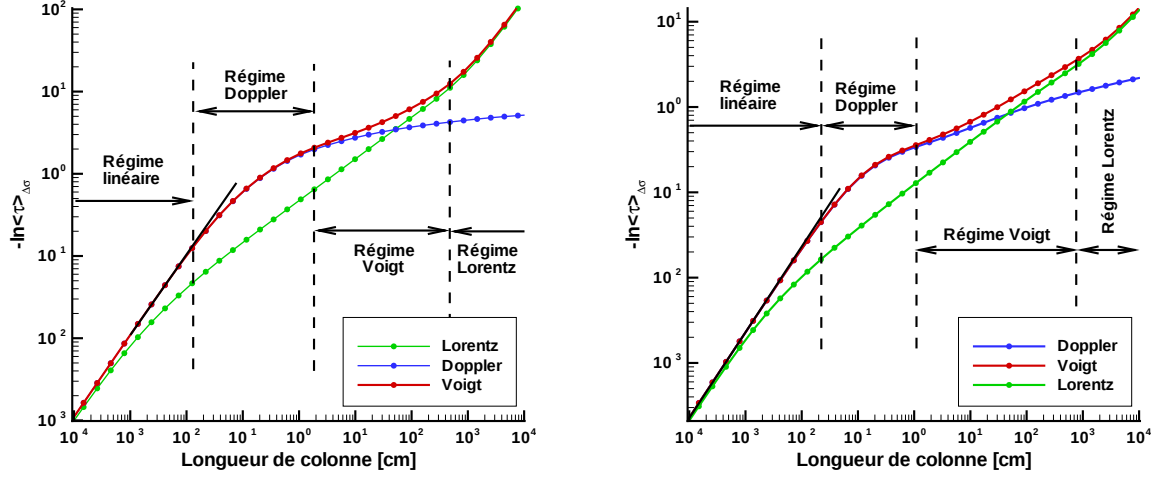


FIG. III.14: Courbes de croissance obtenues avec des calculs raie par raie en considérant un profil Doppler, Lorentz ou Voigt pour les systèmes N_2 (Birge-Hopfield 2) (bande spectrale $[113000-114000] \text{ cm}^{-1}$) à gauche et N_2 (Carroll-Yoshino) (bande spectrale $[112000-113000] \text{ cm}^{-1}$) à droite. La condition thermophysique est celle de la figure III.13 de gauche.

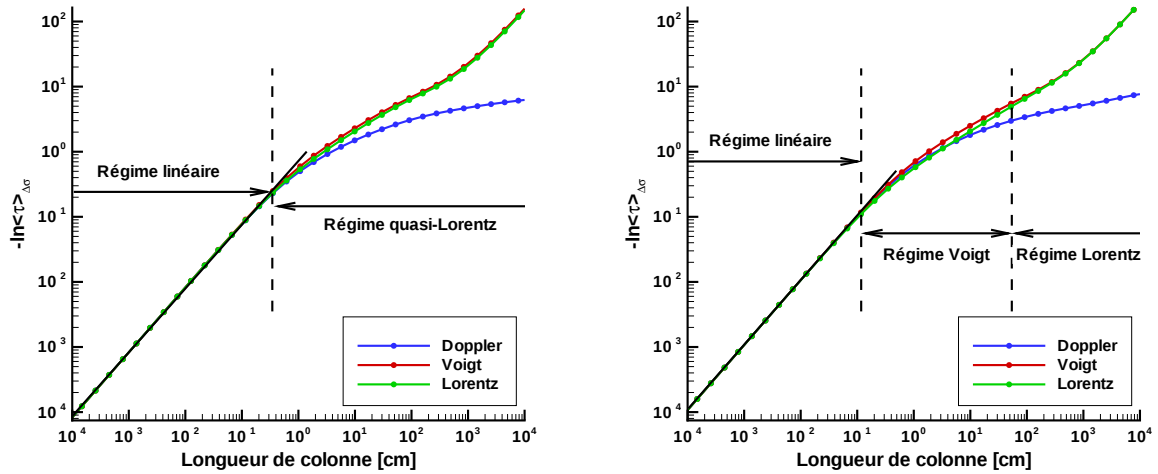


FIG. III.15: Courbes de croissance obtenues avec des calculs raie par raie en considérant un profil Doppler, Lorentz ou Voigt pour les systèmes NO (δ) (bande spectrale $[57000-58000] \text{ cm}^{-1}$) à gauche et NO (β) (bande spectrale $[64000-65000] \text{ cm}^{-1}$) à droite. La condition thermophysique est celle de la figure III.13 de droite.

Pour aller plus loin, il est nécessaire d'étudier l'absorption des systèmes en fonction de l'épaississement du milieu (en longueur ou en densité), afin de déterminer le type d'élargissement à considérer lors de la saturation progressive des raies en absorption (le régime dominant ne donnant, lui, qu'une information partielle sur les phases d'absorption). Pour

ce faire, il est utile de tracer des courbes de croissance qui donnent l'évolution (du logarithme) de la transmittivité moyennée par bande spectrale en fonction de l'épaisseur d'une colonne homogène. Les figures III.14 et III.15 représentent des courbes de croissance pour les systèmes N_2 (Birge-Hopfield et Carroll-Yoshino) et NO (δ et β) pour des conditions thermophysiques respectivement identiques à celles de la figure III.13 ainsi que des zones spectrales semblables.

Pour les systèmes de N_2 , la courbe présente une évolution typique, avec tout d'abord un régime linéaire indiquant une absorption dite « en mince » ou « faible » indiquant soit que l'épaisseur optique $\kappa_\sigma l$ de la colonne reste faible comparée à 1 telle que $\exp(-\kappa_\sigma l)$ puisse être linéarisé ou soit que le spectre d'absorption présente une faible dynamique spectrale due à des largeurs de raies importantes telles que $\kappa_\sigma \approx cte$ sur la bande spectrale (les deux cas peuvent être rencontrés pour une même bande). Dans les deux cas, on obtient :

$$-\ln(\bar{\tau}^{\Delta\sigma}(l)) = -\ln\left(\frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} \exp(-\kappa_\sigma l) d\sigma\right) \approx \bar{\kappa}_\sigma^{\Delta\sigma} l. \quad (\text{III.50})$$

La courbe présente ensuite une première inflexion due à l'absorption des raies dont le profil est pilotée par l'élargissement Doppler. La courbe passe ensuite par un régime de transition appelé régime Voigt où l'effet du profil Lorentz n'est plus négligeable devant l'effet Doppler. Dans la dernière partie de la courbe, correspondant à l'absorption des ailes de raies lointaines, la croissance est pilotée par le régime Lorentz.

Pour les systèmes de NO représentés sur la figure III.15, les courbes de croissance présentent, après la zone linéaire, un comportement dominé par le profil Lorentz puisque l'élargissement est essentiellement dû aux effets collisionnels (et prédissociatifs pour le systèmes NO (δ)). L'effet Doppler est légèrement discernable pour le système NO (β), pour lequel les premiers effets de l'absorption sont décrits par une transition Voigt peu prononcée. L'état haut du système NO (β) n'est pas prédissocié et la bande spectrale considérée favorise un peu plus les effets Doppler.

Les différents régimes rencontrés sur une courbe de croissance dépendent de la longueur de colonne limite à considérer. Dans notre cas d'étude, avec des couches de choc de l'ordre de 10 cm, les trajectoires optiques à envisager dans le plasma autour du corps de rentrée sont de l'ordre du rayon de nez du véhicule (de l'ordre de 2 m) pour des pressions pouvant avoisiner 2 bar (derniers points de trajectoires où la vitesse est encore significative pour que le rayonnement influe sur l'échauffement de la paroi de l'engin, par exemple le temps de vol 1648 s de l'expérience FIRE II, cf. §II.3). Les épaisseurs maximales des colonnes à traiter sont donc suffisamment importantes pour que la transition Voigt des systèmes N_2 (VUV) soit atteinte. La figure III.14 montre qu'à partir de quelques centimètres (pour une colonne à 8000 K, 1 bar et 80% de N_2) les effets Voigt commencent à être significatifs. La représentation étant en $-\ln(\tau)$, une faible variation de la courbe de croissance peut entraîner une erreur importante sur la transmittivité. Pour les systèmes moléculaires de NO , les épaisseurs de colonne à envisager sont également suffisantes pour devoir prendre en compte systématiquement le régime Voigt, ce qui permet de représenter l'effet Doppler (dominant à température relativement élevée) mais aussi le régime Lorentz mis en évidence à plus basse température pour ces systèmes. Cette étude permet de caractériser le profil des raies à utiliser, en l'occurrence le profil Voigt, afin de reproduire correctement l'absorption des systèmes moléculaires en fonction de l'épaisseur des colonnes à traiter.

Une fois le type de profil déterminé, supposé identique pour toutes les raies d'une bande

spectrale, une deuxième hypothèse concerne la fonction de distribution des intensités des raies $P(S)$. Plusieurs fonctions de distributions sont proposées dans la littérature. Dans le cadre de cette étude trois fonctions de distributions ont été testées. Elles correspondent aux fonctions utilisées également dans la formulation du modèle MSBE développé par Rivière *et al.* [96] pour le mélange CO_2/CO . Il s'agit de :

- la loi de distribution uniforme :

$$P(S) = \widehat{\delta}(S - \bar{S}), \quad (\text{III.51})$$

où $\widehat{\delta}$ est la fonction de Dirac et $\bar{S}$ l'intensité moyenne des raies qui est dans ce cas égale à l'intensité de toutes les raies.

- la loi de distribution exponentielle introduite par Goody [124] :

$$P(S) = \frac{1}{\bar{S}} \exp\left(-\frac{S}{\bar{S}}\right), \quad (\text{III.52})$$

- la loi de distribution inverse exponentielle tronquée, due à Malkmus [138] :

$$P(S) = \frac{1}{\bar{S} \ln R} \left[\exp\left(-\frac{S}{S_{\max}}\right) - \exp\left(-\frac{RS}{S_{\max}}\right) \right], \quad (\text{III.53})$$

où R est un paramètre représentatif du rapport de l'intensité maximum sur l'intensité minimum $S_{\max}/S_{\min}$. Par la suite, on utilisera l'hypothèse $R \gg 1$ afin de simplifier les développements faisant intervenir cette loi de distribution.

L'expression du profil Voigt donnée par la relation II.25 ne permet pas d'obtenir une formulation analytique de $\overline{W}_V/\delta$ relativement aisée à mettre en œuvre à l'aide de la relation III.29 et ce quelque soit la loi de distribution des intensités des raies utilisée. Pour pallier ce problème, des formules approchées de $\overline{W}_V/\delta$ ont été proposées dans la littérature faisant intervenir $\overline{W}_D$ et $\overline{W}_L$, ces deux largeurs étant respectivement les largeurs de raies noires équivalentes moyennes pour des raies purement Doppler et Lorentz. On peut cependant citer tout de même les travaux de Fels [139] et de Zhu [140] qui ont utilisé des formules approchées du profil Voigt en considérant le centre des raies comme rectangulaire (Fels) ou parabolique (Zhu) et les ailes de raie par une forme en $1/\sigma^2$ pour exprimer directement $\overline{W}_V/\delta$. Néanmoins, la mise en œuvre de leurs approches pour la formulation d'un MSBE ne conduit pas à une meilleure précision par rapport à l'utilisation de modèle combinant $\overline{W}_D$ et $\overline{W}_L$. On s'est donc intéressé par la suite aux formulations disponibles dans la littérature de ces deux dernières largeurs afin d'exprimer le rapport $\overline{W}_V/\delta$ et ainsi remonter à l'expression de la transmittivité moyenne donnée par la relation III.48.

III.4.1.1 Profil de raie Lorentz

L'expression du profil Lorentz d'une raie centrée en σ_c de demi-largeur à mi-hauteur γ_L s'écrit :

$$f(\sigma - \sigma_c) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{\gamma_L^2 + (\sigma - \sigma_c)^2}. \quad (\text{III.54})$$

La combinaison des relations III.54, III.26 et III.49 en supposant une largeur de raie constante égale à γ_{0L} , permet d'obtenir l'expression du rapport $\overline{W}_L/\delta$ pour un ensemble

de raies Lorentz et pour chaque loi de distribution $P(S)$. Les expressions qui en résultent sont :

- Pour la loi de distribution uniforme donnée par l'expression III.51 :

$$\frac{\overline{W}_L}{\delta} = 2\pi\overline{\beta}_L L\left(\frac{xpl\overline{k}}{2\pi\overline{\beta}_L}\right), \quad (\text{III.55})$$

où L est la fonction de Ladenburg-Reiche définie par $L(x) = xe^{-x}[I_0(x) + I_1(x)]$ (cf. [124]) où I_0 et I_1 sont les fonctions de Bessel de 1^{re} espèce modifiée d'ordre 0 et 1.

- Pour la loi de distribution exponentielle donnée par l'expression III.52 :

$$\frac{\overline{W}_L}{\delta} = \frac{xpl\overline{k}}{\sqrt{1 + \frac{xpl\overline{k}}{4\overline{\beta}_L}}}. \quad (\text{III.56})$$

- Pour la loi de distribution inverse exponentielle tronquée donnée par l'expression III.53 :

$$\frac{\overline{W}_L}{\delta} = 2\overline{\beta}_L \left(\sqrt{1 + \frac{xpl\overline{k}}{\overline{\beta}_L}} - 1 \right). \quad (\text{III.57})$$

L'ensemble des développements aboutissant à ces relations peuvent être trouvées dans [131]. Quelque soit la distribution considérée, ces expressions laissent apparaître que le comportement de $\overline{W}_L/\delta$ pour une bande spectrale ne dépend que de deux paramètres qui sont :

$$\overline{k} = \frac{\overline{S}}{\delta} \quad \text{et} \quad \overline{\beta}_L = \frac{\overline{\gamma}_L}{\delta}, \quad (\text{III.58})$$

dans lesquels $\overline{S}$ et $\overline{\gamma}_L$ sont l'intensité et la largeur moyenne des raies et δ un paramètre d'espacement défini par :

$$\delta = \delta \frac{\overline{S} \overline{\gamma}_L}{\left[(1/N) \sum_{i=1}^N \sqrt{\gamma_{L_i}, S_i} \right]^2} \quad (\text{III.59})$$

où N le nombre de raie. Le paramètre $\overline{k}$ s'apparente à un coefficient d'absorption réduit moyen *i.e.* $\overline{\kappa}^{\Delta\sigma}$ par unité de pression de l'espèce absorbante (en $\text{cm}^{-1}.\text{Pa}^{-1}$). Le paramètre $\overline{\beta}_L$ est un indicateur de chevauchement des raies, plus $\overline{\beta}_L$ est élevé et plus le recouvrement dans la bande spectrale est important. L'identification de ces paramètres est faite en étudiant les comportements asymptotiques de la formulation III.49 (déterminés en utilisant une loi $P(S)$ et une largeur des raies constante et égale à γ_{0_L} ⁴) et la formulation directe de $\overline{W}_L$ donnée par l'expression :

$$\overline{W}_L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N W_i(S_i, \gamma_{L_i}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_0^\infty \left[1 - \exp\left(-xpl S_i \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_{L_i}^2 + \sigma^2}\right) \right] d\sigma. \quad (\text{III.60})$$

⁴les expressions reliant γ_{0_L} à $\overline{\gamma}_L$ dépendent de la loi de distribution utilisée. Elles ne sont pas indiquées dans ce paragraphe mais sont disponibles dans Taine et Soufiani [131] en annexe A.

Les comportements asymptotiques correspondant aux limites d'absorption faible et forte sont communs aux expressions III.55, III.56 et III.57. Analytiquement, ils se formulent respectivement comme⁵

$$\frac{xpl\bar{k}}{\beta_L} \ll 1 \quad \implies \quad -\ln(\bar{\tau}^{\Delta\sigma}) = xpl\bar{k} \quad (\text{III.61})$$

$$\frac{xpl\bar{k}}{\beta_L} \gg 1 \quad \implies \quad -\ln(\bar{\tau}^{\Delta\sigma}) = 2\sqrt{xpl\bar{k} \beta_L}. \quad (\text{III.62})$$

Compte tenu des expressions III.58, les paramètres $\bar{k}$ et $\bar{\beta}_L$ peuvent être directement calculés à partir des bases de données spectroscopiques. Une autre alternative consiste à les déterminer par ajustement des courbes de croissance calculées avec une approche raie par raie (courbes théoriques) et avec les expressions données par le modèle. Pour le paramètre $\bar{k}$ qui est le coefficient d'absorption réduit de la bande spectrale considérée, on peut aussi le calculer en moyennant simplement, par bande spectrale, le coefficient d'absorption issu des calculs de spectre. C'est cette dernière méthode qui a été utilisée par la suite pour calculer $\bar{k}$. Pour le paramètre $\bar{\beta}_L$, c'est la détermination par ajustement des courbes de croissance théoriques qui a été retenue et mise en œuvre avec la méthode des moindres carrés. L'expérience [141, 142] montre que procéder par ajustement est une méthode plus précise que le calcul direct via la base de données spectroscopiques. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'elle minimise les erreurs intrinsèques de la formulation du modèle, en particulier celles engendrées par les lois de distribution des intensités des raies.

Pour déterminer parmi les expressions III.55, III.56 et III.57 de $\bar{W}_L/\delta$, quelle est celle permettant d'ajuster au mieux les courbes de croissance calculées en raie par raie (avec un profil Lorentz), plusieurs comparaisons d'ajustements et de transmittivités moyennes ont été réalisées pour différents systèmes et différentes conditions. Les figures III.16 et III.17 illustrent les résultats pour les systèmes Birge-Hopfield 2 et Carroll-Yoshino de N_2 à l'ETL ($T = 10000 \text{ K}$) pour 1 bar de N_2 pur. Les deux courbes de croissance des figures de gauche correspondent dans chaque cas aux bandes spectrales symbolisées par un « $\circ$ » sur les courbes de transmittivités moyennes (à droite). Une courbe caractérise le comportement d'une bande fortement absorbante (courbe de croissance supérieure) et l'autre le cas d'une bande moyennement absorbante. D'une manière générale, quelque soit la distribution utilisée, l'ajustement est relativement bon avec des comportements asymptotiques similaires. Les différences interviennent lorsque l'on quitte le régime d'absorption faible. Ces ajustements pour toutes les bandes spectrales de chaque système permettent d'obtenir les paramètres $\bar{\beta}_L$, qui sont ensuite utilisés avec les $\bar{k}$ pour obtenir les transmittivités moyennes de la colonne via les formules III.55, III.56 et III.57. Les figures de droite montrent une comparaison plus globale sur l'ensemble de la gamme spectrale du système pour quatre longueurs de colonnes. Sont indiqués sur ces figures, les écarts relatifs entre transmittivités théoriques (calcul raie par raie) et celles calculées avec le MSBE formulé en régime Lorentzien avec les trois lois de distribution. Les écarts ne dépassent pas 5 à 10% sur l'ensemble des bandes spectrales pour les deux systèmes pour des épaisseurs de colonnes allant jusqu'à 0.1 m.atm. Ces résultats, et l'ensemble des tests effectués sur d'autres systèmes montrent que l'utilisation de la loi de distribution de Malkmus (inverse exponentielle tronquée) conduit en général à de meilleurs accords entre les calculs raie par raie et ceux obtenus avec un modèle

⁵On notera que le comportement d'absorption faible correspond au régime linéaire des courbes de croissance correspondant à la relation III.50.

statistique formulé avec cette loi. Par la suite, on a donc utilisé la formulation III.57, pour modéliser l'absorption de raies en régime Lorentzien.

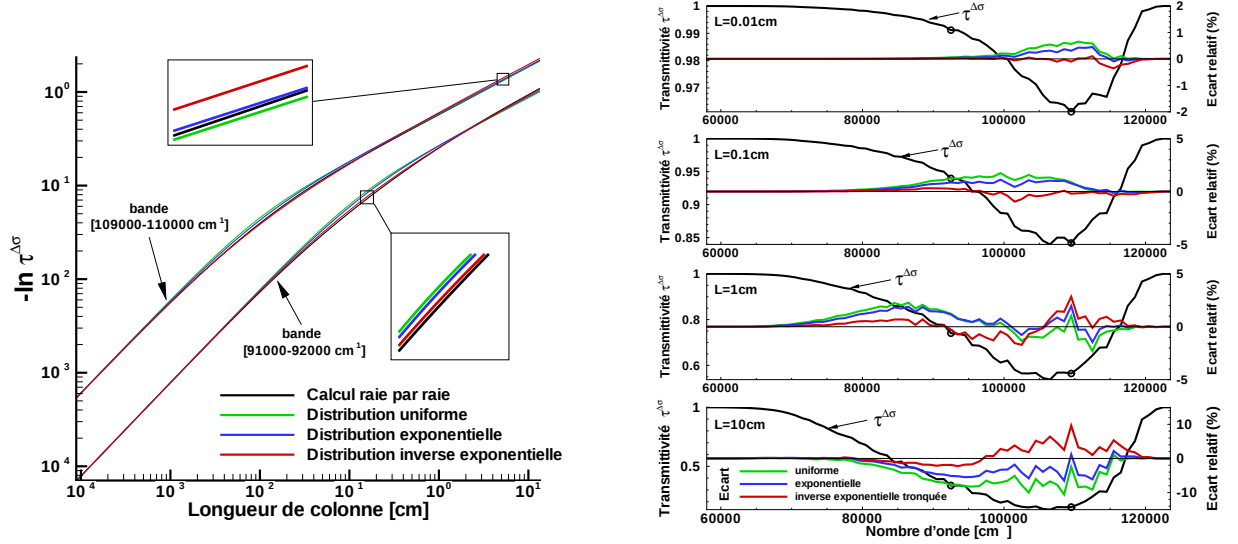


FIG. III.16: Ajustements de deux courbes de croissance (à gauche) en fonction de la loi de distribution utilisée pour un régime d'élargissement Lorentz des raies (ces courbes correspondent aux deux bandes spectrales symbolisées par des « o » sur les figures de droites). Transmittivités moyennées par bande spectrale (à droite) issues de calculs raie par raie pour une colonne homogène en fonction de sa longueur et écarts relatifs entre résultats obtenus avec l'approche raie par raie et un MSBE formulé en Lorentz pour les différentes lois de distribution. Résultats obtenus pour le système N₂ Birge-Hopfield 2 pour 1 bar de N₂ à l'ETL à 10000 K.

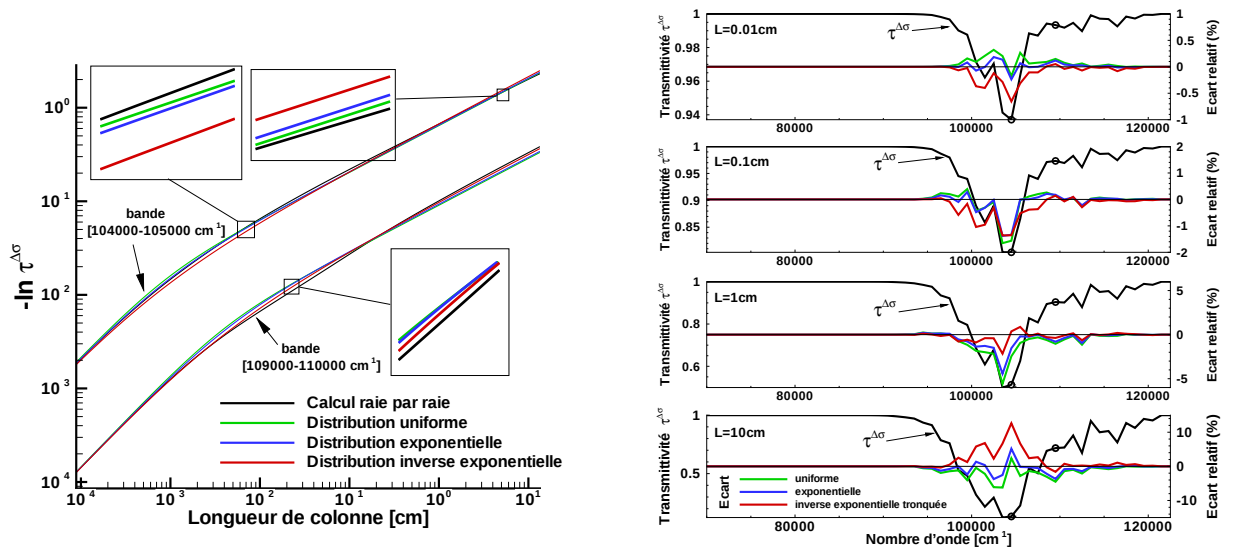


FIG. III.17: Figures similaires aux figures III.16 mais pour le système N₂ (Carroll-Yoshino).

III.4.1.2 Profil de raie Doppler

L'expression du profil Doppler, pour une raie de demi-largeur γ_D centrée en σ_c est donnée par :

$$f(\sigma - \sigma_c) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_D} \exp \left[- \frac{(\sigma - \sigma_c)^2 \ln 2}{\gamma_D^2} \right]. \quad (\text{III.63})$$

Différentes études dans la littérature, récapitulées dans [131], conduisent à exprimer le rapport $\overline{W_D}/\delta$ sous la forme :

- Pour la loi de distribution uniforme donnée par l'expression III.51 :

$$\frac{\overline{W_D}}{\delta} = \frac{\gamma_{0'_D}}{\delta} D \left(\frac{xpl\overline{S}/\delta}{\gamma_{0'_D}/\delta} \right). \quad (\text{III.64})$$

- Pour la loi de distribution exponentielle donnée par l'expression III.52 :

$$\frac{\overline{W_D}}{\delta} = \frac{\gamma_{0'_D}}{\delta} E \left(\frac{xpl\overline{S}/\delta}{\gamma_{0'_D}/\delta} \right). \quad (\text{III.65})$$

- Pour la loi de distribution inverse exponentielle tronquée donnée par l'expression III.53 :

$$\frac{\overline{W_D}}{\delta} = \frac{\gamma_{0'_D}}{\delta \ln R} H \left(\frac{xplS_{max}/(\delta \ln R)}{\gamma_{0'_D}/(\delta \ln R)} \right), \quad (\text{III.66})$$

où $\gamma_{0'_D} = \sqrt{\pi/\ln 2} \gamma_{0_D}$, γ_{0_D} étant la largeur de raie affectée à toutes les raies de la bande spectrale dans le cadre de l'hypothèse discutée au début de la section III.4.1. Les fonctions E, D et H sont définies par :

$$D(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1 - \exp(-ye^{-\xi^2}) \right] d\xi \quad (\text{III.67})$$

$$E(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ye^{-\xi^2}}{1 + ye^{-\xi^2}} d\xi \quad (\text{III.68})$$

$$H(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \left(1 + ye^{-\xi^2} \right) d\xi. \quad (\text{III.69})$$

Il est à noter que ces trois formulations ont un comportement asymptotique similaire (régime linéaire) en régime d'absorption faible, à savoir :

- Pour les lois de distribution uniforme et exponentielle :

$$\frac{xpl\overline{S}/\delta}{\gamma_{0'_D}/\delta} \ll 1 \quad \implies \quad -\ln(\overline{\tau}^{\Delta\sigma}) = xpl\frac{\overline{S}}{\delta}. \quad (\text{III.70})$$

- Pour la loi de distribution de Malkmus :

$$\frac{xplS_{max}/(\delta \ln R)}{\gamma_{0'_D}/(\delta \ln R)} \ll 1 \quad \implies \quad -\ln(\overline{\tau}^{\Delta\sigma}) = xpl\frac{S_{max}}{(\delta \ln R)}. \quad (\text{III.71})$$

Ceci permet l'identification du coefficient d'absorption réduit moyen de la bande spectrale de la même manière que pour la formulation en Lorentz :

$$\bar{k} = \frac{\bar{S}}{\delta} \text{ ou } \frac{S_{max}}{(\delta \ln R)} \text{ pour la distribution de Malkmus.} \quad (\text{III.72})$$

Cependant le comportement asymptotique en régime de forte absorption diffère suivant la loi de distribution considérée. Les expressions III.67, III.68 et III.69 donnent [128] :

$$D(y), E(y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} 2\sqrt{\pi}(\ln y)^{1/2} \quad (\text{III.73})$$

$$H(y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} \frac{4\sqrt{\pi}}{3}(\ln y)^{3/2}. \quad (\text{III.74})$$

Cette différence de comportement explique en partie pourquoi une identification directe du paramètre γ_{0D} (δ étant par ailleurs toujours égal à $\Delta\sigma/N$) en régime d'absorption forte telle qu'elle a été faite précédemment pour le cas Lorentz (pour $\bar{\beta}_L$) n'est pas envisageable ici. Une autre raison tient du fait qu'on ne sait pas écrire la moyenne donnée par la relation équivalente à la relation III.60 pour un profil Doppler, en régime de forte absorption et ce quelque soit la loi de distribution. Le rapport $\bar{W}_D/\delta$ s'exprime donc en fonction d'un deuxième paramètre non identifié dépendant de la distribution employée qui peut être rapporté également à un paramètre de chevauchement des raies Doppler $\bar{\beta}_D$ défini par :

$$\bar{\beta}_D = \frac{\gamma_{0D}'}{\delta} \text{ ou } \frac{\gamma_{0D}'}{(\delta \ln R)} \text{ pour la distribution de Malkmus.} \quad (\text{III.75})$$

Une manière approchée permettant d'obtenir une identification partielle consiste à utiliser le paramètre Lorentz $\bar{\delta}$ au travers des relations entre δ , $\bar{\delta}$, γ_{0L} et $\bar{\gamma}_L$ obtenues pour chaque distribution en régime d'absorption forte dans le cas Lorentz. L'insertion de ces relations dans les expressions Doppler III.64, III.65 et III.66 en considérant que les largeurs effective et moyenne γ_{0L} et $\bar{\gamma}_L$ sont égales permettent d'obtenir une expression commune du paramètre $\bar{\beta}_D$ [143] :

$$\bar{\beta}_D = \frac{\gamma_{0D}'}{\pi\bar{\delta}}. \quad (\text{III.76})$$

À noter que $\bar{\beta}_D$ dépend toujours de γ_{0D}' i.e. de γ_{0D} qui reste la largeur à mi-hauteur Doppler supposée constante sur toute la bande. Cette méthode, en se fixant une largeur de raie γ_{0D} permet de calculer les paramètres du modèle en utilisant une base de données spectroscopiques. À titre d'exemple, on peut citer les travaux de Rivière *et al.* [143] qui ont mis en œuvre cette méthode. Dans notre cas d'étude, ce n'est pas cette procédure qui a été retenue. La détermination du paramètre $\bar{\beta}_D$ se fait comme pour le cas Lorentz, par ajustement des courbes de croissance théoriques. Le paramètre $\bar{k}$ est calculé également en moyennant simplement, par bande spectrale, le coefficient d'absorption issu des calculs raie par raie. Afin de déterminer quelle loi de distribution conduit aux meilleurs ajustements et donc à la meilleure évaluation de $\bar{\beta}_D$, on a procédé aux mêmes types de comparaisons que pour le cas Lorentz vu dans la section précédente. Les figures III.18 et III.19 montrent les résultats pour les systèmes N_2 (Worley-Jenkins) et NO (β). Dans chaque cas, deux courbes de croissance sont également représentées pour une bande fortement absorbante et une autre un peu moins absorbante dont les positions spectrales sont indiquées par des cercles noirs sur les figures de transmittivités. De manière générale, on constate que

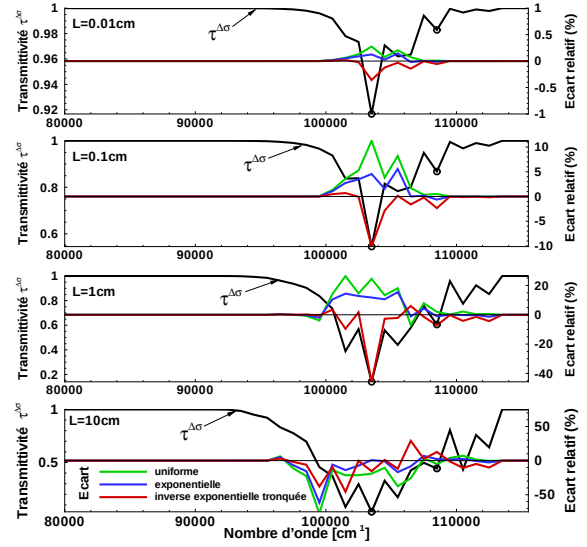
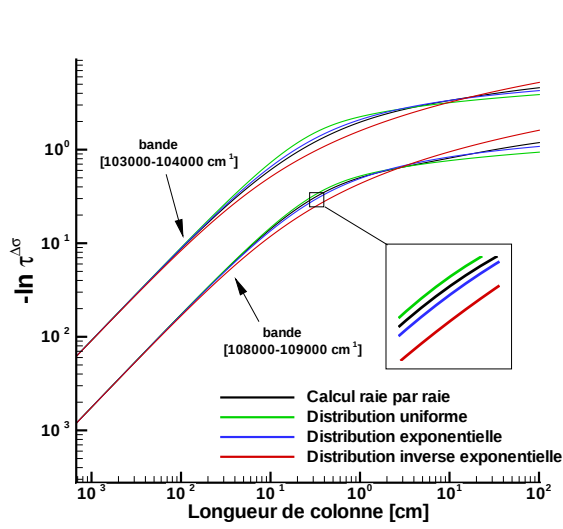


FIG. III.18: Ajustements de deux courbes de croissance (à gauche) en fonction de la loi de distribution utilisée pour un régime d'élargissement Doppler des raies (ces courbes correspondent aux deux bandes spectrales symbolisées par des « o » sur les figures de droites). Transmittances moyennées par bande spectrale (à droite) issues de calculs raie par raie pour une colonne homogène en fonction de sa longueur et écarts relatifs entre résultats obtenus avec l'approche raie par raie et un MSBE formulé en Doppler pour les différentes lois de distribution. Résultats obtenus pour le système N_2 Worley-Jenkins pour 1 bar de N_2 à l'ETL à 10000 K.

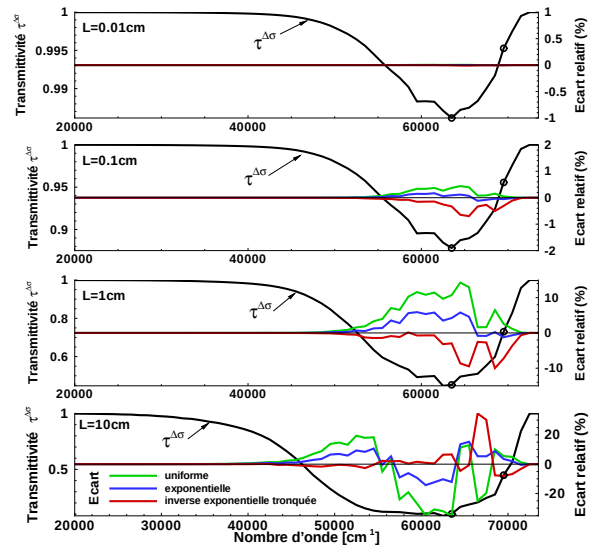
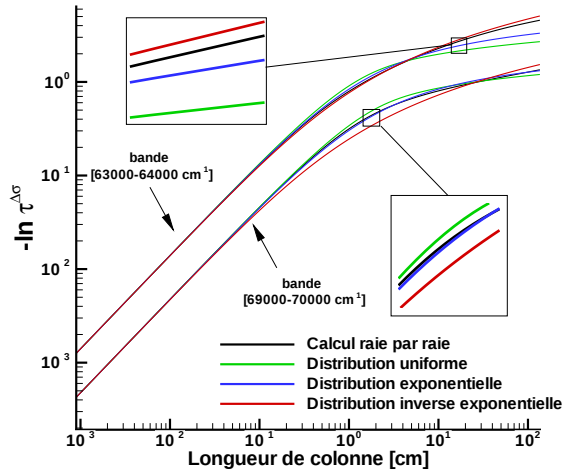


FIG. III.19: Figure similaire à la figure III.18 mais pour le système NO (β) à 7000 K et 1 bar.

quelque soit le type de distribution considéré, les ajustements sont moins précis que pour le cas Lorentz. Ceci est en partie dû à des comportements asymptotiques qui diffèrent du cas réel en régime de forte absorption et ce quelque soit la formulation du modèle employée (cf. relations III.73 et III.74). Il n'y a pas de comportement clairement établi en régime de forte absorption pour les calculs raie par raie. Suivant la bande spectrale, la fonction H peut alors mieux représenter l'évolution de $-\ln(\bar{\tau}^{\Delta\sigma})$ que les fonctions E et D ou inversement. Ces différences de comportement expliquent les écarts plus importants,

par rapport au cas Lorentz, observés pour les comparaisons de transmittivités moyennes sur les figures de droite avec des écarts pouvant aller dans certains cas extrêmes jusqu'à 50% . Sur l'ensemble des ajustements et des comparaisons réalisés, nous avons retenu la loi de distribution exponentielle (fonction E) qui permet d'obtenir de meilleurs résultats sur la première phase d'absorption Doppler (fin du comportement linéaire). En effet, il est important en pratique d'ajuster au mieux essentiellement la première partie de la courbe de croissance pour représenter l'effet Doppler, puisqu'étant en réalité en régime Voigt, le régime de forte absorption correspondant à l'absorption par les ailes de raie, est piloté par le rapport W_L/δ . Par la suite, pour déterminer le rapport $\overline{W_D}/\delta$, on utilise par conséquent la formulation III.65 obtenue avec la loi de distribution exponentielle.

III.4.1.3 Profil de raie Voigt

Comme énoncé précédemment, il n'existe pas de formulation analytique dans le cas où les raies présentent un profil Voigt, ce qui est notre cas d'étude. Des approximations de $\overline{W_V}$ sont généralement utilisées dans la littérature en combinant les largeurs équivalentes Lorentz $\overline{W_L}$ et Doppler $\overline{W_D}$. On peut citer les deux approximations communément employées dans la littérature issues d'une part des travaux de Crisp *et al.* [144] :

$$\frac{\overline{W_V}}{\delta} = \left[\left(\frac{\overline{W_L}}{\delta} \right)^2 + \left(\frac{\overline{W_D}}{\delta} \right)^2 - \left(\frac{1}{xpl\bar{k}} \frac{\overline{W_L}}{\delta} \frac{\overline{W_D}}{\delta} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{III.77})$$

et d'autre part de ceux de Ludwig *et al.* [137] :

$$\frac{\overline{W_V}}{\delta} = xpl\bar{k} \sqrt{1 - \Omega^{-1/2}}$$

$$\Omega = \left[1 - \left(\frac{1}{xpl\bar{k}} \frac{\overline{W_D}}{\delta} \right)^2 \right]^{-2} + \left[1 - \left(\frac{1}{xpl\bar{k}} \frac{\overline{W_L}}{\delta} \right)^2 \right]^{-2} - 1 \quad (\text{III.79})$$

À noter que pour ces relations, on retrouve le comportement asymptotique en régime d'absorption faible du cas Lorentz ou Doppler, en l'occurrence le comportement linéaire. De plus le comportement en régime de forte absorption est celui du cas Lorentz puisque le régime asymptotique en Lorentz ($\propto \sqrt{l}$) domine celui du cas Doppler qui est au mieux proportionnel à $(\ln l)^{3/2}$ (fonction H, relation III.74). Ces comportements sont bien en accord avec ceux représentés sur les courbes de croissance des figures III.14 et III.15 obtenues avec des calculs raie par raie et avec le fait qu'en régime de forte absorption, ce sont les ailes de raies Lorentziennes qui pilotent l'absorption.

Les deux expressions III.77 et III.78 combinant les rapports $\overline{W_D}/\delta$ et $\overline{W_L}/\delta$ permettent ainsi d'exprimer la transmittivité moyenne donnée par l'équation III.48 en régime Voigt en fonction seulement de trois paramètres, les paramètres du MSBE : $\bar{k}$, $\overline{\beta_L}$ et $\overline{\beta_D}$ définis dans les deux sections précédentes III.4.1.1 et III.4.1.2. Dans le cadre de la construction d'un modèle de bandes pour la vapeur d'eau en régime Voigt, Rivière *et al.* [143] ont montré que la formulation III.78 de Ludwig donnait de meilleurs résultats que celle de Crisp *et al.* (relation III.77). Dans notre étude, nous avons également considéré cette formulation. Concernant la détermination du paramètre $\bar{k}$, qui est commun aux deux formulations en Lorentz et en Doppler, il est calculé, comme indiqué précédemment, en moyennant les

spectres d'absorption par bande. Les deux autres paramètres $\overline{\beta_L}$ et $\overline{\beta_D}$ qui quantifient le chevauchement des raies (appelés aussi paramètres de structure fine), caractérisant ainsi l'évolution de l'absorption des raies en fonction de l'épaisseur optique parcourue, sont déterminés à travers une procédure d'ajustement systématique à deux paramètres de courbes de croissance théoriques obtenues avec des calcul raie par raie prenant en compte un profil Voigt. Cette procédure est exposée dans la section III.4.3.2.

III.4.1.4 Comportement asymptotique extrême

Le comportement asymptotique en Voigt donné par le modèle MSBE d'une courbe de croissance en régime d'absorption forte correspond à celui du régime asymptotique en Lorentz ($\propto \sqrt{l}$). Celui-ci est caractérisé par une pente 1/2 sur le tracé des courbes de croissance en échelle logarithmique (cf. les figures III.16 et III.17 de gauche par exemple). Or, les calculs raie par raie montrent qu'en réalité le comportement asymptotique en régime de très forte absorption suit tout d'abord la loi en $\sqrt{l}$ mais finit par un comportement linéaire en l . Ceci est illustré sur les figures III.14 et III.15.

Cette différence de comportement est à imputer à l'hypothèse iv (cf. §III.2.2 (partie MSBE)) faite lors de la formulation du modèle qui consiste à approcher :

$$\begin{aligned} \int_{\Delta\sigma} [1 - \exp(-x_s p l S_i f(\sigma - \sigma_i))] d\sigma &\approx \int_0^\infty [1 - \exp(-x_s p l S_i f(\sigma - \sigma_i))] d\sigma \\ &= W_i(S_i, \gamma_i), \end{aligned} \quad (\text{III.80})$$

en considérant, (i) soit que dans chaque bande spectrale $\Delta\sigma$, l'effet de l'absorption des raies situées à l'extérieur de la bande est supposé négligeable et les largeurs des raies appartenant à $\Delta\sigma$ sont suffisamment petites devant l'intervalle $\Delta\sigma$ pour s'assurer que l'absorption de ces raies se produise uniquement dans la bande, (ii) soit que l'intervalle spectral $\Delta\sigma$ est entouré d'une infinité de bandes spectrales caractérisées par les mêmes propriétés statistiques sur les raies (tout ce qui « sort » est alors égale à tout ce qui « rentre »).

Cependant lorsque l devient très grand, cette approximation est mise à mal puisque W_i diverge avec l alors que le membre de gauche de la relation III.80 tend vers $\Delta\sigma$. La différence de comportement des courbes de croissance peut alors s'expliquer par l'effet de la troncature de la zone spectrale considérée pour évaluer la transmittivité moyenne qui entraîne la saturation de la bande en régime de très forte absorption.

Deux cas de figures peuvent alors être considérés afin de tenir compte de cet effet de troncature :

1) soit on considère que l'effet de l'absorption des raies centrées à l'extérieur de la bande spectrale est négligeable (tout ce qui « sort » n'est alors pas égal à tout ce qui « rentre »). Cette hypothèse différente de l'hypothèse iv) de la section III.2.2 mène à utiliser une largeur noire équivalente tronquée W_i^* :

$$W_i^*(S_i, \gamma_i) = \int_{\Delta\sigma} [1 - \exp(-x_s p l S_i f(\sigma - \sigma_i))] d\sigma. \quad (\text{III.81})$$

2) soit on se place dans le cadre de l'hypothèse iv) sauf que cette fois la prise en compte

des ailes extérieures est faite sur une intégrale finie via la relation :

$$W_i^*(S_i, \gamma_i) = \int_{\Delta\sigma} \left[1 - \exp \left(-x_{spl} S_i \sum_{j=-\infty}^{\infty} f(\sigma - \sigma_i + j\Delta\sigma) \right) \right] d\sigma. \quad (\text{III.82})$$

Ce qui diffère dans cette formulation par rapport à l'expression classique de W_i III.26, c'est le fait que le continuum des raies extérieures est bien considéré dans la bande étudiée.

Pour illustrer le cas 1 dans un cas simple, la figure III.20 de droite montre une courbe de croissance dans le cas d'une raie centrée et isolée en régime Lorentz (figure III.20 de gauche) issue d'un calcul raie par raie. La courbe de croissance présente un changement de pente (de $1/2$ à 1) lorsque la longueur de colonne atteint 10 cm dans ce cas-ci.

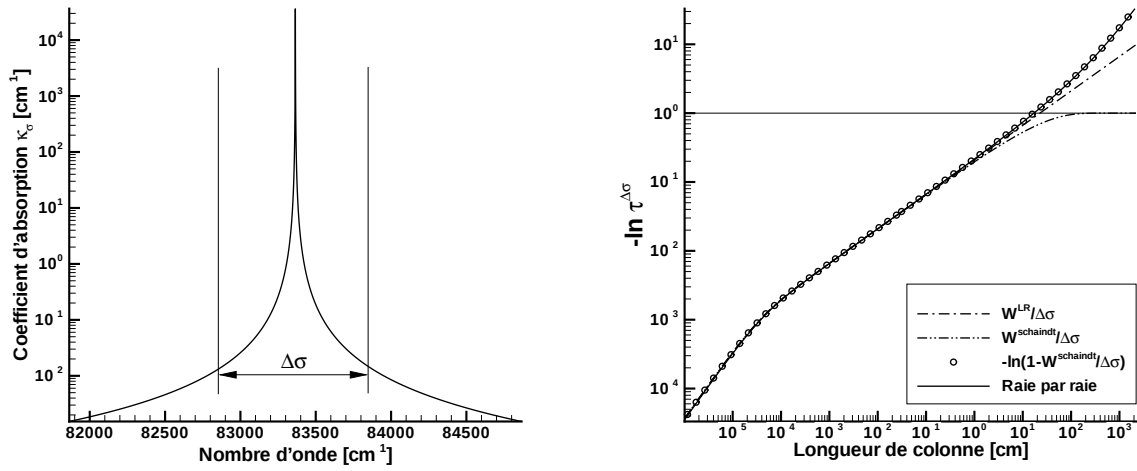


FIG. III.20: Effet de la troncature d'une bande spectrale $\Delta\sigma = 1000 \text{ cm}^{-1}$ sur les courbes de croissance. La figure de gauche indique le spectre d'une raie atomique de N à 10000 K , 1 bar (80% de N , 20% d'électrons), en négligeant l'élargissement Doppler. La figure de droite indique l'évolution de la courbe de croissance de cette raie sur la bande $\Delta\sigma$ avec des calculs en raie par raie et des calculs issus de différentes modélisations.

Nous avons tracé sur la figure III.20 de droite, la courbe de croissance obtenue avec le modèle classique *i.e.* avec l'expression :

$$\overline{\tau}_\sigma^{\Delta\sigma}(l) = \exp \left(-\frac{W}{\Delta\sigma} \right), \quad (\text{III.83})$$

dans laquelle W est assimilé à l'expression de W_i III.26 avec un profil Lorentz. Dans ce cas, la courbe de croissance est pilotée par la fonction de Ladenburg-Reiche (LR) telle que [131] :

$$-\ln(\overline{\tau}^{\Delta\sigma}) = \frac{W^{LR}}{\Delta\sigma} = 2\pi y L(u), \quad (\text{III.84})$$

avec

$$y = \frac{\gamma_L}{\Delta\sigma} \quad \text{et} \quad u = \frac{xplS}{2\pi\gamma_L}, \quad (\text{III.85})$$

où γ_L est la largeur de la raie et S son intensité de la raie. La figure indique la différence de comportement asymptotique observée entre le calcul raie par raie et la relation III.84 qui ne tient pas compte de l'effet de la troncature.

Avec un modèle de raie tronquée, la transmittivité moyenne d'une raie tronquée peut s'écrire comme :

$$\bar{\tau}^{\Delta\sigma} = 1 - \frac{W^*}{\Delta\sigma}, \quad (\text{III.86})$$

où W^* est la largeur de raie noire équivalente tronquée donnée par la relation III.81. Dans le cas simple d'une raie centrée en régime Lorentz, Schaindt [128] parvient à la formulation suivante de cette largeur nommée par la suite $W^{Schaindt}$:

$$W^{Schaindt} = \int_{-\frac{\Delta\sigma}{2}}^{\frac{\Delta\sigma}{2}} [1 - \exp\left(-\frac{1}{\pi} \frac{xplS\gamma_L}{\gamma_L^2 + \sigma^2}\right)] d\sigma \quad (\text{III.87})$$

$$= 2\pi y L(u) - [1 - \exp(-8uy^2)] - (8\pi uy^2)^{1/2} \text{erf}[2y(2u)^{1/2}], \quad (\text{III.88})$$

valable dans le cas où $y \ll 1$ ce qui est généralement le cas. Sur la figure III.20 de droite, on remarque que la représentation de la courbe de croissance avec la relation $-\ln(\bar{\tau}^{\Delta\sigma}) = -\ln(1 - W^{Schaindt}/\Delta\sigma)$, permet de reproduire le comportement réel de la courbe.

Par ailleurs, le tracé de $W^{Schaindt}/\Delta\sigma$ sur cette même figure permet de voir que la déviation à la loi en racine se produit lorsque la raie se sature *i.e.* lorsque W^* tend vers $\Delta\sigma$.

Dans le cas 2, la formulation III.82 de W^* est équivalente à considérer un modèle régulier type Elsasser [122] pour tenir compte du continuum des raies extérieures. Dans cette situation, il est montré par Goody [128] (équation 4.98) qu'en régime asymptotique de très forte absorption ($u \rightarrow +\infty$) la courbe de croissance est pilotée par la relation :

$$-\ln(\bar{\tau}^{\Delta\sigma}) = -\ln\left(\text{erfc}[\pi y(2u)^{1/2}]\right) \approx 2\pi^2 y^2 u, \quad (\text{III.89})$$

preuve du comportement asymptotique linéaire.

Dans les deux cas de figure, l'utilisation des expressions III.81 et III.82 de la largeur W_i permettent dans le cas très simple d'une raie centrée en régime Lorentz de reproduire ce comportement linéaire observé sur les courbes de croissance. Une démonstration complète dans le cas d'un ensemble de raies distribuées en position et en intensité de manière aléatoire n'a pas été effectuée. Mais compte tenu des résultats précédents, l'effet de la troncature lors de la saturation des bandes est certainement responsable de ce comportement linéaire. En pratique, la déviation par rapport à la loi en racine est observée pour des épaisseurs (produit xpl) très importantes, *i.e.* au-delà de 10 m.atm pour les systèmes moléculaires ce qui ne sera jamais atteint dans notre d'étude. Il est à noter de plus que pour de telles épaisseurs la transmittivité est de l'ordre de 10^{-10} *i.e.* quasiment zéro en pratique. Il importe alors peu d'avoir une précision significative du modèle par rapport aux calculs raie par raie dans ce cas-là. C'est pourquoi la formulation traditionnelle du MSBE est utilisée dans notre cas d'étude. Cependant lors du calcul des paramètres du modèle par ajustement des courbes de croissance, un soin particulier a été apporté afin que ce comportement linéaire, non reproductible analytiquement par le modèle, ne vienne parasiter et influencer la précision obtenue sur les ajustements réalisés sur les premières parties des courbes.

III.4.2 Formulation du MSBE en milieu non uniforme

Dans un milieu anisotherme et hétérogène discrétisé en colonnes homogènes (cf. figure III.1), la transmittivité monochromatique de deux éléments différents et uniformes peut

s'écrire en fonction de la transmittivité de chaque élément :

$$\tau_\sigma(l_{i-1} \rightarrow l_{i+1}) = \tau_\sigma(l_{i-1} \rightarrow l_i) \tau_\sigma(l_i \rightarrow l_{i+1}). \quad (\text{III.90})$$

Cependant à cause des corrélations spectrales qui doivent être prise en compte le long du trajet, la relation précédente n'est pas conservée entre transmittivités moyennes :

$$\overline{\tau_\sigma(l_{i-1} \rightarrow l_{i+1})}^{\Delta\sigma} \neq \overline{\tau_\sigma(l_{i-1} \rightarrow l_i)}^{\Delta\sigma} \overline{\tau_\sigma(l_i \rightarrow l_{i+1})}^{\Delta\sigma}. \quad (\text{III.91})$$

On ne peut donc pas utiliser directement les transmittivités de colonne homogène dont les formulations sont exposées dans les sections précédentes. Pour pallier ce problème, de nombreux auteurs ont travaillé sur une extension du MSBE pour traiter des milieux non uniformes. On peut citer à ce titre les travaux de Curtis et Godson, ainsi que Lindquist et Simmons. Une revue exhaustive de leurs approches est faite par Young [135].

De manière générale, par analogie à l'établissement de la relation III.30, la transmittivité moyenne d'une colonne hétérogène (l_1, l_2) , peut être modélisée par :

$$\overline{\tau_\sigma(l_1 \rightarrow l_2)}^{\Delta\sigma} = \exp \left[-\frac{1}{N\delta} \sum_{i=1}^N W_i(l_1 \rightarrow l_2) \right] = \exp \left[-\frac{\overline{W}(l_1 \rightarrow l_2)}{\delta} \right], \quad (\text{III.92})$$

où

$$W_i(l_1 \rightarrow l_2) = \int_0^{+\infty} \left[1 - \exp \left(- \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)S_i(l)f(\sigma - \sigma_{c_i})dl \right) \right] d\sigma. \quad (\text{III.93})$$

Pour exprimer cette transmittivité, on s'intéresse en particulier dans cette partie, aux formulations de Curtis-Godson classique et alternative puisque ce sont elles qui ont été mises en œuvre dans notre étude. Les expressions qui en découlent concernent, comme dans le cas homogène, le rapport $\overline{W}/\delta$. Une autre approche, celle développée par Lindquist-Simmons, consiste à exprimer la grandeur $\partial\overline{W}/\partial l$. Ceci part du principe qu'en modèle de bandes, la luminance à travers une colonne quelconque s'exprime à partir de la relation III.92 comme⁶ :

$$\overline{L_\sigma}^{\Delta\sigma}(l_1 \rightarrow l_2) = \int_{l_1}^{l_2} \overline{\left(\frac{\eta_\sigma(l)}{\kappa_\sigma(l)} \right)}^{\Delta\sigma} \frac{\partial \exp(-\overline{W}(l \rightarrow l_2)/\delta)}{\partial l} dl \quad (\text{III.94})$$

$$= \int_{l_1}^{l_2} -\overline{\left(\frac{\eta_\sigma(l)}{\kappa_\sigma(l)} \right)}^{\Delta\sigma} \frac{1}{\delta} \frac{\partial \overline{W}(l \rightarrow l_2)}{\partial l} \exp \left(-\frac{\overline{W}(l \rightarrow l_2)}{\delta} \right) dl. \quad (\text{III.95})$$

Il apparaît alors d'après la relation III.95 qu'il est plus judicieux de travailler directement avec des expressions donnant la dérivée $\partial(\overline{W}/\delta)/\partial l$ plutôt que le rapport $\overline{W}/\delta$. L'approximation de Lindquist-Simmons est par ce fait plus précise que l'approche de Curtis-Godson. Cependant elle est plus difficile à mettre en œuvre et surtout beaucoup plus coûteuse en temps CPU à cause du calcul de $\overline{W}/\delta$ (rapport intervenant également dans la formulation III.95) qui s'effectue dans ce cas par l'intégration suivante :

$$\frac{\overline{W}(l \rightarrow l_2)}{\delta} = - \int_l^{l_2} \frac{1}{\delta} \frac{\partial \overline{W}(l' \rightarrow l_2)}{\partial l'} dl'. \quad (\text{III.96})$$

Cette méthode n'a donc pas été retenue par la suite. De plus amples informations sur cette approche peuvent être trouvées dans Young [135].

⁶on utilise dans ce développement, le fait que δ soit constant le long du trajet optique ce qui est justifié puisqu'une fois déterminé pour une bande spectrale pour une colonne homogène, l'espacement moyen entre les raies n'a pas de raison physique de changer avec le chemin optique parcouru.

III.4.2.1 Approximation de Curtis-Godson classique

Cette approche consiste à considérer que la forme des courbes de croissance pour un milieu hétérogène est la même que pour un milieu homogène. Ceci se traduit analytiquement par des formules identiques aux expressions de $\overline{W}_L/\delta$ et $\overline{W}_D/\delta$ établies dans les sections III.4.1.1 et III.4.1.2 pour un milieu uniforme, en utilisant cette fois les paramètres $\overline{k}^*$, $\overline{\beta}_L^*$ et $\overline{\beta}_D^*$ qui sont des sortes de valeurs moyennes de $\overline{k}$, $\overline{\beta}_L$ et $\overline{\beta}_D$ le long de la colonne non uniforme.

De manière similaire au cas uniforme, la détermination des paramètres $\overline{k}^*$, $\overline{\beta}_L^*$ se fait par identification forcée en utilisant en absorption faible et forte les expressions de $\overline{W}(l_1 \rightarrow l_2)$ formulées avec l'approche de Curtis-Godson et l'expression exacte suivante :

$$\overline{W}(l_1 \rightarrow l_2) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N W_i(l_1 \rightarrow l_2). \quad (\text{III.97})$$

Pour le paramètre $\overline{\beta}_D^*$, par analogie formelle, on utilise la même expression utilisée pour le paramètre $\overline{\beta}_L^*$. On obtient ainsi les relations qui suivent en ayant défini au préalable u un paramètre d'épaisseur optique ⁷ :

$$u = \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)dl \quad (\text{III.98})$$

$$\overline{k}^* = \frac{1}{u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)dl \quad (\text{III.99})$$

$$\overline{\beta}_L^* = \frac{1}{\overline{k}^*u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)\overline{\beta}_L(l)dl \quad (\text{III.100})$$

$$\overline{\beta}_D^* = \frac{1}{\overline{k}^*u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)\overline{\beta}_D(l)dl. \quad (\text{III.101})$$

L'identification en régime d'absorption forte afin d'aboutir aux relations III.100 et III.101 exprimant les paramètres $\overline{\beta}^*$ nécessite cependant une hypothèse supplémentaire concernant le comportement des raies en milieu hétérogène. Les largeurs et les intensités des raies sont supposées varier de manière similaire avec la température et la composition ce qui se traduit par la séparabilité des grandeurs $\gamma_i(l)$ et $S_i(l)$ telle que :

$$\gamma_i(l) = \mathfrak{g}_1(i)\mathfrak{g}_2(l) \quad (\text{III.102})$$

$$S_i(l) = \mathfrak{h}_1(i)\mathfrak{h}_2(l). \quad (\text{III.103})$$

Si cette hypothèse de séparabilité est plutôt raisonnable pour ce qui est de la largeur des raies, elle peut s'avérer imprécise pour l'intensité des raies.

⁷L'essentiel des développements aboutissant à ces relations peuvent être notamment trouvées dans Young [145, 135] et Taine et Soufiani [131]

⁸À noter que le paramètre $\overline{\beta}_D$ utilisé dans l'expression III.101 représente le paramètre de recouvrement Doppler indiqué par la relation III.75.

III.4.2.2 Approximation de Curtis-Godson alternative

Cette approximation diffère de la précédente dans le sens où la formulation de $\overline{W}/\delta$ pour une colonne non uniforme est faite non pas par l'analogie aux formulations établies pour un ensemble de raie en homogène (approximation classique) mais en exprimant tout d'abord la largeur W d'une seule raie en anisotherme avant de passer à un ensemble de raies. Pour ce faire, on utilise l'approximation de Curtis-Godson (CG) classique pour exprimer la largeur W d'une raie en milieu non uniforme à partir de l'expression de la largeur d'une raie en milieu uniforme.

Pour une raie isolée, en utilisant les relations III.26, III.54 et III.63 la largeur W d'une raie pour une colonne homogène peut s'exprimer en comportement Lorentz et Doppler comme indiqué dans [131] :

$$W_L = 2\pi\gamma_L L \left(\frac{xplS}{2\pi\gamma_L} \right) \quad (\text{III.104})$$

$$W_D = \sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}} \gamma_D D \left(\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{xplS}{\gamma_D} \right), \quad (\text{III.105})$$

où les fonctions L et D sont définies dans les sections III.4.1.1 et III.4.1.2. À noter l'analogie avec les relations III.55 et III.64 qui n'est pas surprenante puisque ces deux dernières expressions sont obtenues en considérant une loi de distribution uniforme. L'application de l'approximation de Curtis-Godson pour une seule raie permet alors d'écrire la largeur en milieu non uniforme (l_1, l_2) :

$$W_L = 2\pi\gamma_L^* L \left(\frac{xplS^*}{2\pi\gamma_L^*} \right) \quad (\text{III.106})$$

$$W_D = \sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}} \gamma_D^* D \left(\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{xplS^*}{\gamma_D^*} \right), \quad (\text{III.107})$$

où

$$S^* = \frac{1}{u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)S(l)dl \quad (\text{III.108})$$

$$\gamma_L^* = \frac{1}{S^*u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)S(l)\gamma_L(l)dl \quad (\text{III.109})$$

$$\gamma_D^* = \frac{1}{S^*u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)S(l)\gamma_D(l)dl, \quad (\text{III.110})$$

avec u défini par la relation III.98. Le passage à un ensemble de raie se fait de manière similaire au cas uniforme *i.e.* en supposant que les intensités S^* suivent une loi de distribution $P(S^*)$ telle que III.51, III.52 ou bien encore III.53. Les expressions qui en résultent sont alors analogues aux relations III.55, III.56 et III.57 (pour une formulation en Lorentz) et III.64, III.65 et III.66 (pour une formulation en Doppler). Par exemple, pour la loi de distribution exponentielle en régime Lorentz :

$$\frac{\overline{W}_L}{\delta} = \frac{xpl\overline{k}^*}{\sqrt{1 + \frac{xpl\overline{k}^*}{4\beta_L^*}}}. \quad (\text{III.111})$$

Les hypothèses de séparabilité III.102 et III.103 appliquées à γ_L^* et S^* permettent alors d'obtenir les paramètres « $\overline{}$ » pour un ensemble de raie :

$$\overline{k}^* = \frac{1}{u} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)dl \quad (\text{III.112})$$

$$\overline{\delta_L^*} = \frac{1}{\overline{k^*u}} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)\overline{\delta_L}(l)dl. \quad (\text{III.113})$$

$$\overline{\gamma_L^*} = \frac{1}{\overline{k^*u\delta_L^*}} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)\overline{\gamma_L}\overline{\delta_L}(l)dl \quad (\text{III.114})$$

Dans ces expressions finales, il faut noter que les termes dans les intégrales sont les grandeurs « — » qui correspondent aux paramètres en milieu uniforme (cf. §III.4.1) et non pas les grandeurs « * » données par les équations III.108 et III.109. Ce passage des paramètres « * » aux paramètres « — » se fait au moyen de l'hypothèse de séparabilité. Par ailleurs, contrairement à la formulation de CG classique où le paramètre $\overline{\beta_L^*}$ s'obtient directement avec la relation III.100, dans le cas présent on doit passer par la relation :

$$\overline{\beta_L^*} = \frac{\overline{\gamma_L^*}}{\overline{\delta_L^*}}. \quad (\text{III.115})$$

Dans le cas Doppler, le paramètre $\overline{\beta_D}$ étant défini par la relation III.75 avec une largeur de raie constante, l'expression du paramètre $\overline{\beta_D^*}$ se ramène à :

$$\frac{1}{\overline{\beta_D^*}} = \frac{1}{\overline{k^*u}} \int_{l_1}^{l_2} x(l)p(l)\overline{k}(l)\frac{1}{\overline{\beta_D}(l)}dl. \quad (\text{III.116})$$

Des développements supplémentaires de ces résultats peuvent être trouvés dans Young [135].

Les deux types d'approches exposés dans cette section permettent d'exprimer le rapport $\overline{W}/\delta$ (en Lorentz ou en Doppler) pour une colonne non uniforme, et donc sa transmittivité, en fonction de $\overline{k^*}$ et $\overline{\beta^*}$. Ces paramètres peuvent être calculés à partir des paramètres $\overline{k}$ et $\overline{\beta}$ (ou $\overline{\gamma}$ et $\overline{\delta}$ dans certains cas) *i.e.* des paramètres déterminés pour des conditions homogènes et isothermes (cf. §III.4.1). En régime Voigt, pour traiter des colonnes non uniformes, on utilise par la suite la formulation de mélange III.78 de Ludwig telle que pour un trajet quelconque (l_1, l_2) :

$$\frac{\overline{W_V}}{\delta}(l_1 \rightarrow l_2) = \overline{k^*u} \sqrt{1 - \Omega^{-1/2}}$$

$$\Omega = \left[1 - \left(\frac{1}{\overline{k^*u}} \frac{\overline{W_D}}{\delta}(l_1 \rightarrow l_2) \right)^2 \right]^{-2} + \left[1 - \left(\frac{1}{\overline{k^*u}} \frac{\overline{W_L}}{\delta}(l_1 \rightarrow l_2) \right)^2 \right]^{-2} - 1. \quad (\text{III.118})$$

L'absorption d'une colonne non uniforme ($\overline{\tau^{\Delta\sigma}}(l \rightarrow l_w)$) peut donc être retrouvée à partir de paramètres tabulés décrivant l'absorption de chaque élément homogène i ($\overline{k}(i), \overline{\beta_L}(i), \overline{\beta_D}(i)$), constituant la colonne initiale étudiée.

III.4.2.3 Choix de l'approximation de Curtis-Godson pour la mise en œuvre du MSBE

Pour mettre en œuvre le modèle statistique à bande étroite dans les milieux non uniformes, notre choix s'est porté sur l'approximation de CG classique pour traiter les régime Lorentz et Doppler *i.e.* pour obtenir le paramètre $\overline{\beta_L^*}$ et $\overline{\beta_D^*}$. Ces choix ont été motivés

en partie par les résultats obtenus par Taine et Soufiani [131] (pour le comportement Lorentz) qui ont testés les deux approximations de Curtis-Godson dans leurs travaux. Pour le comportement Doppler, des tests ont été effectués lors de la construction du MSBE entre les deux approximations de CG (relations III.101 et III.116). Les figures III.21 montrent un exemple de comparaison entre calcul raie par raie et MSBE avec l'utilisation des deux approches CG pour déterminer le paramètre Doppler. Comme expliqué dans la section III.4.3.4, la grandeur $\overline{\tau_2} - \overline{\tau_1\tau_2}$ est pertinente pour évaluer la précision d'un MSBE au vu de l'équation III.47. Ces graphes montrent que l'approche CG classique pour déterminer le paramètre Doppler donnent de meilleurs résultats que l'approche alternative utilisée par Rivière *et al.* [96] pour mettre en œuvre leur modèle pour les mélanges CO_2-CO . Par la suite, les paramètres du MSBE pour des colonnes non uniformes sont déterminés via les expressions III.99, III.100 et III.101.

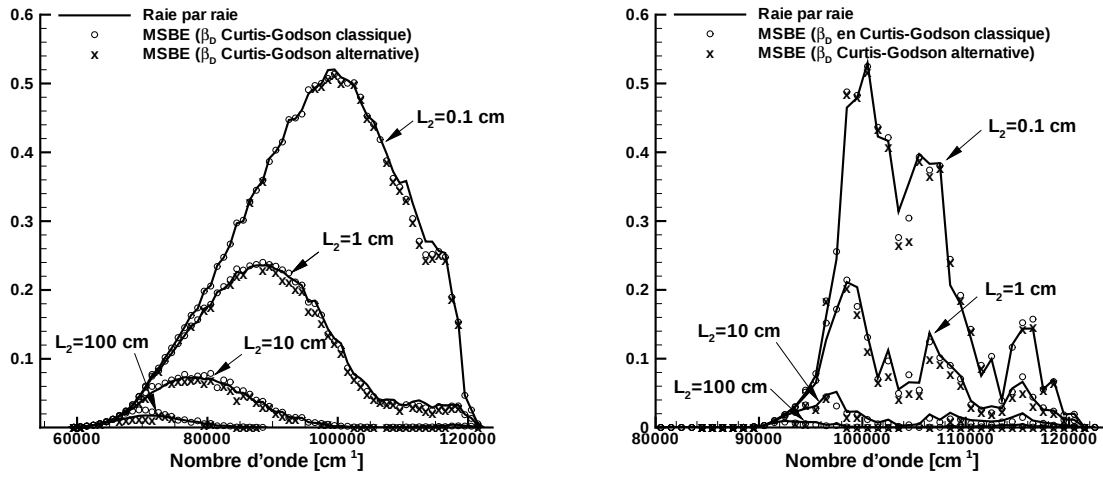


FIG. III.21: Propriétés radiatives moyennes $\overline{\tau_2} - \overline{\tau_1\tau_2}$ du système N_2 (Birge-Hopfield 2) à gauche et N_2 (Carroll-Yoshino) à droite de deux colonnes indicées 1 et 2. Les colonnes sont à 1 bar de N_2 pur à l'ETL tel que $T_1=15000$ K et $T_2=8000$ K. La colonne 1 a une longueur fixée à $L_1=1$ cm tandis que L_2 vaut 0.1, 1, 10 et 100 cm suivant le cas.

III.4.3 Construction du MSBE

La construction du modèle consiste à tabuler les paramètres $\overline{\eta}^{\Delta\sigma}$, $\overline{\kappa}^{\Delta\sigma}$, ainsi que $\overline{\eta/\kappa}^{\Delta\sigma}$, $\overline{\beta_D}$ et $\overline{\beta_L}$ (pour le cas des systèmes moléculaires optiquement épais) pour toutes les conditions thermophysiques envisagées. L'étape amont de ce travail consiste à déterminer les dépendances de chaque paramètre et de déterminer « la grille » (la plage de variation et le pas) à considérer pour chacune d'elle. Cette étude est présentée dans la section III.4.3.1. La suite est consacrée à la détermination et aux calculs des paramètres du modèle pour les systèmes moléculaires et les continus. Pour les systèmes moléculaires optiquement épais, on expose dans la section III.4.3.2 la procédure d'ajustement utilisée pour déterminer les paramètres $\overline{\beta_L}$ et $\overline{\beta_D}$. Pour les raies atomiques, il est important de souligner que la construction d'un modèle pour les atomes n'a pas donné de résultats satisfaisants. Ce point est discuté dans la partie III.4.3.4.

III.4.3.1 Paramétrisation du modèle

On rappelle les hypothèses et la modélisation considérées dans notre étude pour décrire le déséquilibre thermique dans la couche de choc lors d'une rentrée atmosphérique. La rotation et la translation des particules sont supposées être à l'équilibre à la température $T = T_r$. Ensuite, le mode vibrationnel de chaque type de molécules m est caractérisé par la température $T_{v,m}$. La population des états électroniques peut suivre une distribution de Boltzmann à la température électronique T_{el} ou bien être déterminée avec une approche de type « collisionnel-radiatif ». Enfin la translation des électrons libres est Maxwellienne à la température T_e . Ces hypothèses et cette modélisation sont discutées dans le premier chapitre. Compte tenu des différents résultats exposés dans la littérature sur des simulations de cas de rentrées atmosphériques terrestres à vitesse hypersonique [19, 21, 27, 54, 10, 63, 68, 7, 9], les intervalles de température à considérer sont :

$$500 \text{ K} \leq T \leq 50000 \text{ K} \quad (\text{III.119})$$

$$500 \text{ K} \leq T_{v,m}, T_{el}, T_e \leq 25000 \text{ K}. \quad (\text{III.120})$$

L'ensemble des paramètres à calculer et à stocker pour chaque système et pour chaque bande spectrale est donné par la suite en fonction de leur dépendance :

- Pour les systèmes moléculaires lié-lié optiquement épais, les paramètres nécessaires sont les suivants :

$$\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}(n'_e, n''_e, T_{v,m}, T_r) \quad (\text{III.121})$$

$$\overline{\eta/\kappa}^{\Delta\sigma}(n'_e, n''_e, T_{v,m}, T_r) \quad (\text{III.122})$$

$$\overline{\beta_D}(T_{v,m}, T_r) \quad (\text{III.123})$$

$$\overline{\beta_L}(T_{v,m}, T_r, P), \quad (\text{III.124})$$

où n'_e et n''_e sont les populations des niveaux électroniques haut et bas de la transition considérée. Le paramètre Doppler $\overline{\beta_D}$ (cf. relation III.75) ne dépend pas de la pression puisque l'effet Doppler est piloté uniquement par la température $T (= T_r)$. La dépendance en $T_{v,m}$ est ajoutée pour tenir compte de la dépendance que pourrait avoir le paramètre d'espacement $\bar{\delta}$. Pour le paramètre Lorentz $\overline{\beta_L}$, la pression intervient puisque l'élargissement collisionnel est proportionnel à la pression (équations II.21, II.19). À noter que les deux paramètres $\overline{\beta_D}$ et $\overline{\beta_L}$ sont des paramètres de chevauchement de raies dépendant des largeurs des raies et du paramètre d'espacement $\bar{\delta}$. Par ailleurs, une dépendance en température électronique n'est pas nécessaire dans la mesure où l'émission induite est faible.

- Pour les systèmes moléculaires lié-lié optiquement minces :

$$\overline{\eta}^{\Delta\sigma}(n'_e, T_{v,m}, T_r) \quad (\text{III.125})$$

$$\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}(n''_e, T_{v,m}, T_r), \quad (\text{III.126})$$

- Pour les continua :

$$\overline{\eta}^{\Delta\sigma}(\text{composition}, T_e, \chi^{neq}) \quad (\text{III.127})$$

$$\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}(\text{composition}, T_e, \chi^{neq}), \quad (\text{III.128})$$

où le facteur χ^{neq} est le paramètre introduit dans la section II.2.2.1 pour tenir compte du déséquilibre chimique dans les expressions du coefficient d'émission et d'absorption. Ce facteur n'intervient pas pour les transitions libre-libre.

Pour simplifier la tabulation et réduire le nombre de calculs, il faut souligner que la dépendance en composition ou en population des états de la transition dans les expressions précédentes n'est pas nécessaire. En effet pour les continua, on peut simplement stocker des paramètres par unités de pression des espèces mises en jeu. Ce point est discuté dans la section III.4.3.3. Pour les grandeurs $\bar{\eta}^{\Delta\sigma}$, $\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}$ et $\overline{\eta/\kappa}^{\Delta\sigma}$ qui dépendent de $n'_e, n''_e, T_{v,m}, T_r$, il est utile de remarquer que l'on peut les exprimer en fonction des mêmes paramètres calculés cette fois en considérant un peuplement Boltzmannien des états vibroniques à T_{ve} et des états rotationnels à T_r (équilibre partiel à (T_{ve}, T_r)). On présente brièvement les développements qui permettent d'aboutir à cette conclusion.

On désignera par $\hat{n}'_e$ et $\hat{n}''_e$, les populations des niveaux électroniques haut et bas d'une transition calculées à l'équilibre partiel à (T_{ve}, T_r) . À partir de ces définitions, le coefficient d'émission η_σ étant proportionnel à la population n'_e , il vient :

$$\bar{\eta}^{\Delta\sigma} = \frac{n'_e}{\hat{n}'_e} \hat{\eta}^{\Delta\sigma}, \quad (\text{III.129})$$

avec $\hat{\eta}^{\Delta\sigma}$ le coefficient d'émission calculé à l'équilibre partiel (T_{ve}, T_r) . Le coefficient d'émission induite étant relié au coefficient d'émission au travers des relations d'Einstein II.5, celui-ci peut s'écrire :

$$\overline{\kappa^{ei}}^{\Delta\sigma} = \frac{1}{2hc^2\sigma_c^3} \bar{\eta}^{\Delta\sigma} = \frac{1}{2hc^2\sigma_c^3} \frac{n'_e}{\hat{n}'_e} \hat{\eta}^{\Delta\sigma}, \quad (\text{III.130})$$

où le nombre d'onde σ est supposé constant et égal à celui à la valeur moyenne σ_c de la bande spectrale. De manière similaire au coefficient d'émission, le coefficient d'absorption pure, proportionnel à la population n''_e , s'écrit :

$$\overline{\kappa^{abs}}^{\Delta\sigma} = \frac{n''_e}{\hat{n}''_e} \hat{\kappa}^{abs\Delta\sigma}, \quad (\text{III.131})$$

avec $\hat{\kappa}^{abs\Delta\sigma}$ le coefficient d'absorption pure calculé à l'équilibre partiel (T_{ve}, T_r) . Le coefficient d'absorption $\kappa_\sigma = \kappa_\sigma^{abs} - \kappa_\sigma^{ei}$ peut être moyenné en utilisant les expressions III.130 et III.131. On obtient ainsi le rapport :

$$\frac{\bar{\eta}^{\Delta\sigma}}{\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}} = \frac{2hc^2\sigma_c^3}{\frac{n''_e}{n'_e} \frac{\hat{n}'_e}{\hat{n}''_e} \left(\frac{2hc^2\sigma_c^3}{\hat{\eta}^{\Delta\sigma}/\hat{\kappa}^{\Delta\sigma}} + 1 \right) - 1}. \quad (\text{III.132})$$

Or, d'après les résultats de la section III.3.2, il n'y a pas, dans notre cadre d'application, de corrélations spectrales significatives entre $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et $\kappa_\sigma\tau_\sigma$ et en particulier pour $\tau_\sigma = 1$, entre $\eta_\sigma/\kappa_\sigma$ et κ_σ . On peut donc écrire :

$$\left(\frac{\eta}{\kappa} \right)^{\Delta\sigma} = \frac{\bar{\eta}^{\Delta\sigma}}{\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}}. \quad (\text{III.133})$$

Par conséquent, le paramètre $\overline{\eta/\kappa}^{\Delta\sigma}$ peut être exprimé pour tout couple (n'_e, n''_e) suivant :

$$\left(\frac{\eta}{\kappa} \right)^{\Delta\sigma} = \frac{2hc^2\sigma_c^3}{\frac{n''_e}{n'_e} \exp\left(-\frac{\Delta E_e}{k_b T_{ve}}\right) \left[\frac{2hc^2\sigma_c^3}{\hat{\eta}^{\Delta\sigma}/\hat{\kappa}^{\Delta\sigma}} + 1 \right] \frac{Q_{e'}(T_{ve}, T_r)}{Q_{e''}(T_{ve}, T_r)} - 1}. \quad (\text{III.134})$$

où $\frac{\hat{\eta}}{\hat{\kappa}}^{\Delta\sigma}$ est le rapport moyenné des coefficients d'émission et d'absorption calculés à l'équilibre partiel (T_{ve}, T_r) , ΔE_e la différence d'énergie électronique $E_{e'} - E_{e''}$ mise en jeu dans la transition et, $Q_{e'}$ et $Q_{e''}$ les fonctions de partition rovibrationnelles évaluées à (T_{ve}, T_r) des états électroniques haut et bas. Ces fonctions de partition sont déterminées avec des valeurs prétabulées en températures (T_{ve}, T_r) pour chaque état électronique mis en jeu dans les systèmes moléculaires lié-lié traités dans notre application. Cette tabulation fait l'objet d'une partie de l'annexe A. On notera que la formulation III.134 permet de prendre en compte l'émission induite.

En utilisant les relations III.129 et III.132, on en déduit l'expression de coefficient d'absorption moyen :

$$\bar{\kappa}^{\Delta\sigma} = \frac{n'_e}{\hat{n}'_e} \frac{\hat{\kappa}^{\Delta\sigma} \frac{\hat{\eta}}{\hat{\kappa}}^{\Delta\sigma}}{\frac{\hat{\eta}}{\hat{\kappa}}^{\Delta\sigma}}. \quad (\text{III.135})$$

Dans le cas particulier où la population des états électroniques suit une distribution de Boltzmann à une température $T_{el} \neq T_{ve}$, la relation III.134 devient :

$$\left(\frac{\eta}{\kappa}\right)^{\Delta\sigma} = \frac{2hc^2\sigma_c^3}{\exp\left(\frac{\Delta E_e}{k_b} \left(\frac{1}{T_{el}} - \frac{1}{T_{ve}}\right)\right) \left[\frac{2hc^2\sigma_c^3}{\frac{\hat{\eta}}{\hat{\kappa}}^{\Delta\sigma}} + 1\right] - 1}. \quad (\text{III.136})$$

Au travers des relations III.129, III.135 et III.134, la tabulation des paramètres $\frac{\eta}{\kappa}^{\Delta\sigma}$, $\bar{\eta}^{\Delta\sigma}$ et $\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}$ peut se ramener à celle - plus simple - des paramètres $\frac{\hat{\eta}}{\hat{\kappa}}^{\Delta\sigma}$, $\hat{\eta}^{\Delta\sigma}$ et $\hat{\kappa}^{\Delta\sigma}$. En écrivant ces paramètres sous forme réduite (*i.e.* par unité de pression de l'espèce absorbante ou émettrice), ils ne dépendent plus que de deux températures : T_{ve} et T_r . On notera que cette dépendance à deux températures correspond à celle des paramètres $\bar{\beta}_D$ et $\bar{\beta}_L$.

Pour la tabulation, une condition restrictive doit être prise en compte en ce qui concerne la variation des températures T_{ve} et T_r et ce pour deux raisons : la première est que l'hypothèse de décorrélation des grandeurs η/κ et $\kappa\tau$ (équation III.45), nécessaire à la formulation de l'ETR dans notre cas d'étude, n'est plus valide en cas de fort déséquilibre où T_{ve} est beaucoup plus grand que T_r . Ce point a déjà été discuté dans la section III.3.2. Deuxièmement, dans ces mêmes conditions, le modèle à deux températures conduit à une inversion des populations pour des transitions mettant en jeu des états à haut nombre rotationnel J . Ceci est illustré par les figures III.22, pour les systèmes lié-lié O_2 (Schumann Runge) et N_2 (Birge-Hopfield 2). Le traitement de bandes spectrales contenant des raies « négatives » en utilisant un modèle de bandes spectralement corrélé tel que le MSBE n'est pas courant. Pour éviter ce type de problèmes qui se produit pour des raies de très faibles intensités et hors du cadre de notre application (qui traite des écoulements en compression et non en détente), nous avons déterminé pour quels couples de température (T_{ve}, T_r) , des inversions de populations ont lieu pour chaque système moléculaire traité en épais. Il s'est avéré que ce sont les systèmes O_2 (Schumann Runge) et N_2 (Birge-Hopfield 2)⁹, de par leur important étalement spectral, qui présentent le plus d'inversion. Les figures III.23 montrent que pour

⁹À titre indicatif, le système O_2 (SR) présente, dans la base de données spectroscopiques utilisée dans notre étude pour calculer des spectres à haute résolution, un total de 189464 raies. Pour le système N_2 (BH2), le nombre s'élève à 198884.

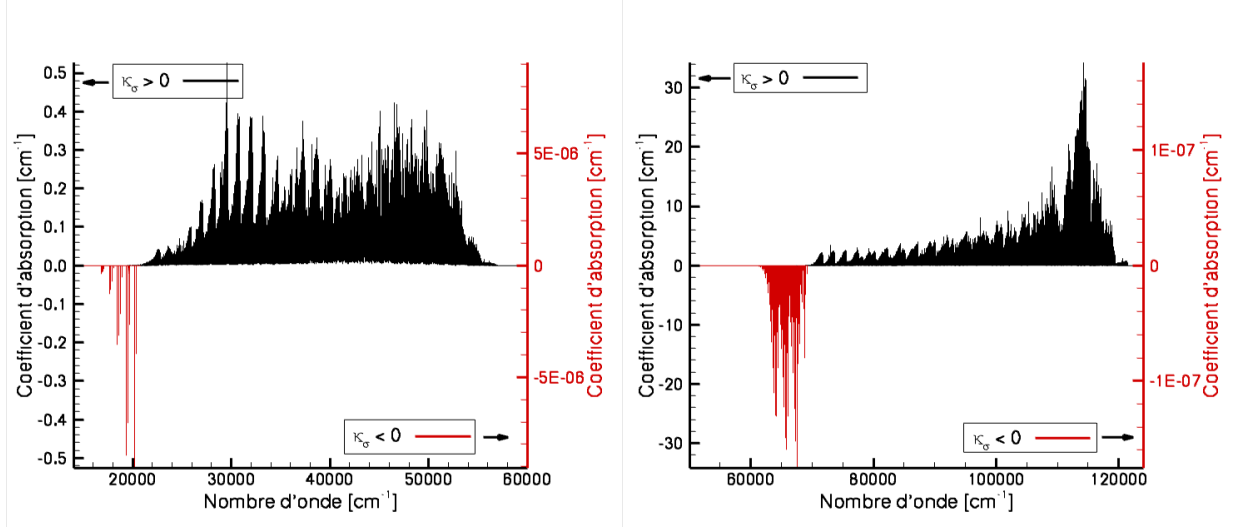


FIG. III.22: Spectres d'absorption des systèmes lié-lié O_2 (Schumann Runge) à gauche et N_2 (Birge-Hopfield 2) à droite à 0.1 bar dans les conditions respectives $T_{ve} = 15000$ K - $T_r = 3000$ K et $T_{ve} = 20000$ K - $T_r = 2000$ K.

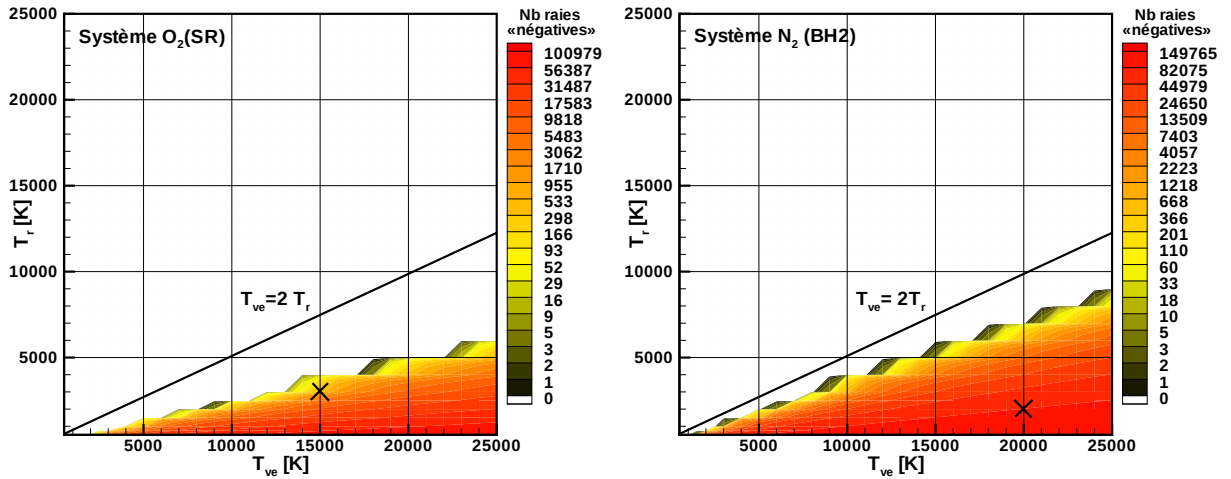


FIG. III.23: Nombre de raies présentant un coefficient d'absorption négatif en fonction des températures T_{ve} et T_r pour les systèmes lié-lié O_2 (Schumann Runge) à gauche et N_2 (Birge-Hopfield 2) à droite. Les croix représentent les conditions des figures III.22.

la condition :

$$T_{ve} \leq 2T_r, \quad (\text{III.137})$$

aucune inversion de population n'est constatée¹⁰. Cette condition permet du même coup de travailler dans des conditions de température où l'hypothèse de décorrélation III.45 est toujours valide. D'un autre côté, cette restriction est suffisante pour traiter un éventuel dépassement de la température de vibration par rapport à la température de rotation mis

¹⁰ À noter que sur les spectres, les effets d'inversions de population peuvent être masqués par la portée des raies « positives ». La condition $T_{ve} \leq 2T_r$ est par conséquent la plus contraignante afin de s'assurer qu'aucune inversion ne soit spectralement visible.

en évidence pour les premiers points de trajectoire de rentrée (cas FIRE II, cf. champs de température au temps de vol 1634 s) lors de la relaxation derrière le choc.

Pour conséquent, la tabulation s'est effectuée les intervalles de température suivante :

$$\begin{aligned} 500 \text{ K} &\leq T_r \leq 50000 \text{ K} \\ 500 \text{ K} &\leq T_{ve}, T_e \leq 25000 \text{ K} \\ \text{avec } T_{ve} &\leq 2T_r \end{aligned} \quad (\text{III.138})$$

La grille de températures utilisée est représentée sur la figure III.24 avec le pas des températures.

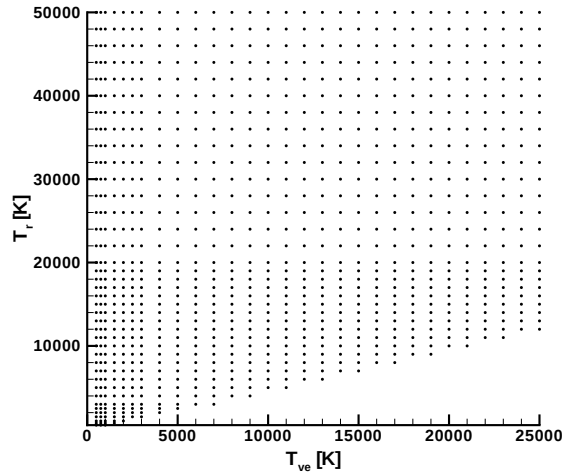


FIG. III.24: Grille de températures.

Concernant la paramétrisation spectrale, *i.e.* les intervalles $[\sigma_{min}, \sigma_{max}]$ du nombre d'onde à considérer pour chaque système traité, on s'est assuré que toutes les raies soient prises en compte en considérant un élargissement maximal des raies, positionnées aux limites de la région spectrale du système, évalué à 2 bar, 5000 K pour l'élargissement collisionnel et à 50000 K pour l'élargissement Doppler à σ_{min} et à σ_{max} ¹¹. La figure III.25 indique les intervalles spectraux considérés dans notre étude pour chaque système. Pour des raisons pratiques, les intervalles réels ont parfois été légèrement agrandis pour que les valeurs σ_{min} et σ_{max} soient des multiples de 1000 cm^{-1} *i.e.* la largeur des bandes du MSBE. La tabulation des paramètres du modèle a été donc réalisée pour toutes les bandes spectrales de chaque système pour toutes les conditions thermophysiques envisagées.

III.4.3.2 Systèmes moléculaires

Systèmes moléculaires optiquement minces

Le traitement des systèmes moléculaires minces (systèmes dans l'IR et le visible, cf. figure III.25 et tableau III.1) ne nécessite pas la construction d'un MSBE. Il importe pour

¹¹Dans tous les calculs de spectres de systèmes moléculaires, la portée des raies considérée est de 100γ , γ étant la demi-largeur à mi-hauteur de raie

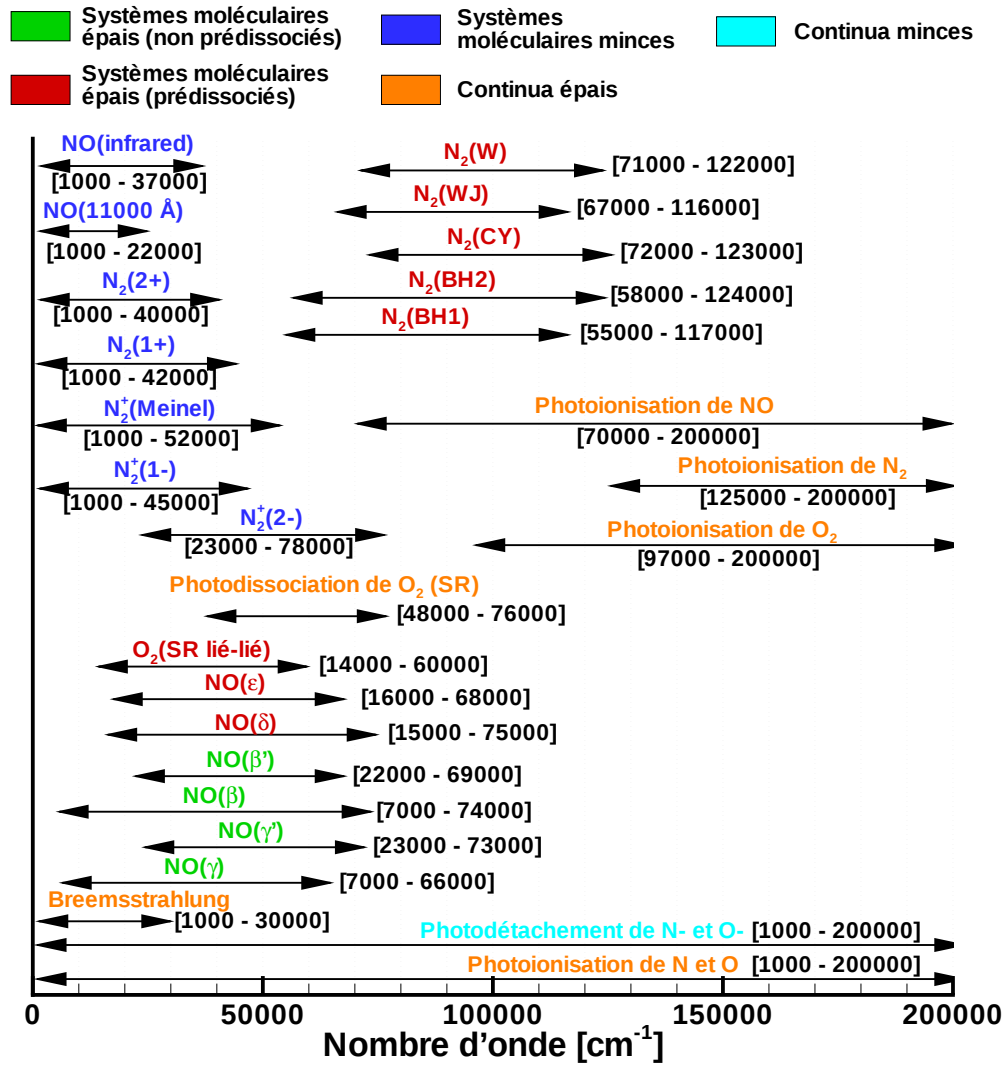


FIG. III.25: Positionnement spectral $[\sigma_{min}, \sigma_{max}]$ des contributions radiatives d'un plasma d'air. Le caractère optiquement épais ou mince d'un système indiqué dans la légende est propre à notre cas d'étude (entrée atmosphérique dans les conditions de FIRE II).

chacun de ces systèmes de déterminer et de tabuler seulement les coefficients d'émission et d'absorption réduits (indiqués r) ne dépendant que de deux températures :

$$\overline{\eta}_r^{\Delta\sigma}(T_{ve}, T_r) = \frac{\hat{\eta}^{\Delta\sigma}(T_{ve}, T)}{xp} \quad (\text{III.139})$$

$$\overline{\kappa}_r^{\Delta\sigma}(T_{ve}, T_r) = \frac{\hat{\kappa}^{\Delta\sigma}(T_{ve}, T)}{xp}, \quad (\text{III.140})$$

où p est la pression totale et x la fraction molaire de l'espèce correspondant à la contribution radiative considérée. Les coefficients $\hat{\eta}^{\Delta\sigma}$ et $\hat{\kappa}^{\Delta\sigma}$ ont été calculés simplement en moyennant par bande spectrale les spectres d'émission et d'absorption calculés à l'équilibre partiel (T_{ve}, T_r) .

La tabulation de $\overline{\kappa}_r^{\Delta\sigma}$ n'est pas indispensable. Elle a été cependant réalisée afin de laisser la possibilité de faire absorber ces systèmes en mince *i.e.* telle que la transmittivité d'un de

ces systèmes pour une colonne hétérogène (l_1, l_2) puisse être calculée en bonne approximation par :

$$\bar{\tau}^{\Delta\sigma}(l_1 \rightarrow l_2) \approx \prod_i \bar{\tau}^{\Delta\sigma}(l_i \rightarrow l_{i+1}) \approx \prod_i \exp\left(-xp\bar{\kappa}_r^{\Delta\sigma}(l_{i+1} - l_i)\right). \quad (\text{III.141})$$

Ces expressions sont obtenues en négligeant les phénomènes de corrélations spectrales et en considérant le produit $\kappa_\sigma l \ll 1$. Les paramètres III.139 et III.140 ont été tabulés pour les systèmes moléculaires optiquement minces et pour les intervalles spectraux indiqués par la figure III.25 et sur la grille de température (T_{ve}, T_r) indiquée par la figure III.24.

Systèmes moléculaires optiquement épais

Pour les systèmes moléculaires optiquement épais, une tabulation similaire au cas des systèmes minces, pour les paramètres $\bar{\eta}/\bar{\kappa}^{\Delta\sigma}(T_{ve}, T_r)$ et $\bar{\kappa}_r^{\Delta\sigma}(T_{ve}, T_r)$ a été réalisée. Pour le calcul des paramètres du modèle $\bar{\beta}_D$ et $\bar{\beta}_L$, une procédure d'ajustement systématique à deux paramètres des courbes de croissance théoriques avec une méthode des moindres carrés a été mise en place. La fonction analytique à deux paramètres à ajuster sur les courbes théoriques s'exprime avec les relations III.78, III.57 et III.65. On utilise par conséquent l'expression suivante :

$$\frac{\bar{W}_V}{\delta} = xpl\bar{k}\sqrt{1 - \Omega^{-1/2}}, \quad (\text{III.142})$$

avec

$$\Omega = \left[1 - \left(\frac{1}{xpl\bar{k}} \frac{\bar{W}_D}{\delta}\right)^2\right]^{-2} + \left[1 - \left(\frac{1}{xpl\bar{k}} \frac{\bar{W}_L}{\delta}\right)^2\right]^{-2} - 1 \quad (\text{III.143})$$

$$\frac{\bar{W}_D}{\delta} = \bar{\beta}_D E\left(\frac{xpl\bar{k}}{\bar{\beta}_D}\right) \quad (\text{III.144})$$

$$\frac{\bar{W}_L}{\delta} = 2\bar{\beta}_L \left(\sqrt{1 + \frac{xpl\bar{k}}{\bar{\beta}_L}} - 1\right), \quad (\text{III.145})$$

où la fonction E est définie par l'équation III.68. La procédure d'ajustement se fait en plusieurs étapes. La première consiste à faire une première estimation du paramètre $\bar{\beta}_D$ (noté $\bar{\beta}_D^\circ$) en ajustant au sens des moindres carrés la première partie de la courbe théorique correspondant au régime Doppler en utilisant la relation III.144. Ensuite, en injectant $\bar{\beta}_D^\circ$ dans la relation III.142 pour la partie Doppler, on ajuste ensuite toute la courbe pour obtenir une valeur de $\bar{\beta}_L$. Cette valeur est ensuite fixée pour redéterminer une valeur de $\bar{\beta}_D$ mais ajustant cette fois toute la courbe avec la relation III.142. Ces deux dernières étapes sont itérées jusqu'à convergence des paramètres $\bar{\beta}_L$ et $\bar{\beta}_D$. En pratique l'ajustement des courbes se fait pour des épaisseurs de colonnes xpl de 10^{-8} m.bar à 4 m.bar. Cette limite a été fixée en considérant que dans un cas de rentrée l'épaisseur d'un trajet optique dans la couche de choc est tout au plus de 4 m.atm de pression totale (cf. section III.4.1). Les figures III.26 et III.27 de gauche présentent deux exemples d'ajustement de courbes de croissance pour les systèmes N_2 Birge-Hopfield 2 et 1. La courbe du « premier ajustement Doppler » correspond au tracé de $\bar{W}_D/\delta$ donné par la relation III.144 avec la valeur $\bar{\beta}_D^\circ$. La courbe correspondant à l'« ajustement final du Doppler » correspond au tracé précédent mais avec la valeur final de $\bar{\beta}_D$ issue de la convergence des itérations. Pour l'« ajustement

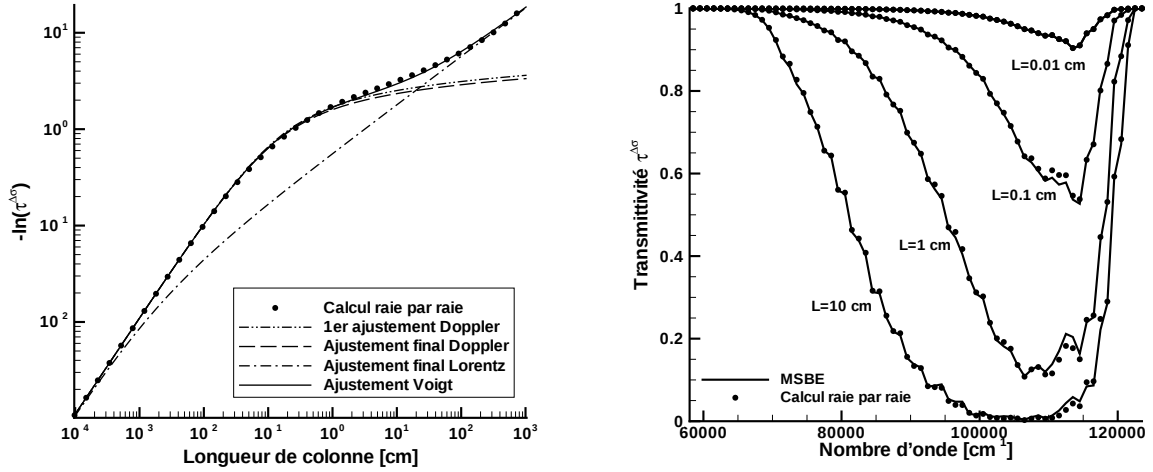


FIG. III.26: Exemple d'ajustement de courbes de croissance de la bande spectrale $[113000-114000 \text{ cm}^{-1}]$ (à gauche), ainsi que de transmittivités moyennes pour des colonnes de différentes longueurs (à droite) pour le système N_2 Birge-Hopfield 2 à 8000 K sous 1 bar avec 80% de N_2 .

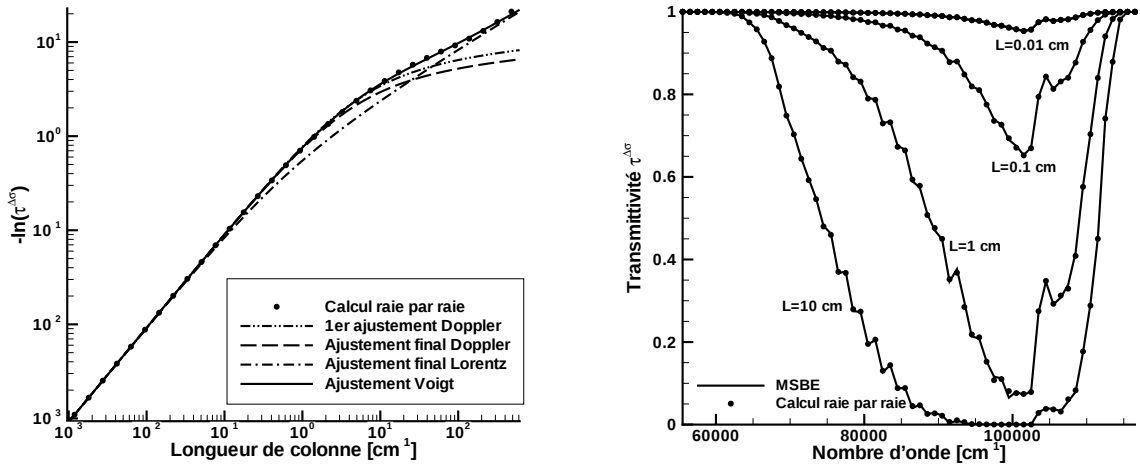


FIG. III.27: Figures similaires aux figures III.26 mais pour le système N_2 Birge-Hopfield 1 à $T_r=15000 \text{ K}$, $T_{ve}=10000 \text{ K}$ et sous 1 bar de N_2 pur. La courbe de croissance est celle de la bande $[89000-90000 \text{ cm}^{-1}]$.

final du Lorentz », cela correspond à la représentation de la relation III.145 utilisée avec la valeur finale de $\overline{\beta}_L$. L'ajustement en régime Voigt résultant de la combinaison de $\overline{W}_D/\delta$ et de $\overline{W}_L/\delta$ via la relation III.142 conduit à un bon accord avec la courbe théorique. Des résultats plus globaux montrés sur les figures de droite, présentent les transmittivités moyennes de toutes les bandes spectrales pour différentes longueurs de colonne issues de calcul raie par raie et de l'utilisation du MSBE formulé en Voigt. Des écarts relativement faibles sont observés entre calculs théoriques et calculs avec le MSBE.

Les paramètres $\overline{\beta}_D$ et $\overline{\beta}_L$ sont tabulés sur la même grille de température (T_{ve}, T_r) que les autres paramètres $\overline{\eta}/\overline{\kappa}^{\Delta\sigma}$ et $\overline{\kappa}_r^{\Delta\sigma}$. Par ailleurs pour tenir compte de la dépendance en

pression du paramètre de chevauchement $\overline{\beta}_L$, une approche différente est utilisée suivant si l'état haut du système étudié est un état prédissocié ou non.

Systèmes moléculaires optiquement épais non prédissociés

De manière générale pour les systèmes moléculaires ne faisant intervenir que l'élargissement collisionnel dans le profil Lorentz, d'après la relation III.58 exprimant $\overline{\beta}_L$ et en supposant que l'espacement moyen des raies ne dépend pas de la pression, on peut formuler ce paramètre comme suit :

$$\overline{\beta}_L(T_{ve}, T_r, P) = \frac{\overline{\gamma}_{L_{coll}}(T_{ve}, T_r, P)}{\overline{\delta}(T_{ve}, T_r)}, \quad (\text{III.146})$$

où $\overline{\gamma}_{L_{coll}}$ est la largeur collisionnelle moyenne. Or la largeur collisionnelle d'une raie est directement proportionnelle à la pression. Donc en généralisant cette propriété à une largeur moyenne d'un ensemble de raies, on peut approximer :

$$\overline{\beta}_L(T_{ve}, T_r, P) \approx \overline{a}(T_{ve}, T_r)P. \quad (\text{III.147})$$

Cette hypothèse a été vérifiée pour les systèmes non prédissociés considérés dans notre étude

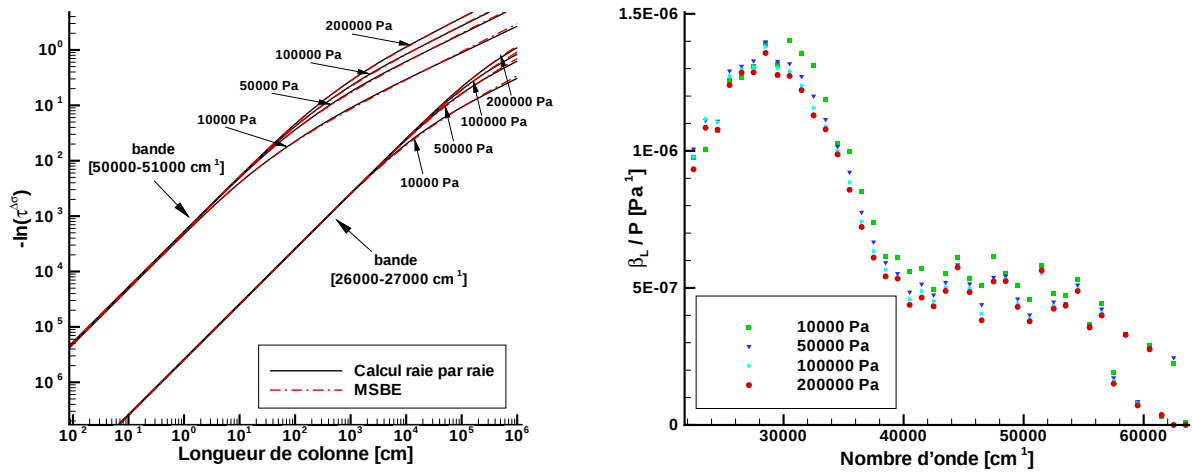


FIG. III.28: Exemples d'ajustement en régime Lorentz (à gauche) et représentation du rapport $\overline{\beta}_L/P$ (à droite) pour toutes les bandes spectrales du système $\text{NO}(\gamma)$. La température est de 9000 K et le produit xP est assuré d'être constant et égale à 1000 Pa.

i.e. $\text{NO}(\beta)$, $\text{NO}(\beta')$, $\text{NO}(\gamma)$ et $\text{NO}(\gamma')$ qui sont indiqués sur la figure III.25. La figure III.28 de droite illustre cette vérification pour le système $\text{NO}(\gamma)$ en représentant le rapport $\overline{\beta}_L/P$ pour différentes pressions où le calcul du paramètre $\overline{\beta}_L$ est issu d'ajustement de courbes de croissance en régime purement Lorentz dont la figure III.28 de gauche présente quelques exemples. On remarque sur la figure de droite que les variations du rapport $\overline{\beta}_L/P$ reste inférieures à 10 % de la valeur calculée à 1 bar, par exemple, ce qui valide l'approximation III.147.

La tabulation de $\overline{\beta}_L(T_{ve}, T_r, P)$ s'est donc résumée à la tabulation du paramètre $\overline{a}(T_{ve}, T_r)$ sur la grille de température (T_{ve}, T_r) (cf. figure III.24). En pratique, la tabulation des paramètres $\overline{\beta}_D$ et $\overline{a}$ se fait en deux étapes pour éviter un éventuel transfert de l'effet Lorentz

sur le paramètre $\overline{\beta}_D$ lors de l'ajustement. En effet, comme le montre la figure III.29¹² à titre d'exemple, plus le régime Lorentz est prononcé par rapport au régime Doppler (*i.e.* plus le rapport d augmente) et plus la transition Voigt se produit sur un faible intervalle d'épaisseur de colonne. Dans ce cas, l'ajustement d'une courbe de croissance peut donner une valeur de $\overline{\beta}_D$ « parasitée » par le régime Lorentz est donc dépendant de la pression. Pour éviter ce problème la tabulation a consisté à ajuster dans un premier temps des courbes de croissance pour une pression totale faible (1000 Pa pour une fraction molaire de NO égale à 1 ont été utilisés dans nos calculs) ce qui correspond à un régime quasi-Doppler, ceci dans le but d'obtenir un paramètre $\overline{\beta}_D$ avec des ajustements au niveau de la partie Doppler peu perturbée par la présence d'une transition Voigt. Sur la figure III.29, ce cas de figure correspond à $d = \overline{\beta}_L/\overline{\beta}_D = 0.0001$ par exemple. La deuxième étape a consisté à

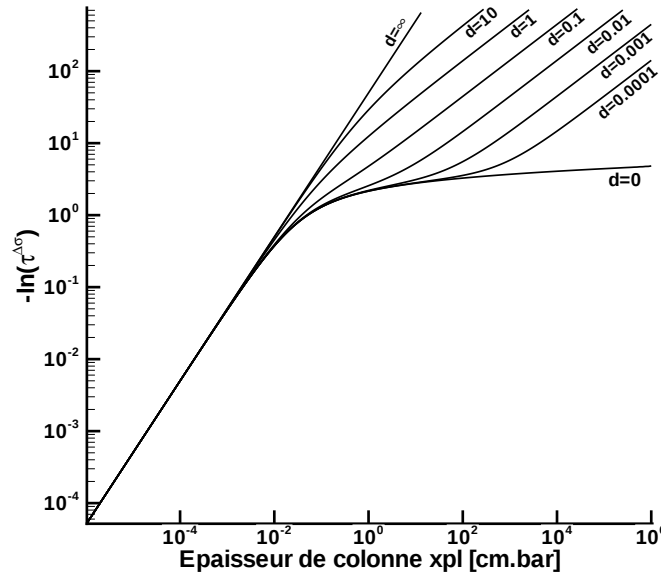


FIG. III.29: Exemple de courbes de croissance en régime Voigt pour différentes valeurs du rapport $d = \overline{\beta}_L/\overline{\beta}_D$.

ajuster les courbes de croissance calculées cette fois pour des conditions hautes pressions (1 bar en pratique pour une fraction molaire de NO égale à 1) pour déterminer $\overline{a}(= \overline{\beta}_L/P)$ en utilisant les paramètres $\overline{\beta}_D$ calculés précédemment à faible pression.

Systemes moléculaires optiquement épais prédissociés

Pour les systèmes moléculaires optiquement épais mettant en jeu un état prédissocié (cf. III.25), on peut écrire suivant le même raisonnement effectué dans le paragraphe précédent mais en rajoutant les effets prédissociatifs, que :

$$\overline{\beta}_L(T_{ve}, T_r, P) = \frac{\overline{\gamma}_{L_{coll}}(T_{ve}, T_r, P) + \overline{\gamma}_{L_{pred}}(T_{ve}, T_r)}{\overline{\delta}(T_{ve}, T_r)} \quad (\text{III.148})$$

$$\approx \overline{a}(T_{ve}, T_r)P + \overline{b}(T_{ve}, T_r), \quad (\text{III.149})$$

¹²Figure similaire à celle représentée dans les travaux de Goody et Yung [128] à la page 135

où $\overline{\gamma_{L_{pred}}}$ est la largeur prédissociative moyenne sur la bande spectrale. La dépendance en température de cette largeur provient du fait que la prédissociation est effective pour certaines raies rotationnelles de certaines bandes vibrationnelles. Son effet est donc dépendant de l'étalement éventuel des bandes et donc de la température.

Pour la tabulation des paramètres $\overline{\beta_D}$, $\overline{a}$ et $\overline{b}$ une stratégie similaire au cas des systèmes non prédissociés a été mise en place : un ajustement à faible pression (1000 Pa avec une fraction molaire de l'espèce considéré égale à 1) permet d'obtenir le paramètre $\overline{\beta_D}$ et la valeur de $\overline{\beta_L}$ à 1000 Pa. Ensuite, en fixant $\overline{\beta_D}$ à la valeur déterminée avec l'ajustement précédent, on calcule $\overline{\beta_L}$ à 1 bar et 2 bar par ajustement de courbes de croissance tracées dans ces conditions de pression (fraction molaire toujours égale à 1). Une régression linéaire est ensuite effectuée pour déterminer $\overline{a}$ et $\overline{b}$ avec les valeurs de $\overline{\beta_L}$ à 0.01 bar, 1 bar et 2 bar.

III.4.3.3 Continua

Dans le cadre d'une résolution de l'ETR avec un modèle par bande spectrale, le traitement des continua ne nécessite pas, compte tenu de leur faible dynamique spectrale, de construire un modèle spectralement corrélé comme précédemment pour obtenir la transmittivité de ces contributions¹³. Une simple tabulation des coefficients d'absorption et d'émission est par conséquent suffisante. On rappelle dans les paragraphes suivants les expressions des propriétés radiatives exposés dans la section II.2.2 en précisant le détail de la tabulation pour chaque type de processus.

Transitions libre-libre

Ce type de réaction met en jeu un électron et une particule lourde (partenaire collisionnel) qui peut être : N , O , N^+ , O^+ , N_2 ou O_2 . Les coefficients d'émission et d'absorption pour ce type de processus s'expriment dans le cadre de notre étude comme (cf. §II.2.2.2) :

$$\kappa_\sigma = \underbrace{\mathfrak{S}^{abs}(\sigma, T_e) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \right]}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n_e n^X \quad (\text{III.150})$$

$$\eta_\sigma = \kappa_\sigma L_\sigma^\circ(T_e) = \underbrace{\mathfrak{S}^{abs}(\sigma, T_e) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \right] L_\sigma^\circ(T_e)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n_e n^X, \quad (\text{III.151})$$

où n^X est la densité du partenaire collisionnel. La tabulation des paramètres se fait pour chaque type de partenaire et ne fait intervenir que la température T_e . Les paramètres moyennés sont tabulés pour chaque bande spectrale et sur la grille de température T_e indiquée par la figure III.24 en prenant $T_e = T_{ve}$.

¹³Ce constat est cependant à relativiser en ce qui concerne les résonances présentes dans les spectres de photoionisation (prise en compte des états autoionisants issus de TOPBASE) pour lesquelles les corrélations spectrales restent significatives. La décorrélation est une approximation de la modélisation retenue

Transitions lié-libre

Photoionisation atomique de N et O

Dans une approche par état de la particule absorbante (N ou O), on peut écrire suivant les hypothèses formulées dans le paragraphe II.2.2.1, les coefficients d'émission et d'absorption par état k :

$$\eta_{\sigma}^k = 2hc^2\sigma^3 \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) n_k^X \chi_k^{neq} \quad (\text{III.152})$$

$$\kappa_{\sigma}^k = \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) n_k^X \left[1 - \chi_k^{neq} \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right], \quad (\text{III.153})$$

où n_k^X est la densité de l'atome absorbant (N ou O). Ces formulations peuvent être utilisées dans le cas d'une description état par état du peuplement des états bas électroniques de la transition suivant une approche collisionnel-radiatif par exemple mais n'auront une influence que sur le calcul de l'absorption vraie. Dans le cadre de l'utilisation avec un modèle de bandes, le paramètre à tabuler serait $\overline{\mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma)}^{\Delta\sigma}$ (pour l'absorption pure) pour chaque état de N et O pour chaque bande spectrale. Ce travail n'a pas été réalisé dans le cadre de cette thèse.

Pour un peuplement Boltzmannien des états électroniques à une température T_{el} , on peut se ramener aux expressions globales suivantes en éclatant le coefficient d'absorption entre l'émission induite et l'absorption pure (cf. §II.2.2.1) :

$$\eta_{\sigma} = \underbrace{2hc^2\sigma^3 \left[\sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k^X + hc\sigma}{k_b T_e}\right) \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \right]}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} \frac{n^X}{Q_X(T_e)} \chi^{neq} \quad (\text{III.154})$$

$$\kappa_{ei,\sigma} = \underbrace{\left[\sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k^X + hc\sigma}{k_b T_e}\right) \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \right]}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} \frac{n^X}{Q_X(T_e)} \chi^{neq} \quad (\text{III.155})$$

$$\kappa_{abs,\sigma} = \underbrace{\left[\sum_k g_k \exp\left(-\frac{E_k^X}{k_b T_{el}}\right) \mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma) \right]}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} \frac{n_X}{Q_X(T_{el})}. \quad (\text{III.156})$$

Pour ce type de transitions, trois paramètres sont tabulés au lieu de deux comme pour les continua précédents. Ceci est dû à la présence du facteur χ^{neq} . La tabulation des paramètres pour N et O s'effectue pour chaque bande spectrale en fonction d'une température T_e ou T_{el} variant de la même manière que T_{ve} sur la figure III.24.

Photoionisation moléculaire de N_2 , O_2 et NO

Les expressions des coefficients d'émission et d'absorption se résument à (cf. §II.2.2.1) :

$$\eta_\sigma = \underbrace{2hc^2\sigma^3 \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \mathfrak{S}_\circ^{abs}(\sigma)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n^X \chi^{neq} \quad (\text{III.157})$$

$$\kappa_{ei,\sigma} = \underbrace{\exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right) \mathfrak{S}_\circ^{abs}(\sigma)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n_X \chi^{neq} \quad (\text{III.158})$$

$$\kappa_{abs,\sigma} = \underbrace{\mathfrak{S}_\circ^{abs}(\sigma)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n_X, \quad (\text{III.159})$$

où n^X est la densité de l'espèce photoionisée (N_2, O_2 ou NO). La tabulation est réalisée de la même manière que pour la photoionisation atomique exposée dans le paragraphe précédent.

Photodissociation de O_2 (Schumann-Runge)

Compte tenu des expressions obtenues le paragraphe II.2.2.1, les coefficients d'émission et d'absorption sont :

$$\eta_\sigma = \underbrace{2hc^2\sigma^3 \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_r}\right) \mathfrak{S}_{ETL}^{abs}(\sigma, T_r)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n^{O_2} \chi^{neq} \quad (\text{III.160})$$

$$\kappa_{ei,\sigma} = \underbrace{\exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_r}\right) \mathfrak{S}_{ETL}^{abs}(\sigma, T_r)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n^{O_2} \chi^{neq} \quad (\text{III.161})$$

$$\kappa_{abs,\sigma} = \underbrace{\mathfrak{S}_{ETL}^{abs}(\sigma, T_v)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n^{O_2}. \quad (\text{III.162})$$

En pratique on dispose de la section efficace en absorption $\mathfrak{S}_{ETL}^{abs}$ jusqu'à 10000 K. Pour des températures supérieures à 10000 K, la section efficace est fixée à $\mathfrak{S}(10000\text{ K})$. La tabulation est réalisée pour des températures allant jusqu'à 25000 K suivant la même variation que T_{ve} indiquée sur la figure III.24 et pour chaque bande spectrale.

Photodétachement de N^- et O^-

Les propriétés radiatives de ce type de processus peuvent s'écrire (cf. §II.2.2.1) :

$$\kappa_\sigma = \underbrace{\mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma, T_e) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right]}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n_k^X \quad (\text{III.163})$$

$$\eta_\sigma = \kappa_\sigma L_\sigma^\circ(T_e) = \underbrace{\mathfrak{S}_k^{abs}(\sigma, T_e) \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma}{k_b T_e}\right)\right] L_\sigma^\circ(T_e)}_{\text{paramètre moyenné et stocké par bande}} n_k^X, \quad (\text{III.164})$$

où n_k^X est la densité de l'état $N^-(3P)$ ou $O^-(2P)$. Les paramètres moyennés sont tabulés de la même manière que pour les transitions libre-libre.

III.4.3.4 Atomes

Certaines des raies atomiques issues de transitions de N , O , N^+ et O^+ , notamment les raies dites de résonance, sont optiquement épaisses dans les plasmas de rentrée atmosphérique (cf. figure III.3 de gauche). Pour tenir compte de leur contribution dans la résolution de l'ETR formulée par bande spectrale (équation III.46), une construction partielle d'un MSBE, similaire à celui construit précédemment pour les systèmes moléculaires optiquement épais, a été réalisée afin d'obtenir les transmittivités moyennes des atomes et des ions. Dans une première approche, des calculs ont été effectués en supposant un peuplement des états électroniques suivant une distribution Boltzmannienne à la température T_{el} . L'élargissement des raies est dû à l'effet Doppler et aux collisions avec les particules neutres et chargées. Ce dernier, l'effet Stark, dépendant du taux d'ionisation du plasma, devient le phénomène dominant à partir d'une température d'équilibre de 10000 K. Une dépendance supplémentaire en la fraction molaire des électrons x_e , est à prendre en compte dans la paramétrisation. Dans ces conditions, un profil Voigt est utilisé pour tenir compte de ces deux types d'élargissement. Une formulation du MSBE en Voigt a ainsi été utilisée. La construction du modèle s'appuie comme précédemment sur une méthode d'ajustement de courbes de croissance. Cependant l'utilisation d'un tel modèle n'a pas donné de résultats satisfaisants en comparaison à des calculs raie par raie. Ceci s'explique en majeure partie par la faible densité spectrale que présentent les raies atomiques dans certaines régions du spectre. En effet une hypothèse importante sur laquelle repose toute la théorie de la famille des modèles statistiques est que le nombre de raies doit être suffisamment élevé sur chaque bande spectrale afin que le traitement statistique des raies puisse représenter correctement la réalité. Les figures III.30 montrent un exemple de spectre de l'azote à 10000 K. La faible densité des raies est apparente en particulier dans les régions de l'UV et du VUV avec seulement quelques raies sur des intervalles de quelques milliers de cm^{-1} .

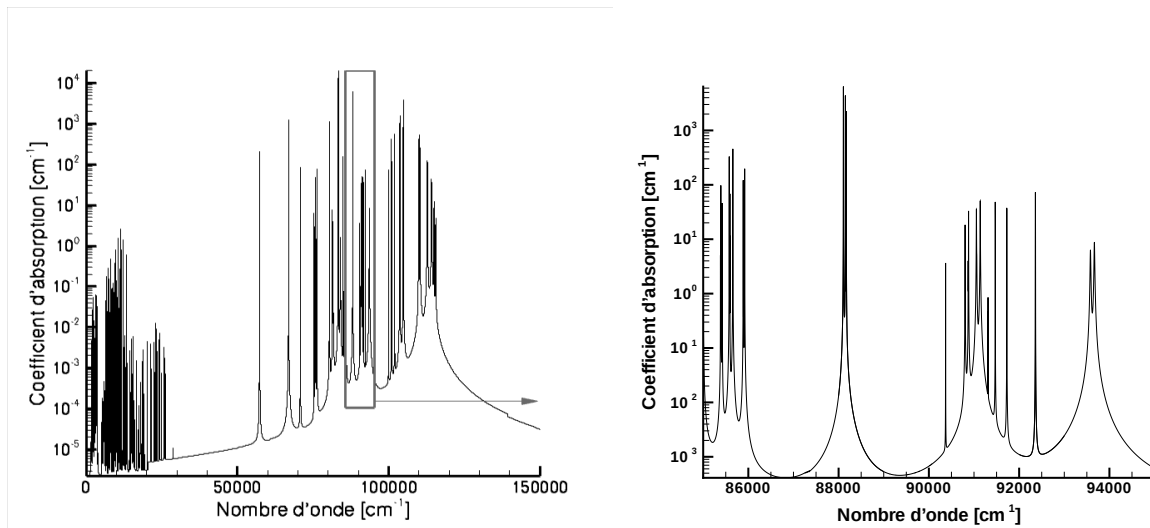


FIG. III.30: Spectres d'absorption des raies atomiques de l'azote à 10000 K, sous 1 bar avec les fractions molaires d'azote $x_N=0.5$ et d'électrons $x_e = 0.01$.

Dans ce cas les courbes de croissance peuvent présenter des comportements atypiques qui ne peuvent être reproduits par les expressions analytiques du MSBE utilisées précédemment pour les molécules. Les figures III.31 illustrent les deux types de comportements de courbes

de croissance qui sont représentatifs d'une bande spectrale de 1000 cm^{-1} contenant peu de raies. La figure de gauche présente une courbe de croissance d'un multiplet indiquée sur le spectre de la figure III.30 de droite au voisinage de 88000 cm^{-1} . Les ondulations correspondent aux différents régimes d'absorption des raies du multiplet. Dans ce cas l'ajustement de la courbe de croissance avec le MSBE est satisfaisant pour le premier régime Doppler observé pour la raie la plus intense. Ensuite, la courbe ajustée du MSBE passe en régime Lorentz en se plaçant sur une moyenne des ondulations des courbes de croissance en raie par raie. Des écarts importants sont observés au niveau des « ventres » des ondulations. Un autre type de comportement atypique est celui indiqué sur la figure de droite qui représente l'allure d'une courbe de croissance de la bande spectrale $[92000-93000 \text{ cm}^{-1}]$ du spectre III.30 de droite qui contient une seule raie, elle-même dans des ailes de raies de magnitudes importantes provenant de bandes adjacentes. Ceci se traduit par un comportement linéaire de la courbe de croissance dû à la saturation de la bande comme expliqué dans la section III.4.1.4 mais pour des longueurs de colonnes plus petites dans ce cas-là, à cause des ailes des raies appartenant aux bandes adjacentes. L'ajustement des courbes, obtenues avec les lois analytiques du modèle qui ne prédisent pas ce type de comportement, ne permet alors pas de déterminer des paramètres $\overline{\beta_D}$ et $\overline{\beta_L}$ qui correspondent à des comportements physiques. Des tests ont été réalisés avec des bandes plus larges, jusqu'à 5000 cm^{-1} , pour tenter d'augmenter le nombre de raies et ainsi retomber sur des comportements classiques, mais ceci n'a pas donné de résultats satisfaisants pour les mêmes raisons.

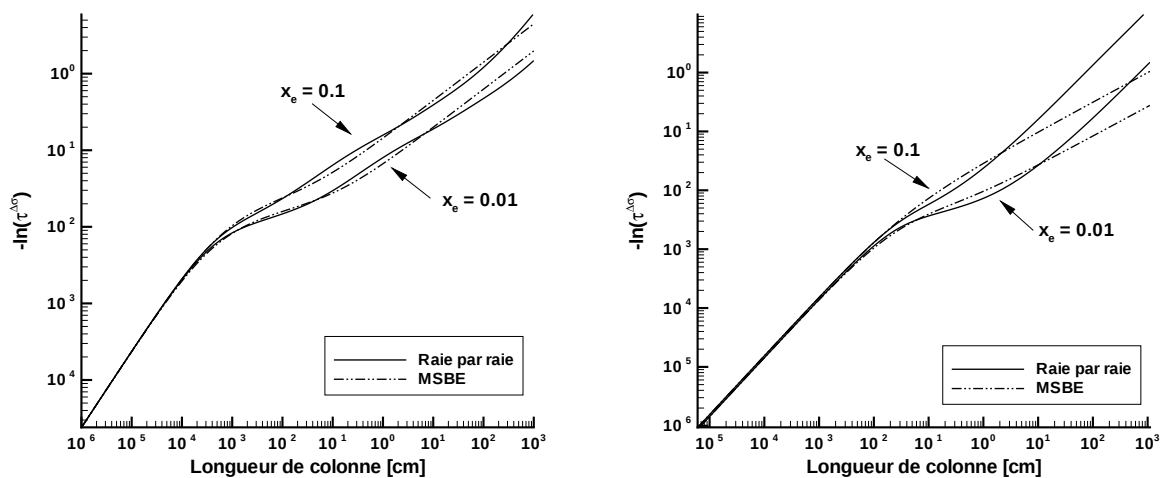


FIG. III.31: Exemples de courbes de croissance présentant un comportement atypique. Les conditions thermophysiques sont celles indiquées sur la figure III.30 pour $x_e = 0.1$ et $x_e = 0.01$. Les bandes spectrales sont $[88000-89000 \text{ cm}^{-1}]$ (à gauche) et $[92000-93000 \text{ cm}^{-1}]$ (à droite).

Des résultats plus globaux sont représentés sur les figures III.32, où des transmittivités moyennes pour l'azote et l'oxygène sont tracées pour les zones spectrales ayant une faible densité de raies *i.e.* de l'UV au VUV. Hormis sur quelques bandes, les écarts observés avec les calculs raies sont satisfaisants. Ceci est dû au fait que les ajustements permettent de déterminer des paramètres qui ne sont certes pas physiques mais qui modélisent assez bien la transmittivité d'une colonne homogène. Le problème se pose pour une utilisation du MSBE en milieu hétérogène et anisotherme puisque les approches retenues dans notre étude, celles de type de Curtis-Godson, reposent sur une sorte de « moyenne » des para-

mètres de chaque colonne traversée le long du trajet optique. La figure III.33 illustre le cas de deux colonnes homogènes de pression totale et de fraction molaire d'électrons identiques mais de température et de fraction molaire d'azote différentes. Les dimensions et les propriétés thermochimiques des colonnes sont dans l'ordre de grandeur de celles que l'on peut rencontrer dans les problèmes de rentrées atmosphériques. On représente sur la graphe a) la grandeur ξ pour chaque bande spectrale :

$$\xi = \overline{(1 - \tau_1)\tau_2} = \overline{\tau_2} - \overline{\tau_1\tau_2}, \quad (\text{III.165})$$

issue d'un calcul raie par raie, où $\overline{\tau_2}$ est la transmittivité moyenne de la colonne 2 et $\overline{\tau_1\tau_2}$ la moyenne de la transmittivité des deux colonnes. Le paramètre ξ , qui représente la moyenne du produit de l'émissivité de la première colonne avec la transmittivité de la deuxième, permet de quantifier la grandeur $\partial\tau^{\Delta\sigma}(l \rightarrow l_w)/\partial l$ (intégrée sur une maille homogène) qui est utilisée dans l'équation III.47 et qui permet d'évaluer plus efficacement la précision du modèle en milieu non uniforme plutôt que d'évaluer simplement $\overline{\tau_1\tau_2}$. Comme indiqué dans la section III.4.2.3, pour déterminer $\overline{\tau_1\tau_2}$, l'approche de Curtis-Godson classique détaillée dans Young [135] et présentée dans la section III.4.2 a été mise en œuvre pour déterminer les paramètres $\overline{\beta_D^*}$ et $\overline{\beta_L^*}$ et obtenir ainsi le paramètre ξ^{MSBE} . Le graphe b) de la figure III.33 montre l'écart relatif entre calcul raie par raie et MSBE qui dépasse fréquemment les 20% et peut atteindre jusqu'à 60%. Par ailleurs, pour des colonnes présentant de plus des variations de fraction molaire en électrons libres, les écarts observés augmentent et peuvent atteindre plus de 100%. Ces différences proviennent de deux raisons. La première est le fait que l'approche de Curtis-Godson, comme expliqué dans [135], engendre des erreurs qui sont d'autant plus grandes que la variation de la largeur des raies est grande. La deuxième, et la plus importante dans notre cas, est que l'on mélange des paramètres de colonnes homogènes qui ne représentent pas correctement la physique et qui donnent par conséquent des résultats imprécis lors d'une utilisation en milieu non uniforme. Ces erreurs introduites par le MSBE pour les atomes sont trop importantes pour envisager l'utilisation d'un tel modèle pour en compte le rayonnement des atomes (lié-lié).

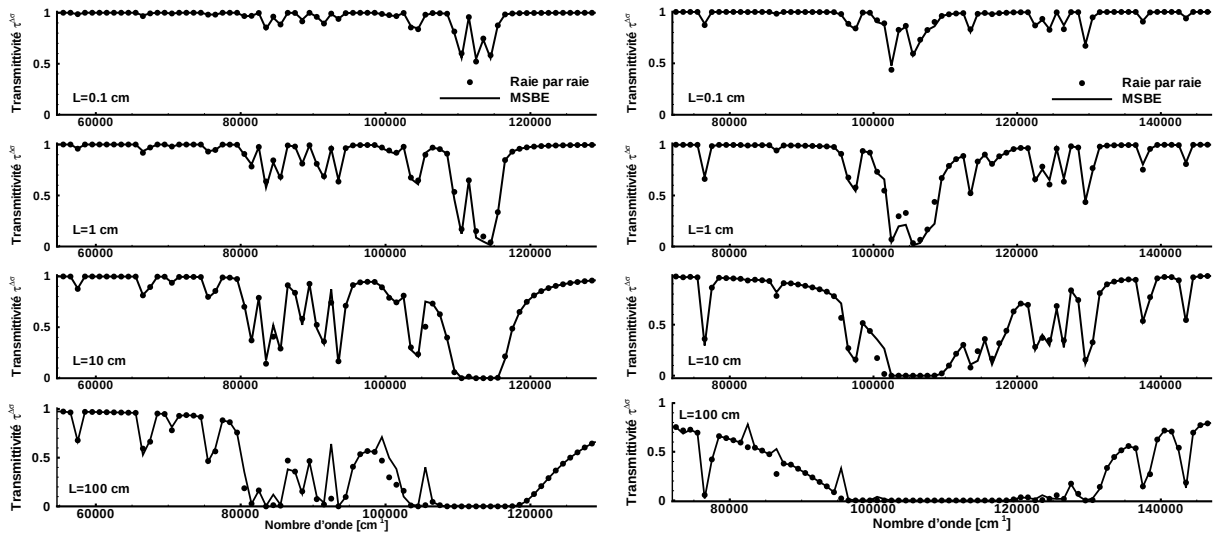


FIG. III.32: Transmittivités moyennes de colonnes de différentes longueurs pour l'azote (à gauche) et l'oxygène (à droite) pour des conditions thermophysiques respectives de 10000 K et 7000 K sous 1 bar avec les fractions molaires ($x_N = 0.9$, $x_e = 0.1$) et ($x_O = 0.9$, $x_e = 0.1$).

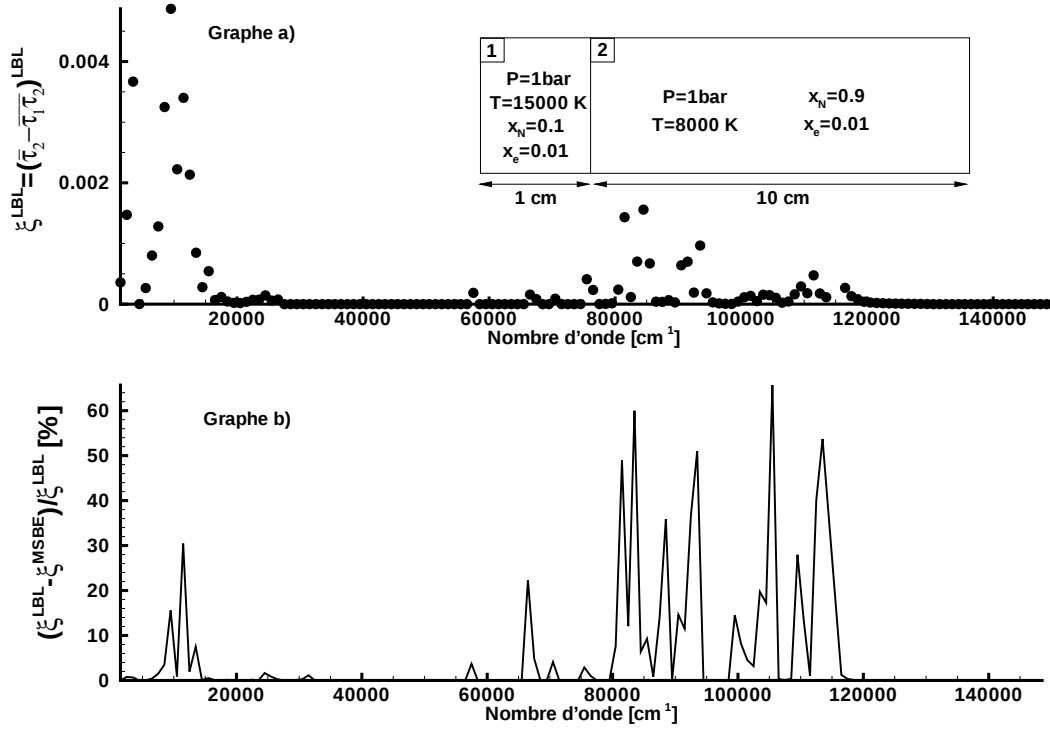


FIG. III.33: Le graphe a) représente le paramètre $\xi = \overline{\tau}_2 - \overline{\tau}_1\overline{\tau}_2$ calculé en raie par raie avec des transmittivités moyennées de l'azote sur des bandes de 1000 cm^{-1} pour deux colonnes adjacentes de longueurs et de propriétés thermochimiques différentes. Le graphe b) indique l'écart relatif entre la valeur de ξ donnée par le calcul raie par raie et celle donnée par le MSBE.

Par la suite, la solution retenue pour traiter les atomes est de conserver l'approche raie par raie. Cette solution est en pratique envisageable compte tenu du fait que le nombre de raies atomiques et ioniques s'élève à peine à quelques milliers contrairement aux molécules qui présentent des spectres de plusieurs millions de raies. Dans notre cas, ceci permet en outre de s'affranchir d'une paramétrisation et d'une construction complexe à réaliser afin de traiter les atomes en modèle de bandes dans le cadre d'une description état par état (type collisionnel-radiatif) des niveaux électroniques des atomes. La formulation de l'ETR qui résulte de ce choix est similaire à l'équation III.46, hormis le fait que les atomes sont traités en monochromatique et que dans ce cas, pour chaque nombre d'onde, l'absorption d'une raie atomique par les autres contributions (systèmes moléculaires et continua) est traitée en utilisant leurs transmittivités moyennées de la bande spectrale dont le nombre d'onde appartient.

III.5 Validations et limites du MSBE

L'objectif de cette section est d'évaluer la précision du modèle statistique à bande étroite élaboré dans la section précédente pour les systèmes moléculaires optiquement épais dans notre application (cf. figure III.25). Cette évaluation se fait en deux étapes. Dans la première, la qualité des ajustements des courbes de croissance en régime Voigt, avec les formulations analytiques exposées dans la section III.4.1, est testée en considérant un milieu

uniforme. Dans la deuxième, le précision de l'approche classique de Curtis-Godson exposée dans la partie III.4.2 est testée en considérant un milieu hétérogène.

III.5.1 Milieux uniformes

On présente d'abord les validations effectuées système par système puis pour le cas de mélanges.

III.5.1.1 Validations système par système

La qualité d'un modèle en milieu homogène peut être évaluée en comparant des émissivités de colonne de longueur l pour chaque contribution calculées suivant une approche raie par raie (solution de référence) et l'approche MSBE. Plus concrètement, sont calculées pour chaque système les grandeurs $Ecart$ et $Ecart_max$ données par les expressions suivantes :

$$Ecart(l) = \frac{1}{N_{bande}} \sum_{i=1}^{N_{bande}} \frac{|\overline{\epsilon_i(l)}^{LBL} - \overline{\epsilon_i(l)}^{MSBE}|}{\overline{\epsilon_i(l)}^{LBL}} \times 100 \quad (III.166)$$

$$Ecart_max(l) = \max \left(\frac{|\overline{\epsilon_i(l)}^{LBL} - \overline{\epsilon_i(l)}^{MSBE}|}{\overline{\epsilon_i(l)}^{LBL}} \times 100, i \in [1, N_{bande}] \right), \quad (III.167)$$

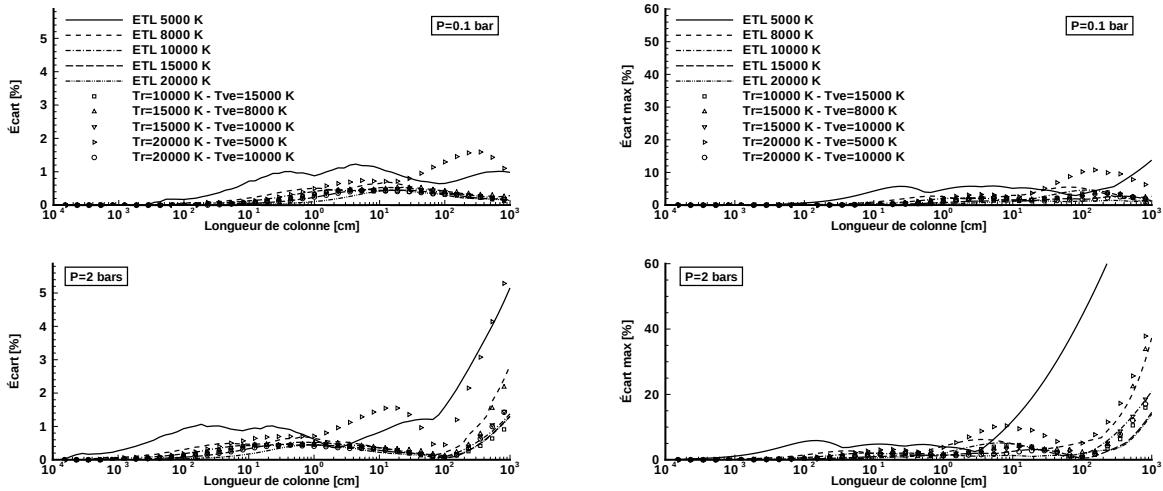


FIG. III.34: Représentation des grandeurs $Ecart$ (Figures de gauche) et $Ecart_max$ (Figures de droite) définies par les relations III.166 et III.167 pour le système N_2 (Birge-Hopfield 1) en fonction de la longueur de la colonne homogène pour différentes conditions thermophysiques et une fraction molaire de l'espèce toujours égale à 1.

où N_{bande} est le nombre de bandes spectrales de 1000 cm^{-1} nécessaires pour traiter le système considéré, $\overline{\epsilon_i}^{LBL}(l)$ l'émissivité moyenne de la bande spectrale i du système pour

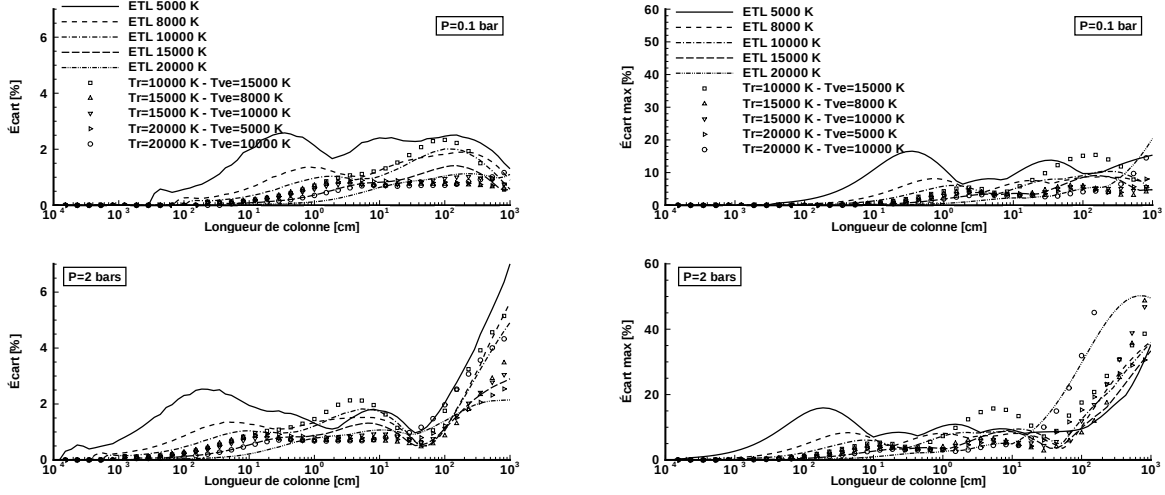


FIG. III.35: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système N_2 (Birge-Hopfield 2).

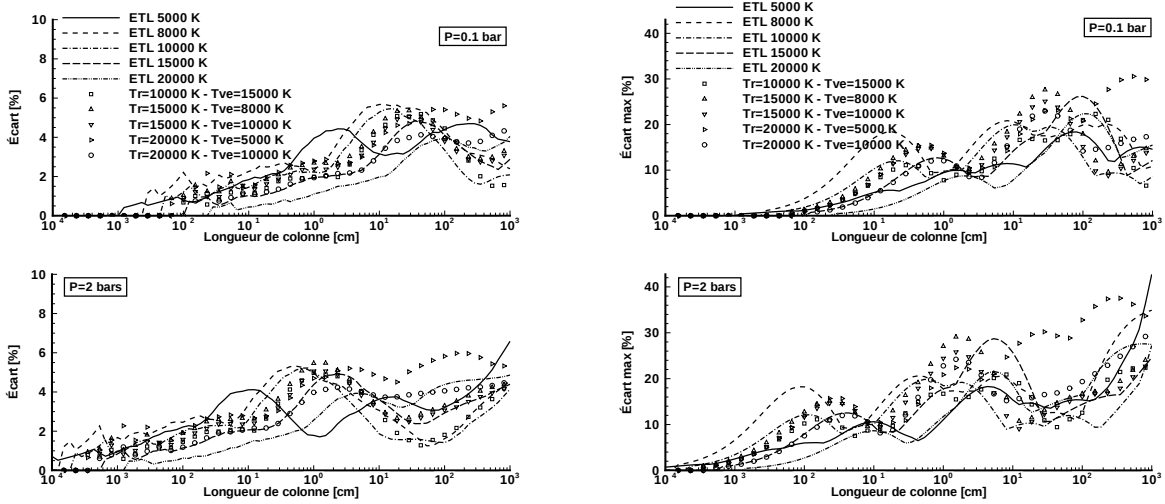


FIG. III.36: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système N_2 (Carroll-Yoshino).

une longueur de colonne l , calculée en raie par raie (LBL) et $\bar{\epsilon}_i^{MSBE}$ celle déterminée avec le MSBE. La grandeur *Ecart* représente la moyenne de la valeur absolue des écarts observés sur chaque bande. Cette grandeur est plus élevée que l'écart global portant simplement sur les émissivités totales qui est donné par la relation suivante :

$$Ecart_global(l) = \frac{1}{N_{bande}} \sum_{i=1}^{N_{bande}} \frac{|\bar{\epsilon}_i(l)^{LBL} - \bar{\epsilon}_i(l)^{MSBE}|}{\bar{\epsilon}_{tot}(l)^{LBL}} \times 100, \quad (III.168)$$

avec $\bar{\epsilon}_{tot}^{LBL}(l)$ la moyenne de l'émissivité de chaque bande du système. Cependant la grandeur *Ecart* permet de mieux quantifier les erreurs engendrées par le modèle sur chaque bande et ainsi de mieux estimer la qualité des ajustements pour toutes les bandes. De plus pour tenir compte uniquement des bandes spectrales où il y a de l'absorption *i.e.* pour lesquelles il y a un intérêt à utiliser les paramètres du modèle, la somme de l'équation III.166 est réalisée pour $\bar{\epsilon}_i^{LBL} \geq 0.01$ ou $\bar{\epsilon}_i^{MSBE} \geq 0.01$ (la valeur de N_{bande} correspond alors au nombre de bandes qui vérifient ces conditions pour une longueur donnée). La grandeur

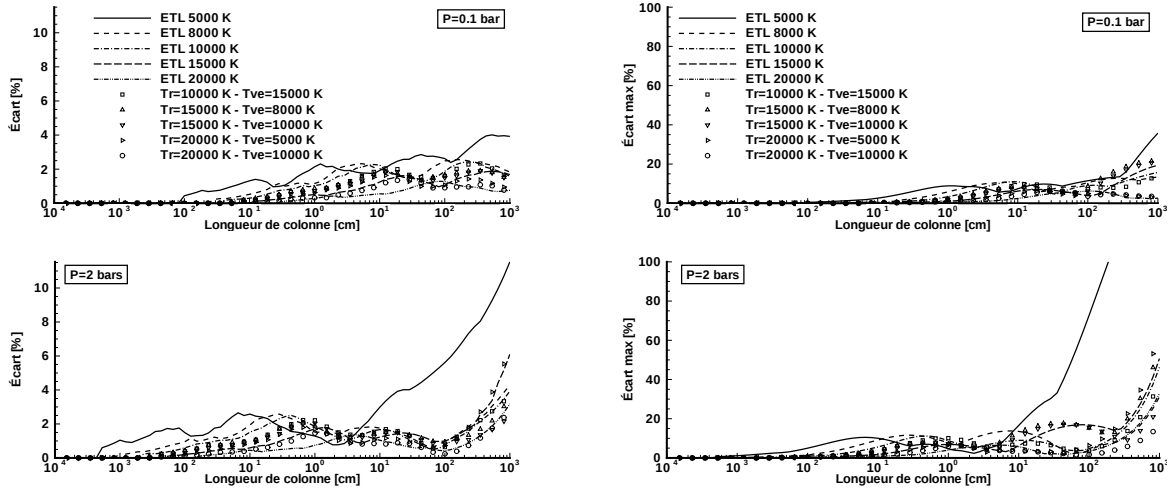


FIG. III.37: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système N_2 (Worley).

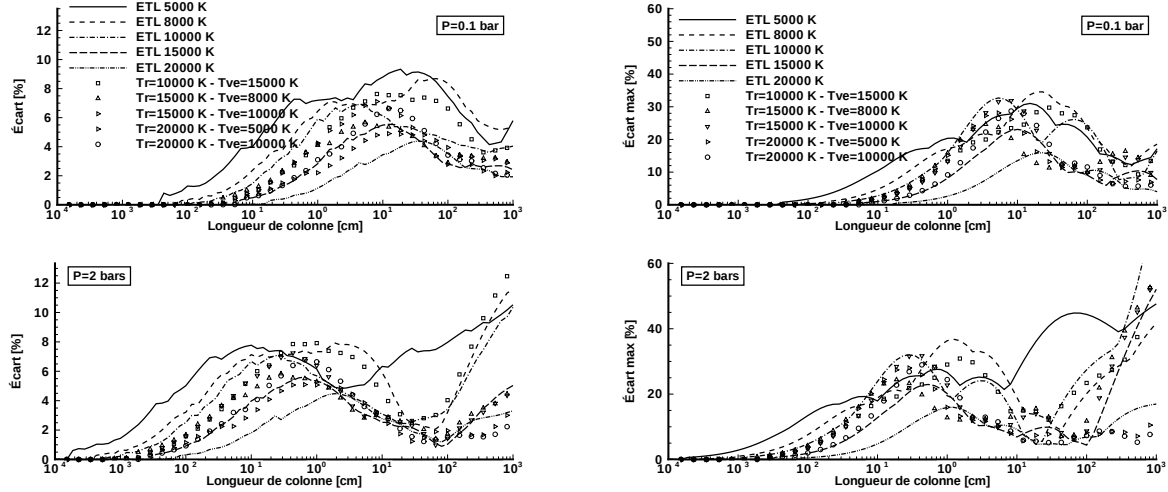


FIG. III.38: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système N_2 (Worley-Jenkins).

$Ecart_max$ définie par la relation III.167 représente l'écart maximal observé sur une bande parmi l'ensemble des écarts observés sur toutes les bandes pour une longueur fixée. Le seuil ($\overline{\epsilon}_i^{LBL} \geq 0.01$) utilisé précédemment a également été appliqué dans ce cas.

Les figures III.34 à III.45 représentent ces deux grandeurs pour l'ensemble des systèmes considérés comme optiquement épais dans notre application pour des longueurs de colonnes allant jusqu'à 10 m. Différentes conditions thermophysiques sont testées : cas basse et haute pression pour des températures à l'ETL allant 5000 K à 20000 K et cas de déséquilibre thermique avec différents couples de températures (T_r, T_{ve}). L'ensemble de ces conditions est représentatif des champs de pression et de températures que l'on peut rencontrer dans les couches de choc de rentrée.

Une remarque générale sur l'ensemble des figures III.34 à III.45 de gauche représentant la moyenne des écarts est que, hormis pour des épaisseurs optiques dépassant plusieurs mètres atmosphère d'espèce absorbante où la moyenne des écarts peut atteindre 10%, l'ensemble des résultats quelque soit la condition de température, présentent des écarts inférieurs à 5%.

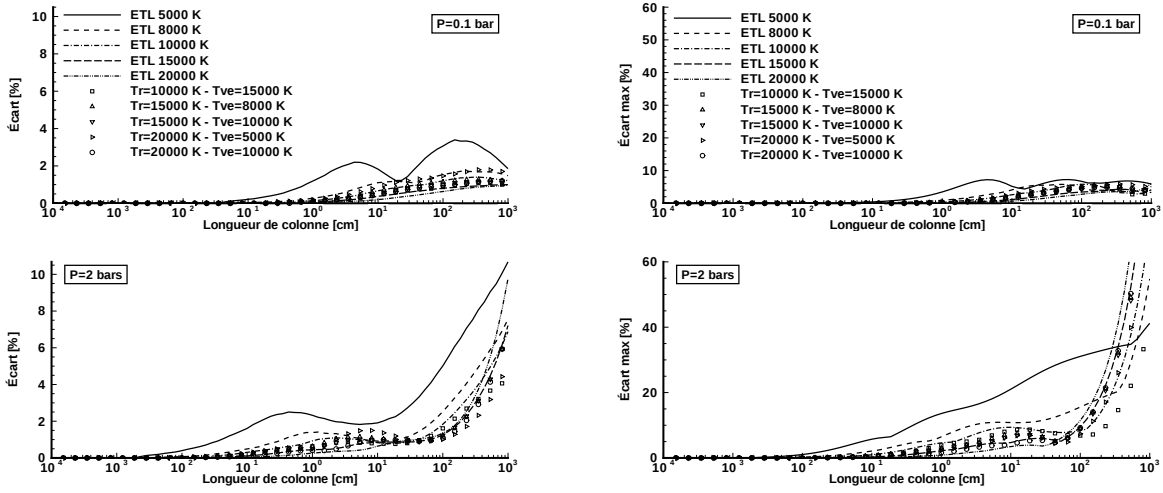


FIG. III.39: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système NO (β).

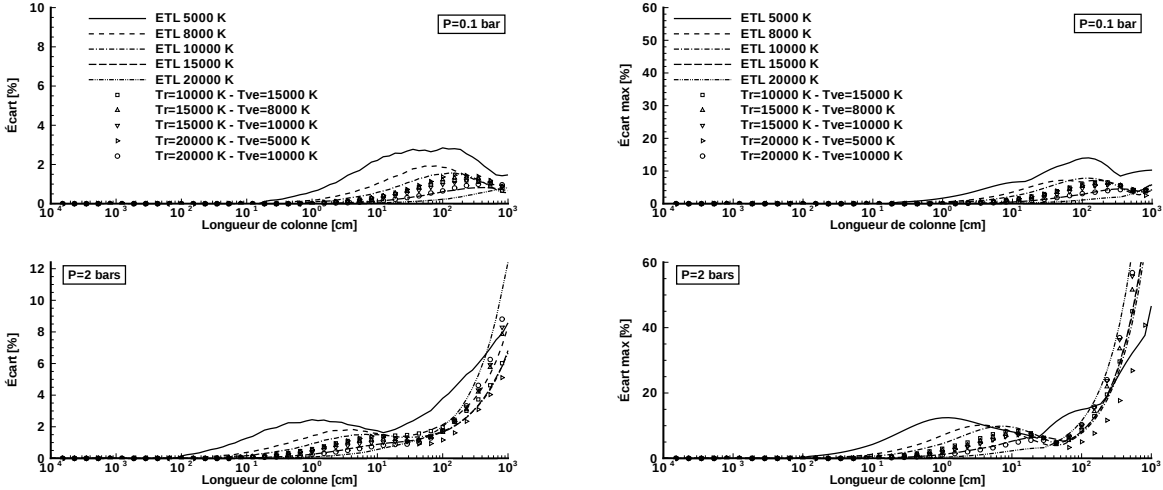
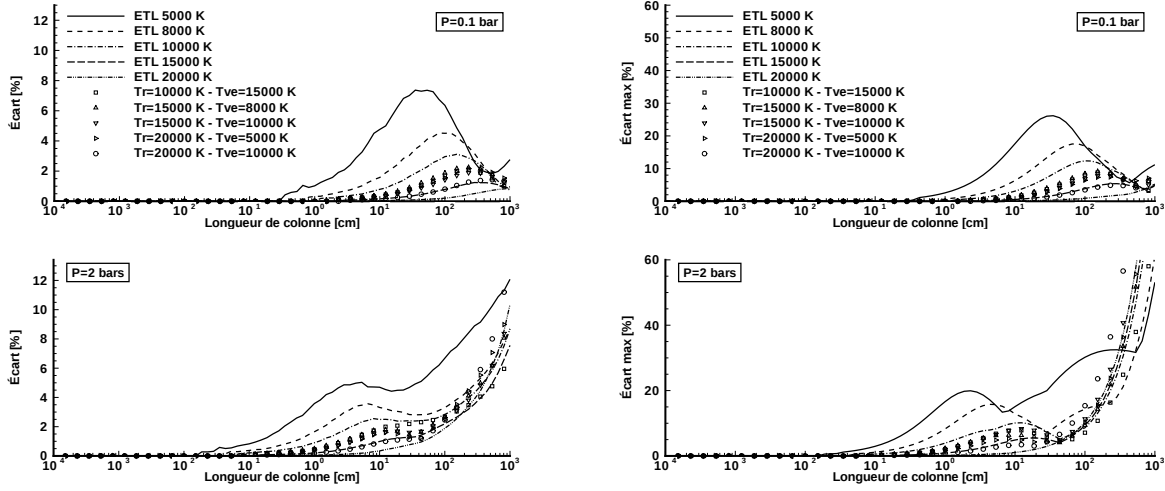
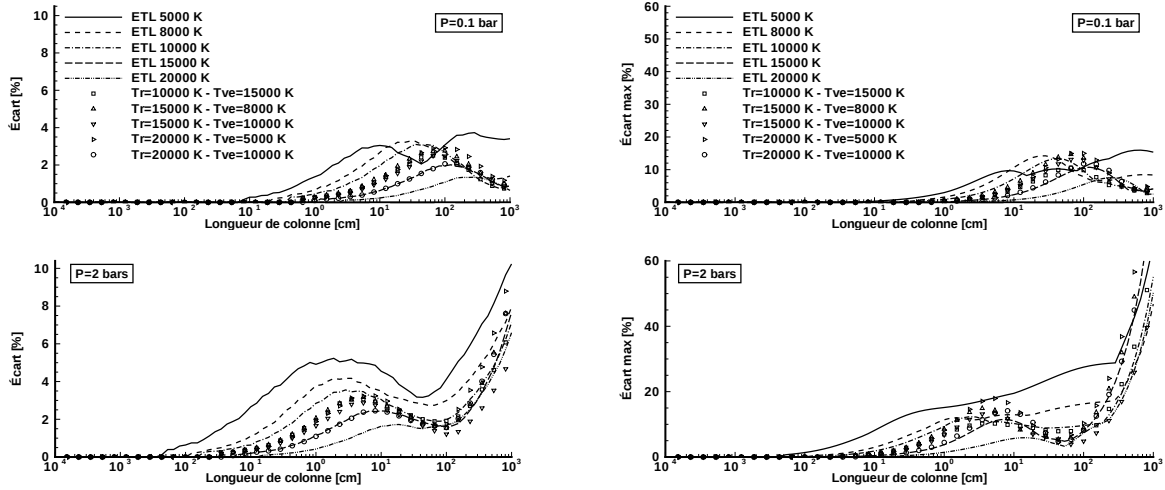


FIG. III.40: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système NO (β').

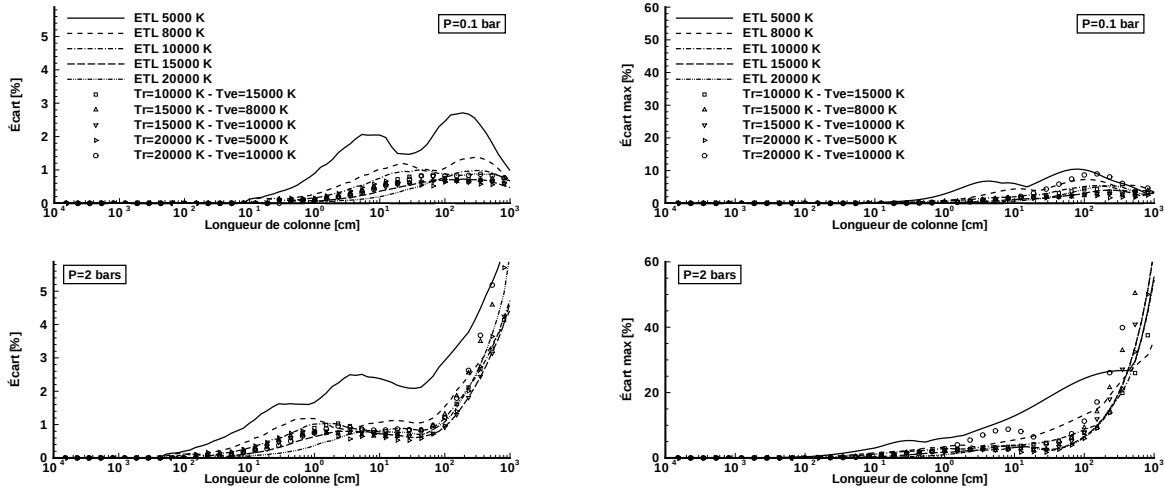
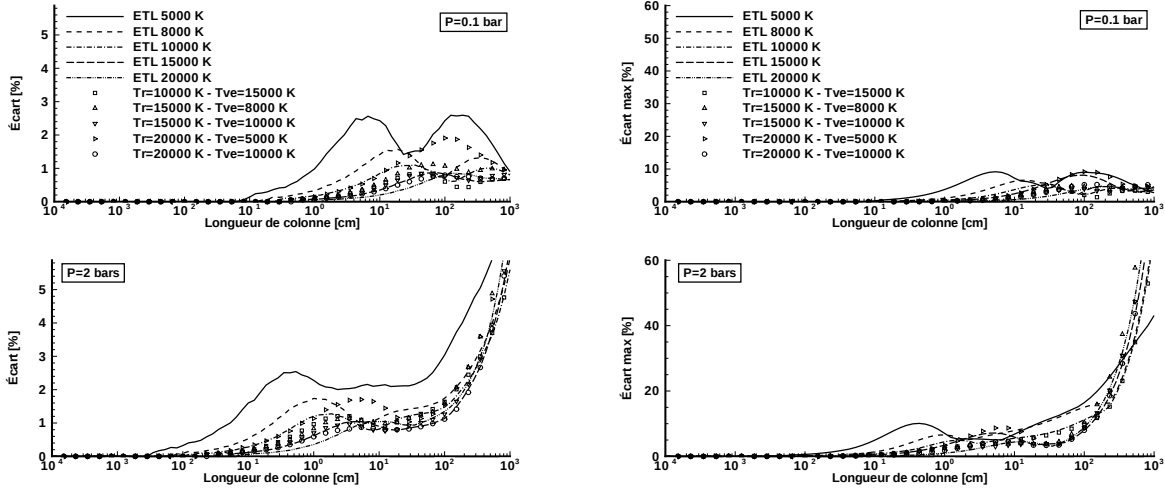
Les écarts maximaux définis par la relation III.167 et indiquée sur les figures de droites, ne dépassent pas 20 à 30 % pour des épaisseurs optiques raisonnables *i.e.* inférieures à un mètre atmosphère au maximum. En revanche, passée cette limite, les écarts croissent rapidement pour atteindre dans ce cas plus de 60%. Ce comportement est généralement remarqué pour toutes les conditions de température. Cette augmentation des écarts engendrée par l'utilisation du MSBE pour des épaisseurs optiques importantes a deux origines. La première est que l'ajustement des courbes de croissance utilisé pour déterminer les paramètres du MSBE a été réalisé en considérant une épaisseur optique maximale de 4 m.atm. Jusqu'à cette épaisseur, certaines bandes spectrales présentent des courbes de croissance complètement linéaires et ont donc été considérées comme optiquement mince lors de l'ajustement (pas de calculs de β_D et β_L). Dans le cas où ces mêmes bandes absorbent en régime Doppler ou Lorentz au-delà de 4 m.atm, le modèle ne permet donc pas de correctement représenter cette absorption. La deuxième origine est qu'en régime de forte absorption (fortes épaisseurs optiques), les courbes de croissance peuvent présenter un comportement asymptotique linéaire (après une loi en $\sqrt{l}$, cf. §III.4.1.4) qui n'est pas pris en compte par le modèle. Il n'est

FIG. III.41: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système NO (γ).FIG. III.42: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système NO (γ').

donc pas surprenant d'observer pour la majorité des systèmes une augmentation importante des écarts aux alentours de 1 m.atm.

Par ailleurs, on observe de manière générale que les écarts observés entre MSBE et calcul raie par raie sont d'autant plus importants que les températures sont basses. Ceci est dû à deux effets. Le premier est un effet de dilution. À pression constante, plus la température de translation des particules lourdes (ici T à l'ETL ou T_r hors ETL) diminue et plus la densité des particules augmente. Les effets de l'absorption ont lieu pour des longueurs de colonnes plus faibles ce qui a tendance à augmenter les écarts entre modèle et calculs raie par raie puisque les ajustements sont généralement moins précis à partir de la transition Voigt des courbes de croissance. Le deuxième effet provient de l'étalement des spectres qui est moins prononcé lorsque la température de rotation diminue. En effet, l'intensité S d'une raie est proportionnelle en première approximation à :

$$S \propto (2J + 1) \exp\left(-\frac{B_v J(J + 1)}{k_b T_r}\right), \quad (\text{III.169})$$

FIG. III.43: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système NO (δ).FIG. III.44: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système NO (ϵ).

où J est le nombre rotationnel caractérisant l'état bas de la transition et B_v la constante spectroscopique rotationnelle associée au nombre vibrationnel v de l'état bas. Par conséquent, plus la température de rotation T_r est élevée et plus l'intensité des raies « chaude » est grande, uniformisant ainsi la distribution des intensités des raies des spectres d'absorption. Les figures III.46 de gauche montre l'effet de cet étalement des raies sur une partie du spectre du système N_2 (Worley) lorsque la température augmente de 5000 K à 15000 K. À basse température, les spectres moléculaires peuvent présenter une structure irrégulière en « dents de scie », laquelle peut engendrer des courbes de croissance présentant des comportements non ajustables avec le modèle. La figure III.46 en haut à droite illustre ce cas, en représentant la courbe de croissance issue d'un calcul raie par raie d'une bande spectrale contenant une ou plusieurs têtes de bandes et la queue d'autres bandes vibrationnelles. Cette courbe présente un régime linéaire classique pour des longueurs de colonne faibles puis un régime d'absorption correspondant à la saturation des raies de la zone 1 (*i.e.* les raies de la tête de bande vue sur le spectre en haut à gauche) et ensuite un deuxième régime d'absorption correspondant à la zone 2 qui ne s'inscrit pas dans la continuité du régime précédent à cause

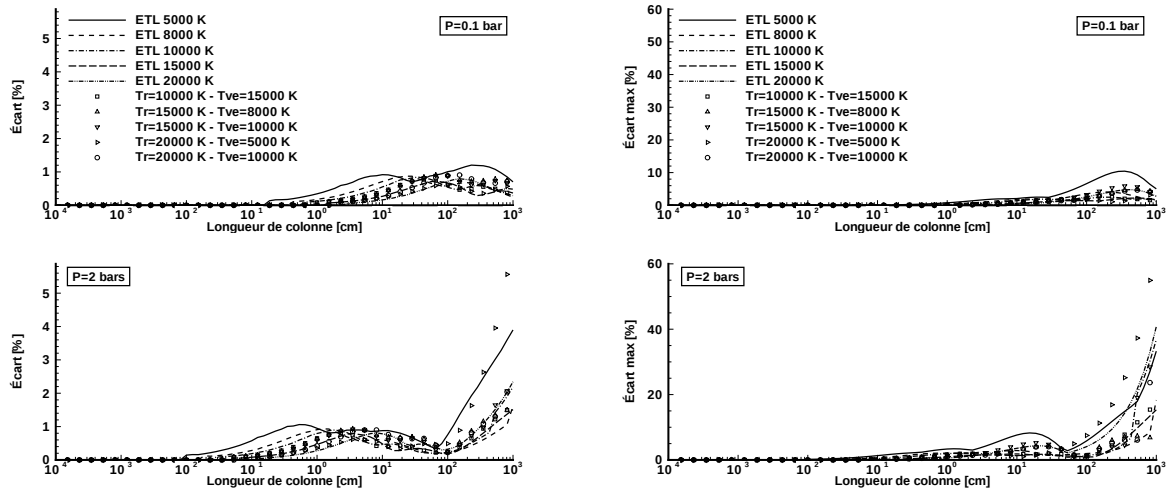


FIG. III.45: Figures identiques à celles de III.34 mais pour le système O_2 (Schumann-Runge).

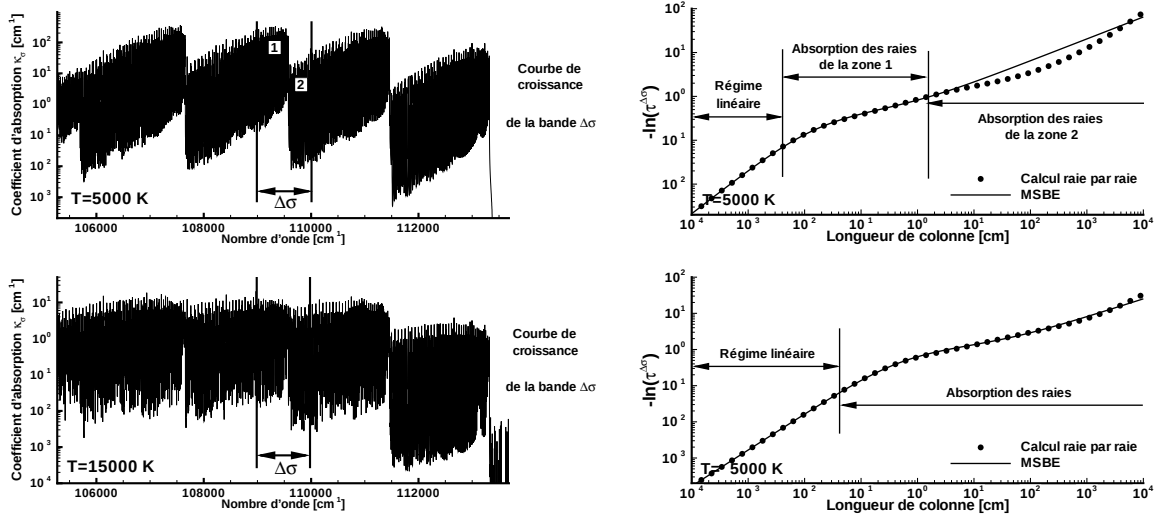


FIG. III.46: Parties de spectre du système N_2 (Worley) (à gauche) et courbes de croissance associées à la bande spectrale $\Delta\sigma$ calculées avec une approche raie par raie et avec le MSBE (à droite). La pression est de 2 bar de N_2 pur.

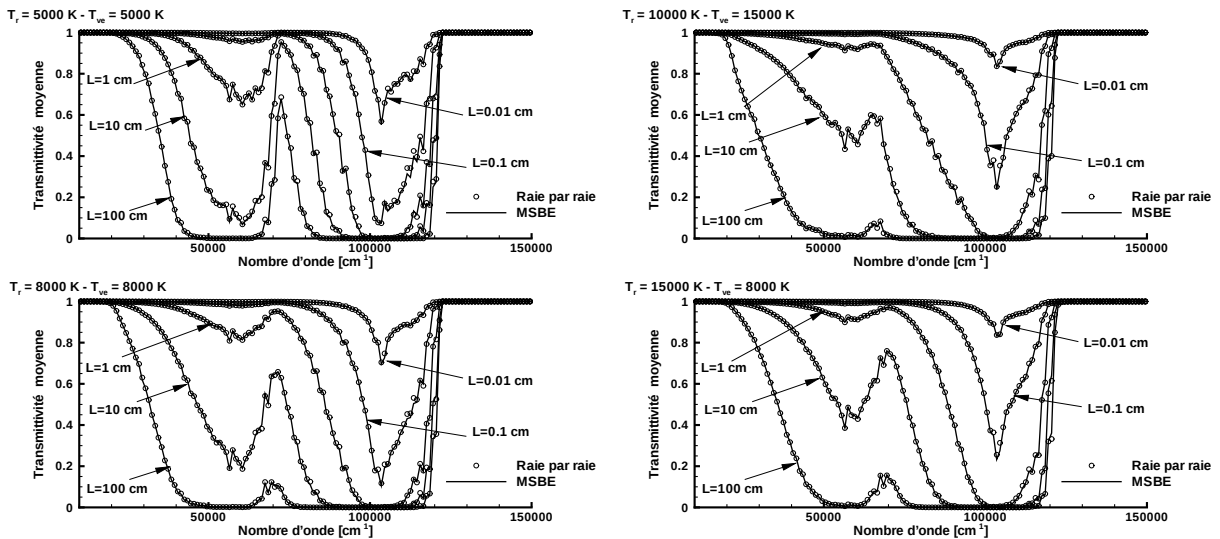
du saut des intensités des raies entre les deux zones. L'ajustement avec le modèle permet dans cette situation d'ajuster le régime linéaire et le premier régime d'absorption mais ne permet pas de prendre en compte ce saut compte tenu du fait que les lois de distributions des intensités des raies (équations III.51 à III.53) utilisées dans la formulation du MSBE sont continues. Dans ce cas, les erreurs entre modèle et approche raie par raie peuvent alors être importantes sur certaines bandes, de l'ordre de celles indiquées par la grandeur $Ecart_max$ sur les figures III.34 et III.45. Cette sensibilité à la température est d'autant plus importante que les systèmes présentent une structure spectrale peu étalée. C'est le cas par exemple des systèmes N_2 (Carroll-Yoshino) et N_2 (Worley-Jenkins). Les ondulations des écarts qui correspondent aux croisements successifs des courbes de croissance calculées en raie par raie et en utilisant le MSBE présentent alors des amplitudes plus importantes pour de tels systèmes (cf. figures III.36 et III.38).

À noter que pour conforter l'ensemble de ces résultats, d'autres tests ont été réalisés sur d'autres couples de température et ont abouti aux mêmes conclusions à savoir que la moyenne des écarts ne dépasse généralement pas 5% pour des températures supérieures à 5000 K et qu'aux plus basses températures, elle peut atteindre 30% mais à partir d'épaisseurs optiques de l'ordre de 1 cm.atm d'espèce absorbante ce qui, dans le cas pratique pour ces faibles températures, n'est jamais rencontré dans notre application puisque les basses températures sont localisées dans la couche limite sur des épaisseurs optiques inférieures à 1 cm.atm.

III.5.1.2 Validations pour un mélange

Les graphes de la figure III.47 montrent des comparaisons entre des transmittivités moyennes globales calculées avec l'approche raie par raie et celle du MSBE pour un mélange N_2 , O_2 et NO dans différentes conditions de température (à l'ETL et hors ETL). L'ensemble des systèmes moléculaires optiquement épais dans notre application (cf. tableau III.1) sont considérés pour déterminer ces transmittivités. Pour ces conditions, on remarque que le mélange absorbe aussi bien dans la région spectrale des systèmes du N_2 (VUV) que dans la région des systèmes de NO (UV-VUV), mais pour ces derniers dans une moindre mesure. On constate de plus que l'accord entre calculs raie par raie et MSBE est excellent. Ceci valide en partie l'hypothèse de décorrélation faite sur l'absorption des différents systèmes (hypothèse utilisée dans la section III.3.2 afin de simplifier l'ETR) et l'approche MSBE pour traiter des milieux uniformes.

La figure III.48 permet de comparer les résultats obtenus en approche raie par raie, en MSBE et en coefficient d'absorption moyen appelé aussi régime d'absorption faible ou « Smeared absorption » utilisée fréquemment dans la littérature dans les problèmes de rentrée atmosphérique [21, 27]. La comparaison montre que lorsque les systèmes (en particulier les N_2 (VUV)) commencent fortement à absorber (à partir de 0.1 cm dans cette situation), l'approximation de l'absorption faible engendre des écarts importants avec les calculs raie par raie alors que le MSBE donne encore de très bons résultats.



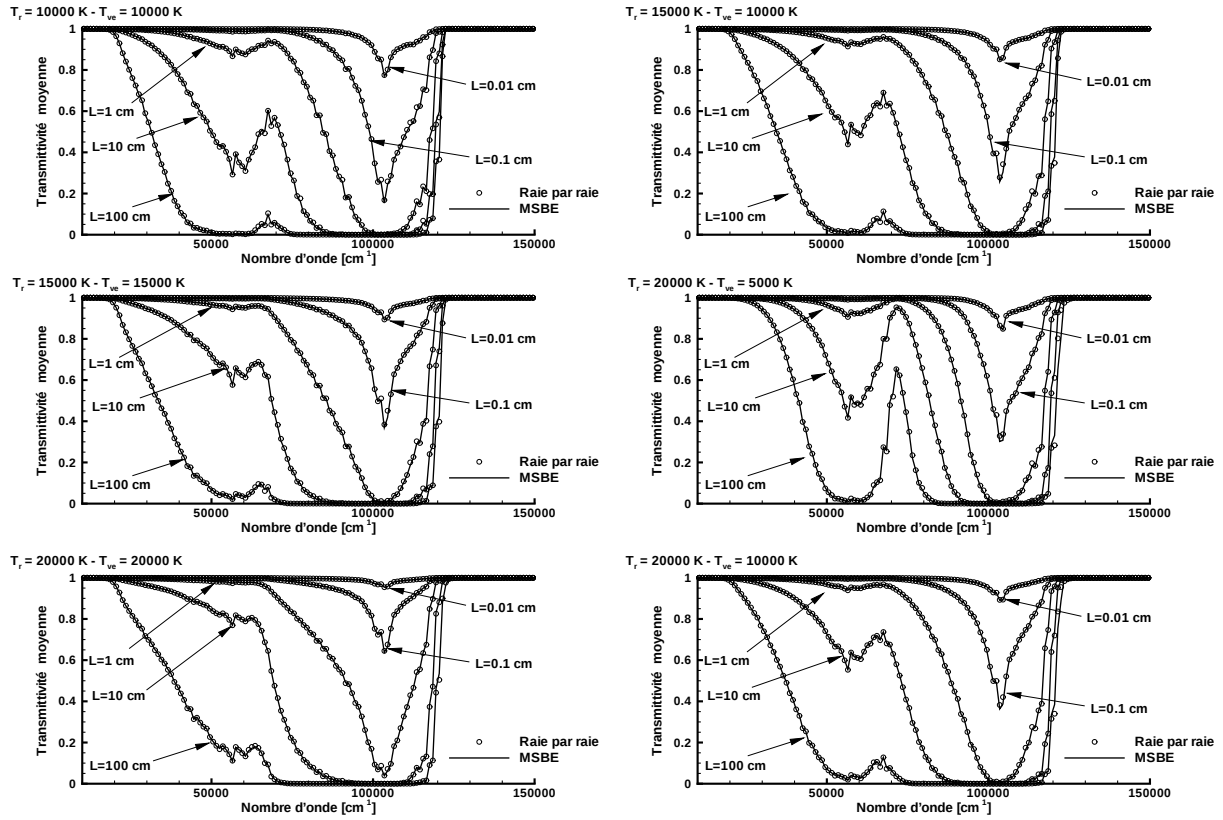


FIG. III.47: Transmittivités moyennes obtenues en raie par raie et en MSBE d'une colonne homogène de différentes longueurs à 1 bar pour un mélange N_2 , O_2 et NO de fractions molaires respectives 0.75, 0.15, 0.1. Les graphes représentent chacun une condition particulière de température.

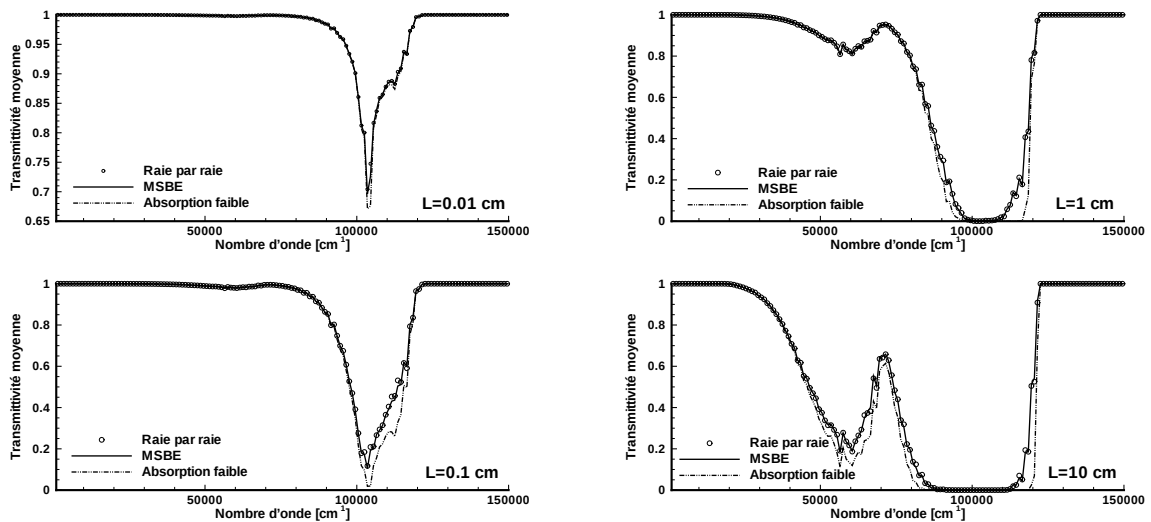


FIG. III.48: Transmittivités moyennes obtenues en raie par raie, en MSBE et dans l'approche « absorption faible » d'une colonne homogène de différentes longueurs dans des conditions thermophysiques de 1 bar à l'ETL 8000 K pour un mélange N_2 , O_2 et NO de fractions molaires respectives 0.75, 0.15, 0.1.

III.5.2 Milieux non uniformes

On se propose dans ce paragraphe de tester la formulation du modèle retenue pour traiter les milieux non uniformes (cf. §III.4.2.3). Deux configurations sont étudiées : le cas à deux colonnes homogènes puis une configuration à trois colonnes.

III.5.2.1 Configuration à deux colonnes

Nous avons mis en œuvre le modèle dans le cas simple de deux colonnes afin de comparer la grandeur ξ définie par la relation :

$$\xi = \overline{(1 - \tau_1)\tau_2}, \quad (\text{III.170})$$

entre des calculs raie par raie et MSBE. Ce paramètre s'interprète comme le produit de l'émissivité de la colonne 1 ($1 - \tau_1$) et de la transmittivité de la colonne 2 (τ_2). Le schéma de la figure III.49 de gauche indique les conditions thermophysiques des deux colonnes. La première colonne, « chaude », est représentative d'une couche de plasma à haute température créée juste après le choc. Quatre cas sont étudiés ici : deux à l'ETL et deux autres hors d'équilibre avec un modèle simple de déséquilibre à deux températures (T_r la température de translation/rotation des lourds et T_{ve} la température vibronique).

colonne 1	colonne 2
P=1bar x=1	P=1bar x=0.2
Cas 1	
T=15000 K	T=8000 K
Cas 2	
T=15000 K	T=10000 K
Cas 3	
$T_r=20000$ K $T_{ve}=15000$ K	T=10000 K
Cas 4	
$T_r=20000$ K $T_{ve}=10000$ K	T=10000 K
1 cm	l

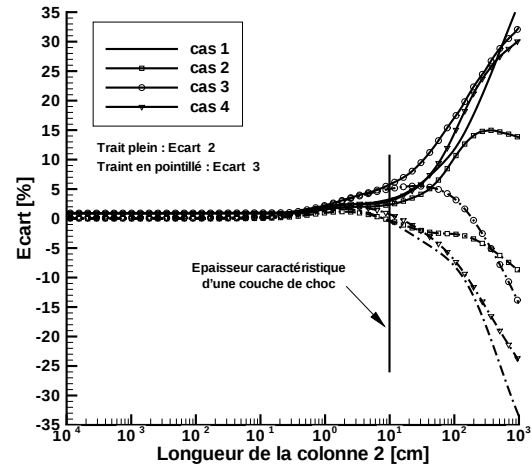


FIG. III.49: À gauche : conditions thermophysiques des 2 colonnes dans les 4 cas étudiés, x est la fraction molaire de l'espèce étudiée. À droite : représentation des écarts III.171 et III.172 entre calculs raie par raie et MSBE en fonction de la longueur de la deuxième colonne pour le système N_2 (Birge-Hopfield 2).

La deuxième colonne plus « froide » modélise une couche de plasma à l'ETL une fois que la relaxation des différents modes d'énergie est réalisée. La condition de pression de 1 bar est utilisée pour représenter un cas haute pression où les effets de l'absorption sont importants. Enfin, la fraction molaire $x=0.2$ de l'espèce étudiée permet de simuler la dissociation des molécules lorsqu'elles traversent le choc. Ce paramètre intervient uniquement sur la profondeur optique. Il est à noter que dans chaque cas on ne prend en compte que

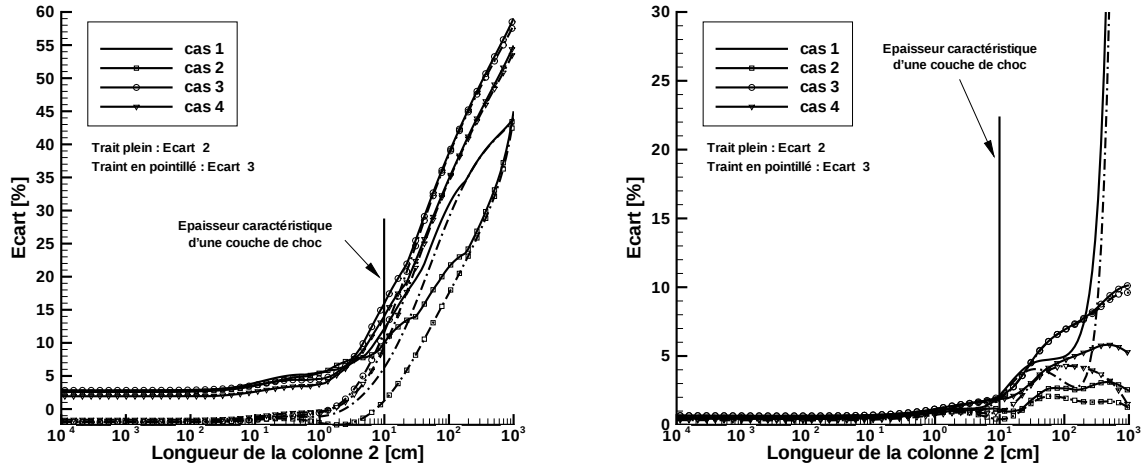


FIG. III.50: Figures identiques à la figure III.49 de droite pour les systèmes N_2 (Carroll-Yoshino) (à gauche) et NO (β) (à droite).

l'absorption de la contribution étudiée. La comparaison entre MSBE et calcul raie par raie est faite pour différentes épaisseurs de la deuxième colonne en représentant les grandeurs :

$$Ecart_2(l) = \sum_{i=1}^{N_{bande}} \frac{|\xi_i(l)^{LBL} - \xi_i(l)^{MSBE}|}{\xi_{tot}(l)^{LBL}} \times 100 \quad (III.171)$$

et

$$Ecart_3(l) = \sum_{i=1}^{N_{bande}} \frac{\xi_i(l)^{LBL} - \xi_i(l)^{MSBE}}{\xi_{tot}(l)^{LBL}} \times 100 \quad (III.172)$$

où ξ_i est la grandeur par la relation III.170 pour la bande spectrale i , et $\xi_{tot}(l) = \sum_{i=1}^{N_{bande}} \xi_i(l)^{LBL}$. La figure III.49 de droite et la figure III.50 montrent les résultats obtenus pour trois systèmes représentatifs de l'ensemble des systèmes traités en optiquement non mince dans notre application. Il s'agit des systèmes N_2 (Birge-Hopfield 2), N_2 (Carroll-Yoshino) et NO (β). Les comportements sont similaires pour les différentes conditions de températures utilisées. Les écarts sont raisonnables ($< 10\%$) pour des épaisseurs optiques inférieures à 10 cm.atm (épaisseur caractéristique d'une couche de choc). Passée cette valeur, Les écarts augmentent rapidement et proviennent en partie du fait que les paramètres du modèles ne permettent pas, pour ces épaisseurs optiques (cf. §III.5.1), de représenter correctement l'absorption des colonnes homogènes. De plus, s'ajoute à ces erreurs, les erreurs intrinsèques à l'approximation de Curtis-Godson utilisée.

Pour les systèmes N_2 (Carroll-Yoshino) et NO (β), le comportement du paramètre $Ecart_3$ est quasiment identique à celui de $Ecart_2$ ce qui permet de dire qu'il n'y a pas de compensation telle qu'une bande absorbe et une autre pas assez ce qui donnerait de meilleurs résultats lors de comparaison au paramètre globale ξ_{tot}^{LBL} . Le comportement moyen de l'ensemble des bandes est tel que $\xi^{LBL} > \xi^{MSBE}$ i.e. que le modèle dans cette situation absorbe plus que les calculs de référence effectués en raie par raie. Pour le système N_2 (Birge-Hopfield 2), on observe un comportement inverse : le modèle absorbe moins dans ce cas-là.

Une remarque supplémentaire peut être faite sur ces 3 figures : les erreurs dues au modèle sont d'autant plus importantes que l'écart de température de translation-rotation entre les deux colonnes est élevé (comparaison courbes 15000-10000 K et 20000-10000 K par exemple). Ceci peut provenir de deux raisons liées à l'approximation de Curtis-Godson. D'une part, cette approximation est d'autant plus mise à mal que la variation de la largeur des raies est grande à la traversée des colonnes (cf. Young [135] par exemple). D'autre part, elle ne peut pas prendre en compte correctement les raies rotationnelles très chaudes (*i.e.* à très hauts nombres J) « présentes » dans la colonne chaude et pas dans la colonne plus froide.

III.5.2.2 Configuration à trois colonnes

Un deuxième type de cas d'épreuve pour tester le modèle dans le paragraphe précédent, a consisté à travailler avec des colonnes similaires aux deux colonnes précédentes et une troisième limite. Le schéma de la figure III.51 indique les conditions de chaque colonne. Deux cas de figure sont envisagés et indiqués de gauche, le premier avec des longueurs de colonnes représentatives d'un cas d'arrêt (d_1) et le second avec des longueurs représentatives d'un cas de rentrée (d_2) provenant d'un point très éloigné de la ligne d'arrêt¹⁴

	colonne 1	colonne 2	colonne 3
	$T=15000\text{ K}$	$T=10000\text{ K}$	$T=5000\text{ K}$
d_1	1 cm	5 cm	0.5 cm
d_2	15 cm	75 cm	7.5 cm
	Cas a) et c)		
		$\bar{\epsilon}_1$	$\bar{\epsilon}_1 \tau_2 \tau_3$
	Cas b) et d)		
		$\bar{\epsilon}_2$	
	$\bar{\epsilon}_2 \tau_1$		

FIG. III.51: Conditions de températures des trois colonnes prises à 1 bar et représentations des cas traités sur les figures III.53 à III.55.

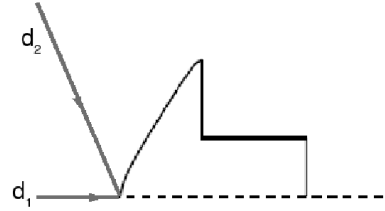


FIG. III.52: Schéma d'un véhicule de rentrée. Les segments d_1 et d_2 représentent les deux chemins optiques utilisés dans nos calculs indiqués sur le schéma III.51.

La pression est supposée uniforme sur toutes les colonnes et fixée à 1 bar. Les fractions molaires dépendent du système étudié et sont représentatives d'un cas de rentrée. Nous avons pris dans le cas des systèmes N_2 (VUV) une fraction molaire de N_2 de 1 dans la première colonne (molécules non encore dissociés), 0.2 dans la deuxième (molécules dissociées après le choc) et 1 dans la troisième (recombinaison à la paroi). Dans le cas de NO , la fraction molaire utilisée est 0.01 (encore peu de NO juste après le choc), 0.1 (création de NO) et 0.01 (disparition de NO à la paroi pour revenir à un état d'équilibre).

Les figures III.53 et III.54 montrent les émissivités moyennées par bande spectrale des colonnes 1 et 2 et les émissivités « transmises » suivant les différentes colonnes traversées du

¹⁴On considère que les températures des colonnes dans ce cas-là sont identiques à celles prises le long de la ligne d'arrêt. En réalité elles sont plus faibles.

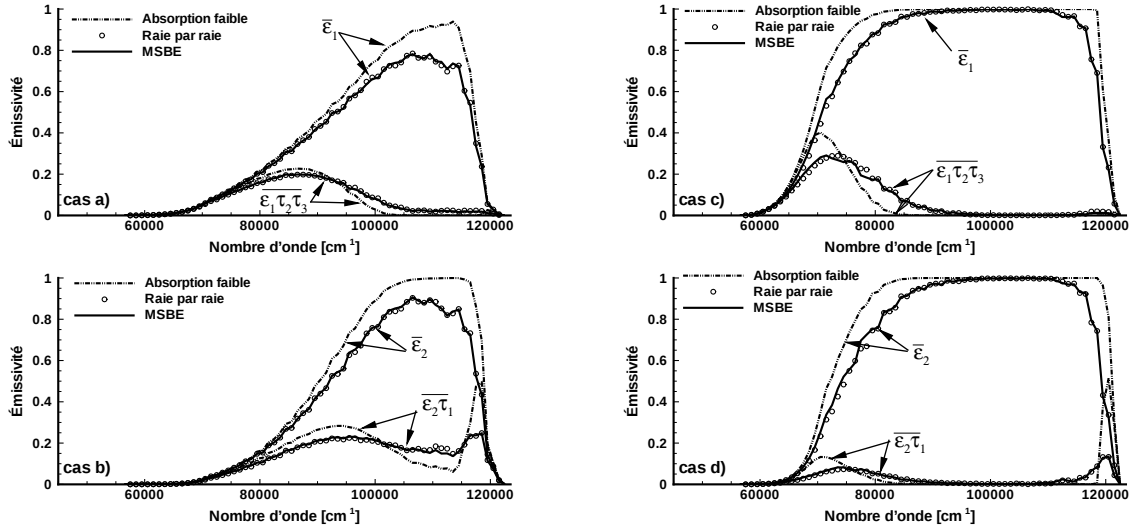


FIG. III.53: Émissivité de colonnes homogènes et émissivité transmise à travers plusieurs colonnes homogènes suivant les cas indiqués sur le schéma III.51. Seul la contribution du système N_2 (Birge-Hopfield 2) est considérée.

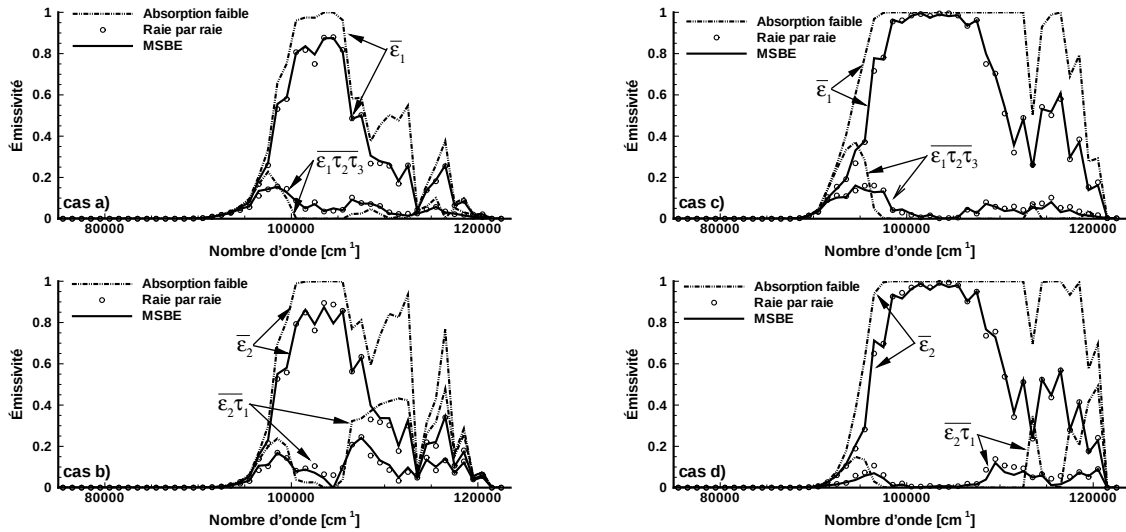


FIG. III.54: Figures identiques aux figures III.53 pour le système N_2 (Carroll-Yoshino).

chemin d_1 (graphes de gauche) et d_2 (graphes de droite). Les différents cas (de a à d) sont répertoriés sur le schéma III.51. Les courbes sont tracées à partir de calculs raie par raie, avec le MSBE et en considérant un régime d'absorption faible. La comparaison est faite pour les trois systèmes pris séparément, c'est-à-dire que dans chaque cas on ne considère que l'absorption d'un système.

Les résultats montrent un bon accord global entre calcul raie par raie et modèle MSBE en particulier pour N_2 (Birge-Hopfield 2) et $NO(\beta)$. Pour NO , ceci n'est pas surprenant car les systèmes moléculaires de cette espèce ne sont que légèrement optiquement épais dans les applications de rentrée atmosphérique (cf. fig. III.3 de gauche). Pour les contributions des systèmes de N_2 qui sont optiquement plus épais, les résultats montrent que le modèle MSBE fait absorber un peu plus les systèmes par rapport aux calculs effectués en raie par

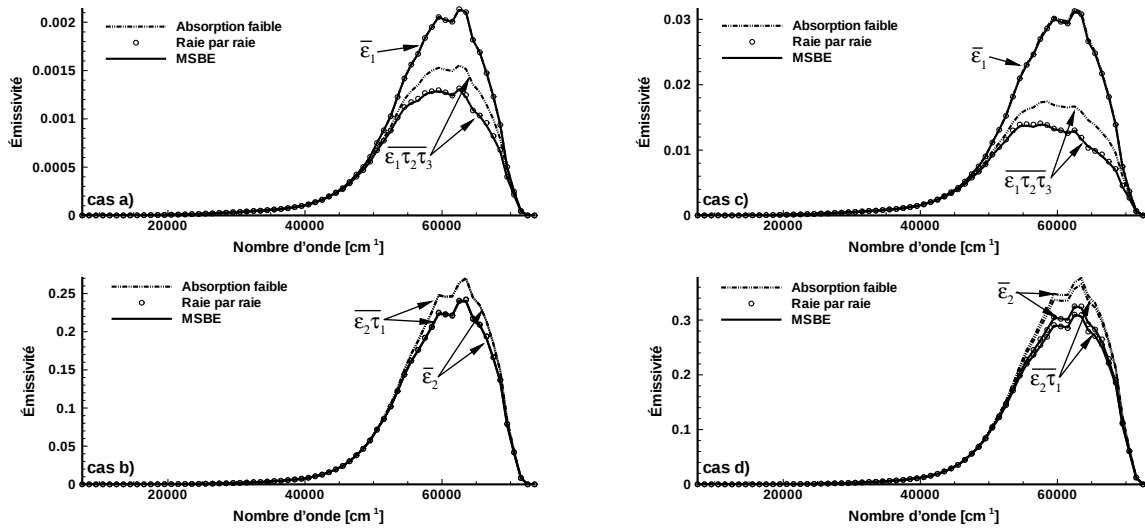


FIG. III.55: Figures identiques aux figures III.53 pour le système NO (β).

raie. Ceci est visible en particulier pour le système N_2 (Carroll-Yoshino) pour le cas b) et d) de la figure III.54 en regardant $\overline{\epsilon_2\tau_1}$.

Les comparaisons avec les résultats obtenus en considérant le régime d'absorption faible montrent des écarts très importants avec les calculs raie par raie en particulier pour les systèmes N_2 (VUV). L'utilisation de cette approche simplifiée engendre une absorption tantôt trop élevée tantôt trop faible par rapport à une approche spectralement corrélée telle que le permet le MSBE. La différence s'avère d'autant plus importante que l'épaisseur optique est élevée.

Au niveau qualitatif pour les rayons incidents et partants, on observe que les systèmes sont fortement absorbés au niveau des centres de bandes laissant passer le rayonnement au niveau des ailes de bandes.

III.6 Application et validation sur un cas de rentrée atmosphérique

On se propose dans cette section de mettre en œuvre la modélisation hybride complète, *i.e.* raie par raie pour les atomes, MSBE pour les systèmes moléculaires optiquement épais et « box model » pour les continus et les systèmes moléculaires optiquement minces, sur un cas réel de rentrée atmosphérique. Le cas d'épreuve choisi est le cas test FIRE II présenté dans la section II.3. L'objectif est de déterminer numériquement les luminances radiatives au point d'arrêt de l'engin provenant de la ligne d'arrêt pour quatre points de trajectoire. Pour évaluer la précision et la rapidité de la modélisation hybride, les résultats obtenus sont comparés à ceux de référence obtenus dans le chapitre II.3.4 *i.e.* dans le cadre d'une approche raie par raie complète. Les champs aérothermochimiques utilisés pour ces calculs sont ceux fournis par l'ESA. Ils sont décrits dans la section II.3.2. On utilisera par conséquent la même description thermochimique du déséquilibre que dans les calculs réalisés à haute résolution dans le chapitre II.3.4. Avant de présenter les résultats, on explicitera dans un premier temps

l'ETR formulée dans le cadre de l'utilisation du modèle hybride de propriétés radiatives.

III.6.1 Équation de transfert radiatif discrétisée et adaptée à la modélisation hybride

On souhaite déterminer la luminance à la paroi issue du rayonnement émis par la couche de choc sur la ligne d'arrêt. On est dans la configuration représentée par la figure III.1. Compte tenu de la modélisation hybride de propriétés radiatives, on peut décomposer la luminance au point d'arrêt en cinq contribution :

$$\begin{aligned} \text{luminance point d'arrêt} = & \text{contrib. des syst. mol. optiquement épais « } mol - \text{épais} \text{ » (I}_1\text{)} \\ & + \text{contrib. des syst. mol. optiquement minces « } mol - \text{mince} \text{ » (I}_2\text{)} \\ & + \text{contrib. des continua « } cont \text{ » (I}_3\text{)} \\ & + \text{contrib. des raies atomiques « } at \text{ » (I}_4\text{)} \\ & + \text{contrib. de l'infini amont (I}_5\text{)}. \end{aligned} \quad (\text{III.173})$$

La liste de l'ensemble des systèmes traités et la distinction entre systèmes moléculaires optiquement minces et épais sont indiquées dans le tableau III.1. En s'appuyant sur la formulation III.46 de l'ETR, on peut exprimer par bande spectrale $\Delta\sigma$ centrée en σ_b chacun des termes de la relation précédente sous forme intégrée.

- Pour la contribution des systèmes moléculaires optiquement épais, la relation III.46 permet d'écrire :

$$\overline{I}_1^{\Delta\sigma} = \sum_j^{mol-épais} \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \frac{\overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}}{\overline{\kappa_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}} \frac{\partial \overline{\tau_\sigma^j(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}}{\partial l} \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl, \quad (\text{III.174})$$

dans laquelle l_w désigne la position du point d'arrêt. Dans cette expression, on rappelle que les transmittivités des systèmes moléculaires optiquement minces et celles des continua sont obtenues à partir du « box model » et que celle des systèmes moléculaires optiquement épais sont obtenues à partir du MSBE. Pour les raies atomiques, ayant conservé une approche raie par raie, leur transmittivité s'exprime comme :

$$\overline{\tau_\sigma^{at}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\sigma_b - \Delta\sigma/2}^{\sigma_b + \Delta\sigma/2} \exp \left(- \sum_{i=1}^w \kappa_\sigma^{at}(z_i)(l_i - l_{i-1}) \right) d\sigma, \quad (\text{III.175})$$

où κ_σ^{at} désigne le coefficient d'absorption transitions lié-lié atomiques et z_i la colonne homogène représentée par l'intervalle $[l_{i-1}, l_i]$.

L'intégration à réaliser sur les éléments de longueur dans la relation III.174 ne peut être faite rigoureusement à cause du produit $\prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}$ ¹⁵. Pour simplifier le problème, on suppose que ce produit de transmittivités est constant (ce qui s'avère par ailleurs exact si les cellules sont optiquement minces), et qu'il s'écrit $\prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l^* \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}$ avec l^* une

¹⁵On notera que ce problème est propre à la formulation d'un modèle de bandes car avec une approche raie par raie, les calculs de transfert en 1D sur la ligne d'arrêt sont réalisés pas à pas avec la formule exacte II.67.

constante comprise entre l_{i-1} et l_i . Cette hypothèse (nommée H^* par la suite) est également utilisée par la suite pour le traitement des contributions $\overline{I}_2^{\Delta\sigma}$, $\overline{I}_3^{\Delta\sigma}$ et $\overline{I}_4^{\Delta\sigma}$ et est discutée dans le paragraphe III.6.2. Par conséquent et à l'aide de la relation III.47, l'équation III.174 s'écrit :

$$\overline{I}_1^{\Delta\sigma} = \sum_j^{mol-epais} \sum_{i=1}^w \frac{\overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}}{\overline{\kappa_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}} \left[\overline{\tau_\sigma^j(l_i \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} - \overline{\tau_\sigma^j(l_{i-1} \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \right] \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l^* \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}. \quad (III.176)$$

L'intégration des transmittivités sur la cellule (l_{i-1}, l_i) est alors réalisée uniquement pour le système émettant j (compte tenu de sa formulation en dérivée) ce qui permet de bien tenir compte de l'épaisseur optique de la cellule pour le système émettant.

- Pour les systèmes moléculaires optiquement minces, la relation III.46 permet d'écrire :

$$\overline{I}_2^{\Delta\sigma} = \sum_j^{mol-mince} \sum_{i=1}^w \int_{l_{i-1}}^{l_i} \overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma} \prod_{j'} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} dl. \quad (III.177)$$

L'épaisseur optique des cellules pour ces contributions pouvant être considérée comme très faible, l'intégration sur la cellule (l_{i-1}, l_i) se simplifie par rapport au cas précédent et l'on peut écrire alors :

$$\overline{I}_2^{\Delta\sigma} = \sum_j^{mol-mince} \sum_{i=1}^w \overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma} \prod_{j'} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l^* \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}. \quad (III.178)$$

- Pour les continua, la luminance $\overline{I}_3^{\Delta\sigma}$ s'écrit de la même manière que la relation III.177. Cependant leur épaisseur optique sur les cellules n'étant pas négligeable, on utilise pour tenir compte de l'auto-absorption dans la cellule émettrice une formulation similaire à celle des systèmes moléculaires optiquement épais :

$$\overline{I}_3^{\Delta\sigma} = \sum_j^{cont} \sum_{i=1}^w \frac{\overline{\eta_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}}{\overline{\kappa_\sigma^j(z_i)}^{\Delta\sigma}} \left[\overline{\tau_\sigma^j(l_i \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} - \overline{\tau_\sigma^j(l_{i-1} \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \right] \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_\sigma^{j'}(l^* \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}. \quad (III.179)$$

- Pour les raies atomiques, ramenée à une expression par bande spectrale, leur contribution s'écrit comme :

$$\overline{I}_4^{\Delta\sigma} = \sum_{i=1}^w \int_{\sigma_b - \Delta\sigma/2}^{\sigma_b + \Delta\sigma/2} \frac{\eta_\sigma^{at}(z_i)}{\kappa_\sigma^{at}(z_i)} \left[\tau_\sigma^{at}(l_i \rightarrow l_w) - \tau_\sigma^{at}(l_{i-1} \rightarrow l_w) \right] d\sigma \prod_{j \neq at} \overline{\tau_\sigma^j(l^* \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma}. \quad (III.180)$$

- Pour la contribution de l'infini amont, elle s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} \overline{I}_5^{\Delta\sigma} &= \overline{L_\sigma(l_0) \tau_\sigma(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \\ &= \overline{L_\sigma(l_0)}^{\Delta\sigma} \prod_{syst\ j} \overline{\tau_\sigma^j(l_0 \rightarrow l_w)}^{\Delta\sigma} \end{aligned} \quad (III.181)$$

dans laquelle l_0 désigne la position de l'infini amont. À noter que l'on suppose dans l'expression III.181 que la luminance amont est décorrélée de l'absorption dans la couche de choc. Cette contribution est bien évidemment négligeable lors du calcul de la luminance incidente à la paroi mais peut devenir significative lorsque l'on utilise cette expression pour déterminer la luminance partante de la paroi.

III.6.2 Effet de l'épaisseur optique des cellules émettrices

L'utilisation du modèle hybride de propriétés radiatives que nous avons développé soulève un problème d'absorption dans les cellules émettrices lorsque que l'on traite les cellules pas à pas en utilisant les expressions III.176 à III.180. Pour pouvoir effectuer les intégrales sur les éléments de longueur nous avons utilisé l'hypothèse H^* qui requiert l'utilisation du paramètre l^* . Cette hypothèse permet de traiter correctement l'auto-absorption dans la cellule émettrice mais de manière approchée l'absorption par les autres systèmes dans cette même cellule.

Pour estimer l'influence de cette simplification sur les calculs de luminance, nous avons testé les deux cas limites en prenant $l^* = l_i$ qui correspond à ne pas tenir compte de l'absorption des systèmes en question dans la cellule émettrice et $l^* = l_{i-1}$ qui correspond au cas inverse *i.e.* que dans ce cas toute la cellule absorbe. La figure III.56 de gauche montre le résultat sur l'évolution de la luminance sur la ligne d'arrêt pour le point de trajectoire 1642.66 s. Les calculs avec le modèle hybride pour les deux valeurs de l^* sont indiqués par les courbes « Cell.(ules) init.(iales) non découpées ». On représente également à titre indicatif le calcul de référence *i.e.* le calcul raie par raie, exposé initialement dans la section II.3.4, indiqué par la courbe « raie par raie ». L'effet de la prise en compte ou non de l'absorption (hormis l'auto-absorption du système émetteur) des cellules émettrices sur la distribution de la luminance engendre un écart de l'ordre de 10 % entre les deux calculs. Cette différence est due principalement pour ce point de trajectoire à la photoionisation atomique qui est optiquement très épaisse tout au long de la ligne d'arrêt. Cependant au point d'arrêt, la différence entre les deux luminances n'est plus que de 1 %. La différence s'estompe dans la couche limite où l'absorption des systèmes de N_2 (VUV) est particulièrement forte compte tenu de la recombinaison à la paroi et du niveau relativement bas des températures. Ceci est illustré par la figure III.57 qui montre la luminance incidente spectrale et cumulée à la paroi et juste avant la couche limite. On peut voir que l'absorption est en particulier due aux systèmes N_2 (Corroll-Yoshino, Worley et Worley-Jenkins) qui sont optiquement très épais comme l'indique la figure II.14. On représente également sur cette figure l'effet de l'absorption (hormis l'auto-absorption) de la cellule émettrice. La zone spectrale dans laquelle l'effet de l'épaisseur optique des cellules émettrices est le plus visible est la zone dans laquelle l'absorption est la plus marquée ce qui explique au final le faible écart de 1 % observé à la paroi entre les deux types de calculs effectués avec $l^* = l_{i-1}$ et $l^* = l_i$.

La figure III.56 de droite montre le résultat des calculs précédents pour les quatre types de contributions correspondant aux luminances I_1 , I_2 , I_3 et I_4 donnée par les relations III.176 à III.180 (l'absorption de toutes les contributions est toujours prise en compte). On remarque tout d'abord que les systèmes optiquement minces ne sont pas affectés par l'épaisseur optique des cellules émettrices. Ceci est normal puisque ces systèmes contribuent essentiellement dans le visible et l'UV où toutes les contributions sont optiquement minces. Pour les atomes, l'effet est notable et correspond à l'absorption de la photoionisation atomique qui est très épaisse dans la couche de choc. Pour les systèmes moléculaires optiquement épais (essentiellement les systèmes de N_2 (VUV)), l'effet est plus important et ce dès l'abscisse -0.038 m *i.e.* au niveau du choc mais s'estompe peu à peu jusqu'à la paroi. Ceci vient du fait que pour le point de trajectoire 1642.66 s, les systèmes de N_2 (VUV) n'émettent qu'au niveau du choc et sont relativement optiquement minces jusqu'à la couche limite. Ils sont essentiellement absorbés jusqu'à la couche limite par la photoioni-

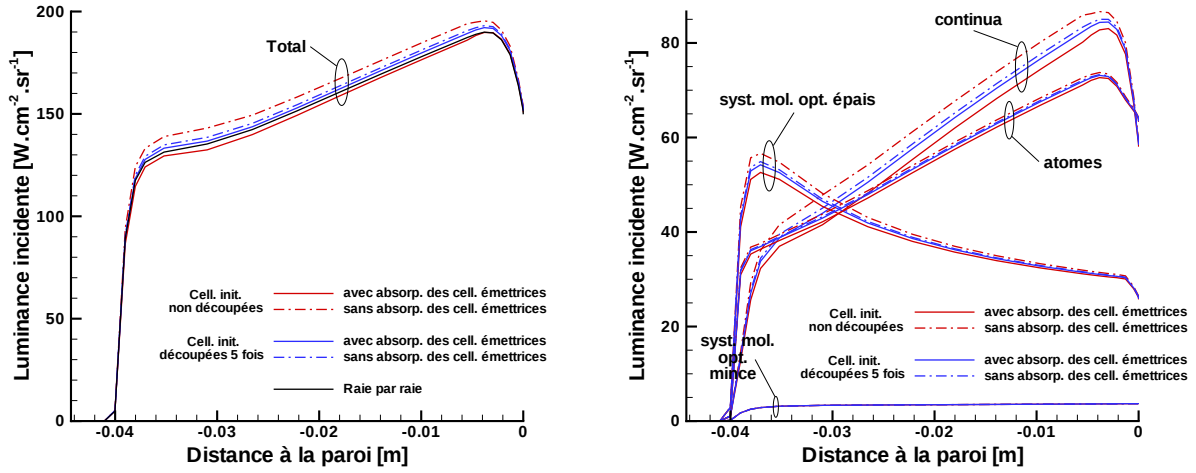


FIG. III.56: Effet de l'épaisseur optique des cellules sur l'évolution de la luminance incidente le long de la ligne d'arrêt - Point de trajectoire 1642.66 s du projet FIRE II.

sation atomique. L'effet de l'épaisseur optique des cellules ne joue donc un rôle important qu'au niveau du choc pour les systèmes de N_2 (VUV), effet qui s'estompe au fur et à mesure de l'absorption de ces systèmes sur le plateau. Pour les continua, l'effet est visible tout au long de la ligne d'arrêt puisqu'ils émettent et absorbent jusqu'à la couche limite.

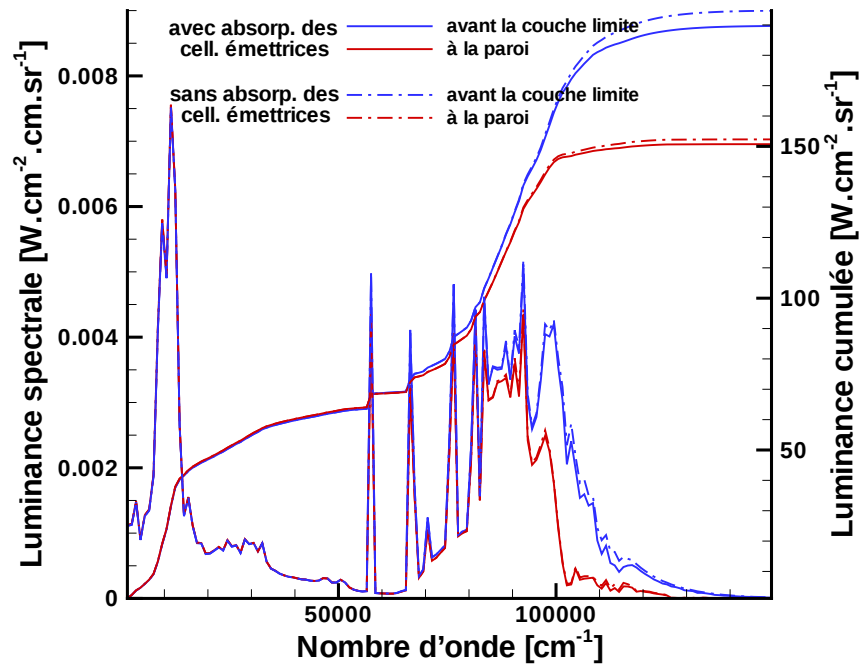


FIG. III.57: Effet de l'épaisseur optique des cellules et de l'absorption de la couche limite sur la luminance incidente au point d'arrêt - Point de trajectoire 1642.66 s du projet FIRE II.

Les effets de l'épaisseur optique pour le point de trajectoire 1642.66 s mis en évidence

sur les figures III.56 ne sont pas tous représentatifs de l'ensemble des points de trajectoire (pour le cas 1648 s par exemple, les effets diffèrent puisque la couche de choc n'est pas optiquement mince pour les N_2 (VUV)) mais illustrent bien le type d'influence que cela peut avoir sur la distribution des luminances le long de la ligne d'arrêt.

Afin de comparer rigoureusement les résultats obtenus avec le modèle hybride à ceux obtenus avec l'approche raie par raie (cf. §II.3.4) où il n'y a pas d'effet d'épaisseur optique des cellules, nous avons découpé les cellules homogènes en plusieurs sous cellules afin de faire du transfert à partir de cellules optiquement plus minces. Les figures III.56 de gauche et de droite montrent les mêmes résultats que précédemment mais en ayant au préalable découpé les cellules 5 fois. L'effet de l'épaisseur optique est fortement diminué voire négligeable puisqu'il ne représente qu'au pire des cas un écart de 1.5 % pour les continua (processus le plus sensible à l'épaisseur optique des cellules). Pour la luminance totale à la paroi, la différence est alors de l'ordre de 0.1 % pour ce découpage.

Il est important de souligner que les effets d'épaisseur optique des cellules émettrices est propre à la formulation intégrée de l'ETR représentée par les relations III.176 à III.180 que nous avons utilisée pour valider sur ligne d'arrêt le modèle hybride du rayonnement. Par la suite, l'objectif à terme étant d'implémenter le modèle hybride dans un code de transfert Monte Carlo 3D, ce problème d'épaisseur optique des cellules n'est pas rencontré puisqu'il s'agira dans l'approche Monte Carlo retenue de faire émettre la cellule à partir d'un point (représentant un volume optiquement mince) choisi uniformément. L'intégration sur la maille sera donc bien représentée (pour un nombre de tirs suffisant bien entendu). Ce point est discuté dans le chapitre IV.

III.6.3 Comparaison modèle hybride et approche raie par raie

Nous avons comparé pour les quatre points de trajectoire pour trois intervalles spectraux les luminances à la paroi obtenues avec l'approche raie par raie (RPR) et le modèle hybride (MH) des propriétés radiatives. Les intervalles sont ceux considérés pour le cas test sur FIRE II (cf. §II.3) à savoir $16666\text{--}33333\text{ cm}^{-1}$, $2500\text{--}50000\text{ cm}^{-1}$ et $1000\text{--}150000\text{ cm}^{-1}$. Les résultats sont reportés dans le tableau III.2. Les calculs avec le modèle hybride ont été effectués avec un découpage systématique des cellules initiales par cinq qui assure dans ce cas que l'effet de l'épaisseur optique des cellules est négligeable en particulier à la paroi. À titre indicatif, pour voir quelles sont les contributions majoritaires, on indique également dans ce tableau, la contribution des atomes, des continua, des systèmes moléculaires optiquement épais et minces pour chaque intervalle et point de trajectoire. Ces contributions sont obtenues en considérant dans chaque cas l'absorption de l'ensemble des processus radiatifs. On observe que les écarts entre RPR et MH sont faibles (de l'ordre de 3 % au maximum sur l'ensemble des comparaisons) avec des écarts inférieurs à 2 % pour les calculs prenant en compte toute la gamme spectrale. Pour une analyse plus détaillée, on a représenté sur la figure III.58 les luminances spectrales et cumulées à la paroi issues des calculs en RPR et MH. L'accord est très bon entre les deux types de calcul. Les écarts (faibles) peuvent s'expliquer par : (i) les hypothèses de décorrélation considérées lors de l'établissement de l'ETR dans la section III.3 pour utiliser une modélisation par bande spectrale dont en particulier un MSBE, (ii) les erreurs inhérentes à l'interpolation des paramètres du MSBE et du « box model », (iii) les erreurs inhérentes à la formulation même du modèle MSBE (hypothèses statistiques pour la formulation en milieu homogène, approximation pour traiter le profil

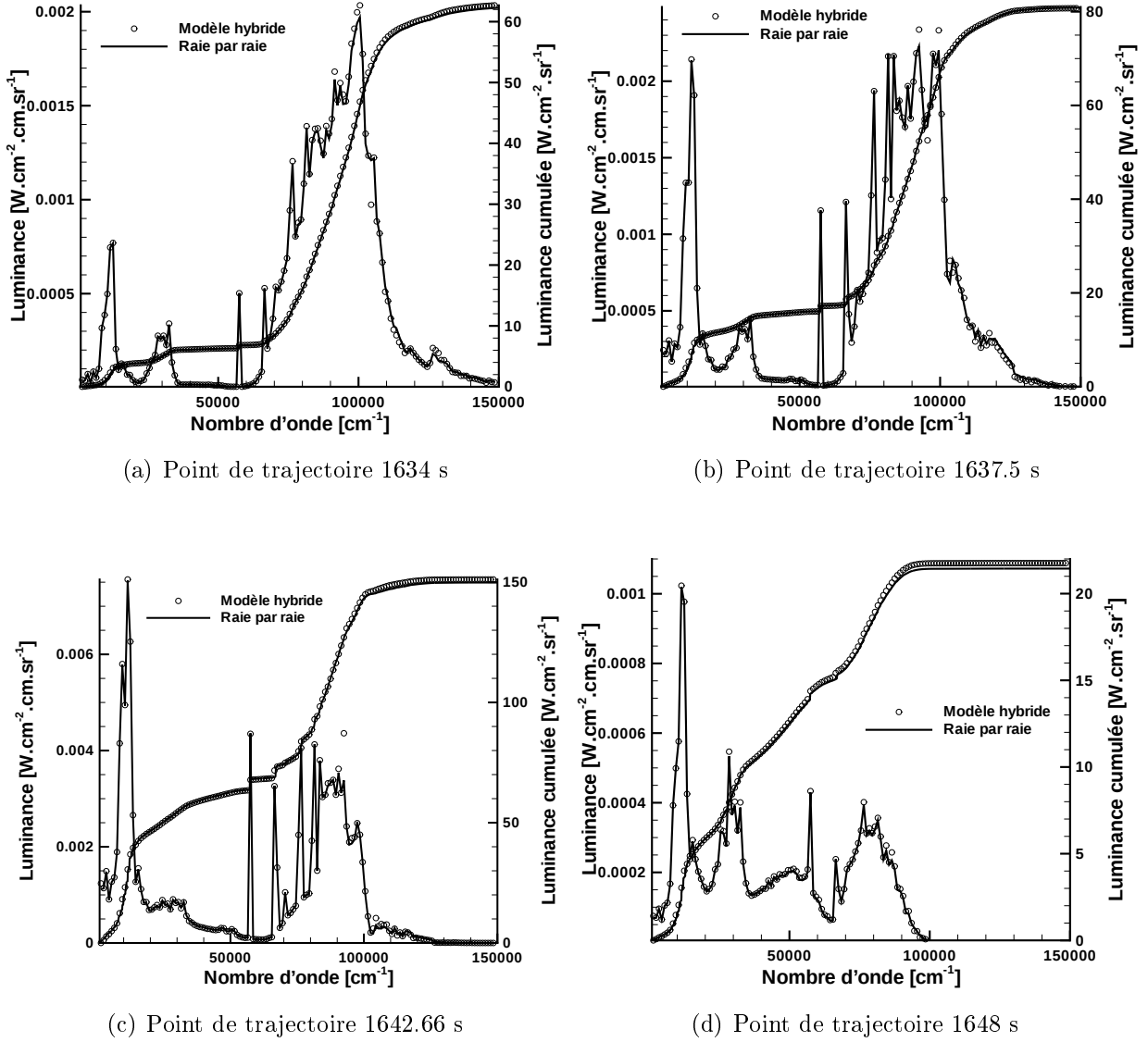


FIG. III.58: Comparaison des luminances incidentes au point d'arrêt calculées en raie par raie et avec le modèle hybride pour quatre points de trajectoire de FIRE II.

Voigt et approximation de Curtis-Godson pour traiter les milieux hétérogènes), et enfin (iv) les erreurs liées à la qualité des ajustements des courbes de croissance effectués pour déterminer les paramètres du MSBE.

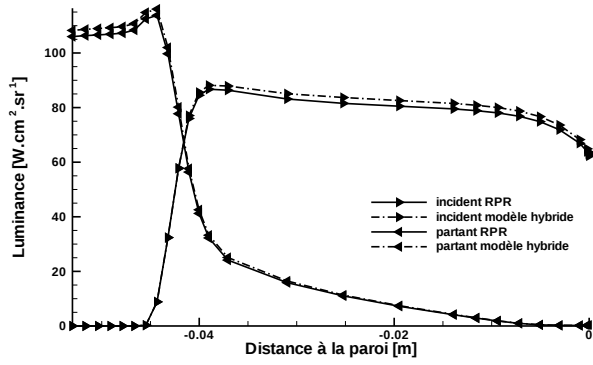
Afin d'étudier l'interaction rayonnement/hydrodynamique, la validation du modèle hybride de rayonnement doit être également réalisée sur le champ de puissance radiative dans la couche de choc. Pour ce faire, nous avons représenté sur la figure III.59 les évolutions, pour les quatre points de trajectoire, des luminances incidentes L^+ à la paroi et partantes L^- de la paroi le long de la ligne d'arrêt ainsi que les champs de puissance unidirectionnelle P_{uni}^{rad} obtenus en RPR et en MH à partir de la relation suivante :

$$P_{uni}^{rad} = \frac{\partial(L^+ - L^-)}{\partial l} \quad (\text{III.182})$$

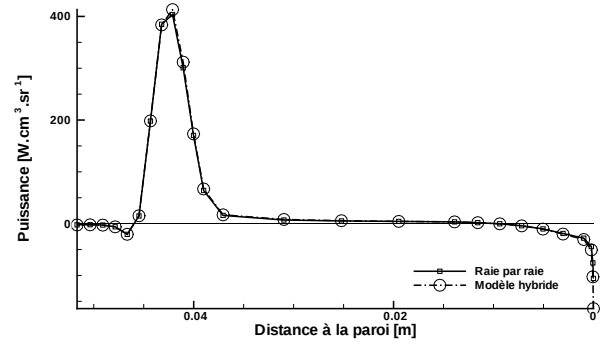
où l indique l'abscisse sur la ligne d'arrêt. Les calculs en MH ont été comme précédemment

TAB. III.2: Luminance au point d'arrêt intégrée sur différents intervalles spectraux.

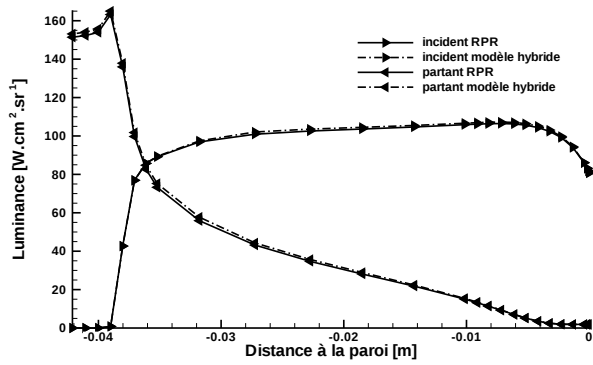
Intervalle spectrale [μm ou cm^{-1}]	Point de trajectoire	Calcul raie par raie	$q^R[W.cm^{-2}.sr^{-1}]$				
			Calcul modèle hybride				
			contribution total (écart %)	contribution atomique	contribution des continua	contribution syst. moléculaires minces	contribution syst. moléculaires épais
0.3 – 0.6 ou 16666-33333	1634 s	2.2	2.24 (+1.8)	0.1	0.15	1.93	0.06
	1637.5 s	3.8	3.9 (+2.5)	0.28	1.19	2.33	0.1
	1642.66 s	13	13.22 (+1.7)	1.19	8.9	2.9	0.23
	1648 s	4.4	4.55 (+3.36)	0.07	1.64	2.45	0.39
0.2 – 4 ou 2500-50000	1634 s	6.25	6.23 (-0.38)	3.04	0.53	2.41	0.25
	1637.5 s	15.9	15.55 (-2.23)	8.29	3.95	2.94	0.37
	1642.66 s	62.6	60.44 (-3.43)	30	25.89	3.64	0.91
	1648 s	12.5	12.51 (+0.11)	3.03	3.56	3.41	2.51
0.066 – 10 ou 1000-150000	1634 s	62.3	62.72 (+0.67)	8.3	6.7	2.41	45.31
	1637.5 s	80.8	80.72 (-0.08)	20.48	19.56	2.94	37.74
	1642.66 s	149.8	151.1 (+0.86)	63.54	58.09	3.65	25.82
	1648 s	21.4	21.76 (+1.7)	4.24	4.20	3.41	9.91



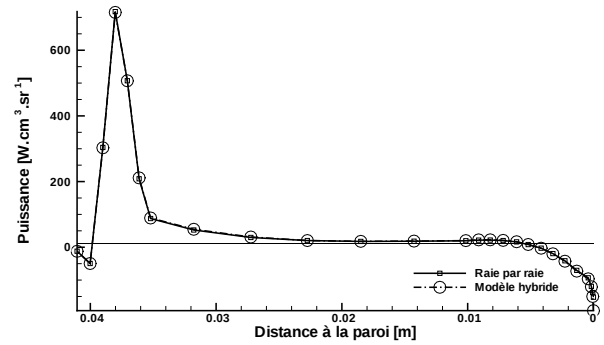
(a) Luminance - Point de trajectoire 1634 s



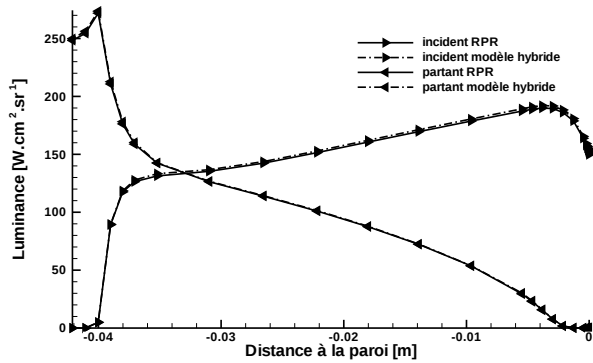
(b) Puissance - Point de trajectoire 1634 s



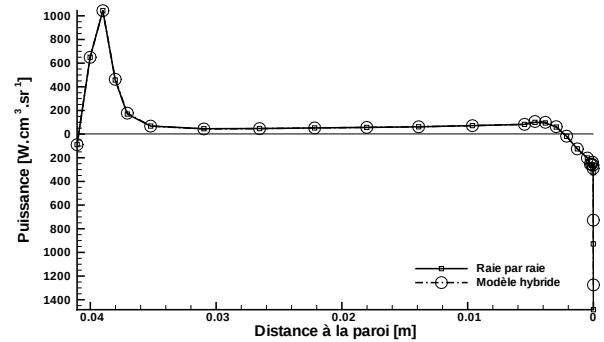
(c) Luminance - Point de trajectoire 1637.5 s



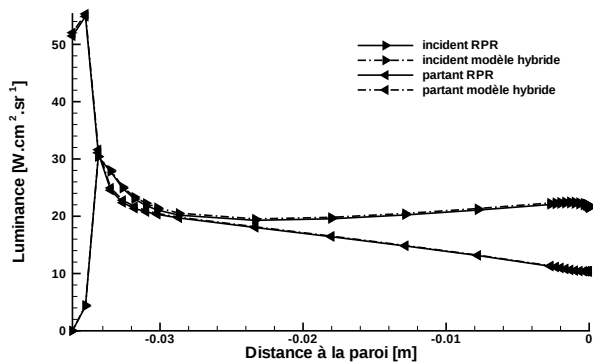
(d) Puissance - Point de trajectoire 1637.5 s



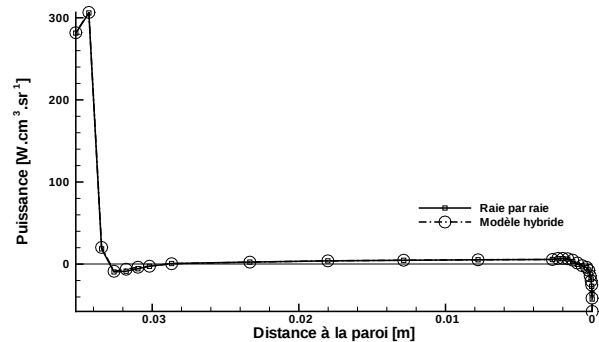
(e) Luminance - Point de trajectoire 1642.66 s



(f) Puissance - Point de trajectoire 1642.66 s



(g) Luminance - Point de trajectoire 1648 s



(h) Puissance - Point de trajectoire 1648 s

FIG. III.59: Comparaison des luminances et des puissances le long de la ligne d'arrêt calculées en raie par raie et avec le modèle hybride pour quatre points de trajectoire de FIRE II.

effectués avec un découpage des cellules par 5. Les comparaisons entre les calculs RPR et MH montrent un accord très satisfaisant sur les champs de luminance et sur les champs de puissance également. Pour les quatre points de trajectoire, les évolutions des grandeurs radiatives sont relativement similaires. La luminance partante augmente progressivement jusqu'à atteindre un pic au niveau du choc. À noter que la luminance partante du point d'arrêt n'est pas nulle, elle est prise égale à celle d'un corps noir à la température de la paroi indiquée dans le tableau II.2. En l'occurrence cette luminance n'est pas négligeable pour le point 1648 s où la température de paroi est de 1560 K. Pour la luminance incidente, elle augmente fortement au niveau du choc (pic de température électro-vibrationnelle), puis suivant le point de trajectoire, continue à augmenter (1642.66 s), ou est légèrement absorbée sur le plateau thermique (1634 s), ou stagne (1637.5 s - compensation émission/absorption) ou bien encore diminue (forte absorption juste derrière le choc) puis réaugmente (1648 s). Sur les champs de puissance, lorsqu'elle est positive ceci indique que la cellule émet plus qu'elle n'absorbe et inversement quand elle est négative. On remarque qu'il y a un pic de puissance au niveau du choc pour les quatre points de trajectoire qui est suivi d'une émission relativement faible du plateau le long de la ligne d'arrêt avant l'absorption au niveau de la couche de choc. En amont du choc, on peut noter que l'écoulement absorbe plus qu'il n'émet. Ceci est également vrai juste après le choc pour le cas 1648 s.

III.6.4 Temps de calcul

Par rapport à une approche raie par raie complète, l'avantage du modèle hybride est qu'il permet de s'affranchir de calculer à haute résolution les spectres d'émission et d'absorption des systèmes électroniques moléculaires et des continua dans chaque cellule de la géométrie ce qui constitue un gain de temps très important en temps de calcul. On donne à titre illustratif quelques temps CPU dans le tableau III.3 pour des calculs réalisés sur un coeur d'un processeur AMD Opteron 64 bits dual core cadencé à 2GHz. Sont indiqués les temps de calcul : (i) de spectre (coef. d'émission et d'absorption) à haute résolution ($\sim 3.10^6$ points), (ii) du transfert radiatif sur la ligne d'arrêt (*i.e.* détermination de l'évolution de la luminance incidente le long de la ligne d'arrêt) et enfin (iii) du transfert et des spectres sur la ligne d'arrêt. Par rapport aux temps de calcul du transfert, ce sont les temps de calcul des spectres qui sont prédominants en particulier pour l'approche RPR complète¹⁶. Pour la modélisation hybride, juste en terme en transfert, la prise en compte des transitions lié-lié atomiques alourdit par un facteur 80 les temps CPU, le transfert en MH devient alors aussi coûteux qu'un calcul de transfert en RPR. Le facteur de gain en temps de calcul (spectre+transfert) entre calcul RPR et MH n'est alors que d'environ 60 dans cette configuration qui est le même facteur que celui entre le temps de calcul d'un spectre atomique ou total. Cependant, l'utilisation du MH prévue dans un code Monte Carlo ne nécessitera pas le calcul de spectres atomiques lié-lié à haute résolution. Dans cette optique, en plus du gain considérable en place mémoire, l'ordre de grandeur de la différence de temps de calcul entre RPR et MH sera plutôt celle entre le calcul RPR complet (transfert+spectre) et celui seulement du transfert en MH sans tenir compte des atomes *i.e.* un facteur 30000. Ceci est tout de même à modérer suivant comment est traitée la contribution atomique dans une approche Monte Carlo. Ce point est discuté dans le chapitre IV.

¹⁶Cette remarque est valable pour la configuration 1D étudiée dans le cas présent puisqu'il n'y a qu'une seule direction simulée. Dans une configuration 1D Slab ou multi-dimensionnelle, le temps de calcul du transfert radiatif en RPR, lié au nombre de directions simulées, devient vite prohibitif.

TAB. III.3: Temps CPU pour le calcul des spectres à haute résolution et du transfert radiatif le long de la ligne d'arrêt constituée de 30 points.

	Temps CPU
1 spectre transitions lié-lié atomiques	~ 20 s
1 spectre toutes transitions	~ 20 min
Transfert en MH sans les transitions lié-lié atomiques	1,08 s
Transfert en MH	1 min 17 s
Transfert en RPR	1 min 07 s
Calcul spectres transitions lié-lié atomique + transfert en MH	~ 10 min
Calcul spectres toutes transitions + transfert en RPR	~ 10 h

III.7 Conclusion

Un modèle statistique à bandes étroites (MSBE) de largeur 1000 cm^{-1} a été formulé afin de calculer de manière optimisée les transferts radiatifs dans une couche de choc à hautes températures pouvant atteindre 50000 K en rotation et 25000 K en vibration. La formulation du modèle laisse la possibilité d'utiliser un peuplement Boltzmannien des états électroniques à une température donnée ou un peuplement suivant un mécanisme réactionnel d'excitation de type collisionnel-radiatif. L'utilisation de ce modèle de bandes pour un milieu hors d'équilibre a nécessité une formulation de l'équation de transfert radiatif adaptée à ces milieux afin de tenir compte des corrélations spectrales. La construction du modèle par tabulation de paramètres a été réalisée par ajustement de courbes de croissance calculées en raie par raie afin de reproduire au mieux ces calculs à haute résolution. La contribution des systèmes optiquement minces et des continua est traité avec un « box model » pour lequel des coefficients d'absorption et d'émission suivant différentes conditions thermophysiques ont simplement été tabulés. L'approche MSBE pour le cas particulier des atomes, n'a pas donné de résultats satisfaisants à cause de la faible densité de raies que présentent les spectres atomiques. On a conservé par la suite l'approche raie par raie pour traiter les atomes.

Le modèle MSBE a ensuite été testé en milieu uniforme et non uniforme. Dans le premier cas, les résultats montrent que pour des profondeurs optiques raisonnables de colonne ne dépassant pas quelques mètres atmosphères de pression de l'espèce absorbante, les écarts entre calculs raie par raie et MSBE n'excèdent pas 10 % et ceci pour l'ensemble des systèmes moléculaires optiquement épais considérés dans notre application. Pour les tests effectués pour des milieux non uniformes dans des situations représentatives de cas de rentrée atmosphérique, les résultats montrent de nouveau un accord global satisfaisant entre approche raie par raie et MSBE.

Le modèle hybride de rayonnement constitué du MSBE, du « box model » et de l'approche raie par raie pour les atomes a été mise en œuvre pour le cas d'épreuve FIRE II afin de comparer les résultats à ceux de référence obtenus avec une approche raie par raie systématique utilisée dans la section II.3. La comparaison des résultats montre un très bon accord sur les luminances à la paroi avec des écarts inférieurs à 2 % sur les luminances cumulées. La comparaison au niveau spectral est aussi très satisfaisante puisque l'ensemble

des processus radiatifs est correctement représenté. Dans l'optique d'étudier l'interaction rayonnement/hydrodynamique, les champs de luminance et de puissance radiative ont été également comparés le long de la ligne d'arrêt. Les résultats montrent dans tous les cas des écarts très faibles entre les calculs en RPR et les calculs en MH. Pour effectuer une comparaison rigoureuse, les calculs en MH ont été réalisés en découpant les cellules initiales afin de diminuer les effets d'épaisseur optique intrinsèques à la méthode de résolution déterministe de l'ETR formulée pour mettre en œuvre le modèle hybride. Dans l'approche Monte Carlo adoptée par la suite, ce problème d'épaisseur optique sera résolu par la nature même de la procédure de calcul utilisée dans ce cas. En terme de temps de calcul, la modélisation hybride permet dans ce cas de validation de gagner un facteur 60 sur un calcul complet en RPR. Dans l'approche Monte Carlo, où l'on ne calculera plus tous les spectres atomiques à haute résolution, le gain sera bien supérieur par gain de temps lié aux calculs des spectres atomiques (lié-lié) mais aussi au niveau du transfert. Ces derniers points sont discutés dans le chapitre IV.

Chapitre IV

Modélisation des transferts radiatifs

Table des matières

IV.1 Introduction	168
IV.2 Expressions générales de la puissance radiative volumique et du flux radiatif surfacique	168
IV.3 La méthode de Monte Carlo dans le code ASTRE	170
IV.3.1 Généralité sur les méthodes de Monte Carlo	170
IV.3.2 Généralités sur le code ASTRE	171
IV.4 Implémentation du modèle approché de rayonnement dans le code ASTRE	174
IV.4.1 Formulation de l'ETR	175
IV.4.2 Méthodologie numérique	178
IV.4.2.1 Répartition initiale des tirs dans les éléments de volumes et de surfaces	178
IV.4.2.2 Traitement d'un rayon	179
Systèmes moléculaires	180
Continua	183
Raies atomiques	183
Frontières	186
IV.4.3 Étapes et procédures numériques d'un calcul type	186
IV.5 Validation sur une configuration plans tangents	188
IV.5.1 Champs aérothermochimiques	188
IV.5.2 La méthode de lancer de rayons	192
IV.5.3 Mise en œuvre du code ASTRE	193
IV.5.4 Comparaison méthode de lancer de rayons/code ASTRE	194
IV.5.4.1 Systèmes moléculaires et continua	194
IV.5.4.2 Raies atomiques	197
IV.5.4.3 Validation globale	200
IV.6 Application 3D : FIRE II	202
IV.6.1 Calcul sur un secteur angulaire de la couche de choc	203
IV.6.2 Calcul global de la couche de choc	207
IV.7 Conclusion	210

IV.1 Introduction

On présente dans ce chapitre une méthode de calcul de transfert radiatif basée sur une approche de Monte Carlo pour déterminer les puissances et les flux radiatifs dans les couches de choc multi-dimensionnelles de rentrée atmosphérique terrestre.

Après avoir brièvement, dans la deuxième section de ce chapitre, rappelé les expressions des puissances et des flux radiatifs, on exposera dans la section suivante quelques généralités sur la méthode de Monte Carlo et sur le solveur radiatif ASTRE [146]. La méthode présentée ensuite s'appuie sur une formulation de l'ETR adaptée au déséquilibre thermochimique (cf. chapitre III) et sur une modélisation hybride des propriétés radiatives constituée par les modèles de bandes (MSBE et box model) développés dans le chapitre III pour les systèmes moléculaires et les continua et par une approche raie par raie pour les raies atomiques. La mise en œuvre de cette modélisation a par conséquent nécessité le développement d'une méthodologie numérique adaptée. Ceci fait l'objet de la quatrième section. On souligne que les algorithmes développés et implémentés dans le code ASTRE sont relatifs à des peuplements Boltzmanniens des niveaux d'énergie des particules dans le cadre d'un modèle multi-température.

La cinquième partie traite de la validation de l'implémentation dans le code ASTRE de la méthode de calcul de transfert radiatif par comparaison aux résultats d'une méthode de lancer de rayons dans une configuration murs plans. La dernière partie est consacrée à des applications 3D sur le cas de rentrée FIRE II.

IV.2 Expressions générales de la puissance radiative volumique et du flux radiatif surfacique

On présente dans cette section, les expressions de la puissance volumique et du flux surfacique radiatifs dans une configuration 3D. Appliquées aux rentrées atmosphériques, ces expressions tiennent compte des phénomènes d'émission et d'absorption ayant lieu dans la couche de choc et aux frontières (infini amont et paroi du véhicule). On négligera ici les effets éventuels de diffusion du rayonnement. En utilisant l'ETR et la formulation du vecteur flux radiatif $\mathbf{q}^R$ données par les relations I.38 et I.40, la puissance radiative P^R en

un point M quelconque de l'espace s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned} P^R(M) &= -[\nabla \cdot \mathbf{q}^R]_M \\ &= -\int_0^{+\infty} \int_{4\pi} \left[\frac{\partial L_\sigma(s, \mathbf{u})}{\partial s} \right]_{s=s_M} d\Omega d\sigma \\ &= \int_0^{+\infty} \kappa_\sigma(M) \int_{4\pi} L_\sigma(M, \mathbf{u}) d\Omega d\sigma - 4\pi \int_0^{+\infty} \eta_\sigma(M) d\sigma. \end{aligned} \quad (IV.1)$$

Or la luminance monochromatique directionnelle selon $\mathbf{u}$ en un point M d'abscisse s_M peut s'écrire :

$$L_\sigma(M, \mathbf{u}) = L_\sigma^{par}(M_0, \mathbf{u}) \tau_\sigma(s_{M_0} \rightarrow s_M) + \int_{s_{M_0}}^{s_M} \eta_\sigma(s') \tau_\sigma(s' \rightarrow s_M) ds' \quad (IV.2)$$

où s_{M_0} est l'abscisse du point M_0 appartenant à une frontière du milieu (infini amont ou paroi), $L_\sigma^{par}(M_0, \mathbf{u})$ est la luminance partante du point frontière M_0 selon $\mathbf{u}$ et $\tau_\sigma(s' \rightarrow s_M)$ désigne la transmittivité de la colonne $s' \rightarrow s_M$:

$$\tau_\sigma(s' \rightarrow s_M) = \exp \left(\int_{s'}^{s_M} -\kappa_\sigma(s'') ds'' \right). \quad (IV.3)$$

La luminance provenant d'un point frontière M_0 est égale à :

$$L_\sigma^{par}(M_0, \mathbf{u}) = \epsilon_\sigma(M_0) L_\sigma^\circ(T_{M_0}) + \frac{1 - \epsilon_\sigma(M_0)}{\pi} \int_{2\pi} L_\sigma^{inc}(M_0, \mathbf{u}') |\mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}| d\Omega, \quad (IV.4)$$

où le premier terme du membre de droite est l'émission de la paroi en M_0 supposée égale à celle d'un corps opaque à émission isotrope à la température T_{M_0} caractérisée par une émissivité $\epsilon_\sigma(M_0)$ et le deuxième terme est la contribution des réflexions à la luminance partante ; $L_\sigma^{inc}(M_0, \mathbf{u}')$ est la luminance incidente en M_0 selon $\mathbf{u}'$. La réflexion a été supposée isotrope dans l'expression IV.4 bien que le traitement d'une réflexion spéculaire ne pose pas de difficulté comme on le verra par la suite.

En insérant l'expression IV.2 dans la relation IV.1, on obtient :

$$\begin{aligned} P^R(M) &= \underbrace{\int_0^{+\infty} \int_{4\pi} \left[\overbrace{-L_\sigma^{par}(M_0, \mathbf{u}) \frac{\partial \tau_\sigma(s_{M_0} \rightarrow s)}{\partial s}}^{(1)} - \overbrace{\int_{s_{M_0}}^s \eta_\sigma(s') \frac{\partial \tau_\sigma(s' \rightarrow s)}{\partial s} ds'}^{(2)} \right]_{s=s_M} d\Omega d\sigma}_{\text{absorption}} \\ &\quad - \underbrace{4\pi \int_0^{+\infty} \eta_\sigma(s_M) ds_M}_{\text{émission}}, \end{aligned} \quad (IV.5)$$

dans laquelle le terme (1) du terme d'absorption correspond à la part de la luminance issue des frontières (point M_0), prenant en compte le cas échéant des réflexions, qui est absorbée au point M et le terme (2) est la part de la luminance issue du milieu (entre M_0 et M) transmise jusqu'au point M et absorbée au point M .

À partir des expressions I.41 et IV.2, on peut exprimer le flux radiatif surfacique au point M :

$$\begin{aligned}
 q^R(M) = & \underbrace{\int_0^\infty \alpha_\sigma(M) \int_{2\pi} \left[L_\sigma^{par}(M_0, \mathbf{u}) \tau_\sigma(s_{M_0} \rightarrow s_M) + \int_{s_{M_0}}^{s_M} \eta_\sigma(s') \tau_\sigma(s' \rightarrow s_M) ds' \right] |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| d\Omega d\sigma}_{\text{absorption}} \\
 & - \underbrace{\pi \int_0^{+\infty} \epsilon_\sigma(M) L_\sigma^\circ(T_M) d\sigma}_{\text{émission}}, \tag{IV.6}
 \end{aligned}$$

où $\alpha_\sigma(M)$ est l'absorptivité de la frontière au point M .

Les expressions IV.5 et IV.6 de la puissance et du flux surfacique sont des expressions générales obtenues sans faire aucune hypothèse sur le modèle de propriétés radiatives du plasma et la méthode de résolution de l'ETR. Dans le cadre de ce travail, ces deux grandeurs seront déterminées avec le modèle hybride développé dans le chapitre III et une méthode de calcul de transfert radiatif basée sur une méthode de Monte Carlo.

IV.3 La méthode de Monte Carlo dans le code ASTRE

IV.3.1 Généralité sur les méthodes de Monte Carlo

Les méthodes de Monte Carlo sont de manière générale des méthodes mathématiques de calcul d'intégrales multiples s'appuyant sur des traitements statistiques. Les lois statistiques pouvant différer d'une méthode à l'autre, il n'existe pas une méthode de Monte Carlo unique. Ces méthodes sont particulièrement bien adaptées au transfert radiatif car la modélisation de ce type de transfert met en jeu des calculs d'intégrales (telles que celles présentes dans les relations IV.5 et IV.6) et de sommes multiples. Elles représentent une alternative aux méthodes déterministes classiques de résolution de l'ETR que sont par exemple le lancer de rayons, la méthode des harmoniques sphériques ou bien encore la méthode des ordonnées discrètes. Une introduction générale des méthodes de Monte Carlo pour des applications de transfert radiatif peut être trouvée dans les ouvrages de Modest [147], et de Siegel et Howell [148] par exemple.

D'un point de vue général, le transfert radiatif peut être simulé par petits paquets d'énergie suivant toutes les directions et sur des trajets rectilignes plus ou moins longs selon l'interaction de ces paquets d'énergie avec la matière (transmission, absorption, diffusion ou bien encore réflexion). Dans ce cadre, une méthode de Monte Carlo consiste à reproduire ces événements de manière statistique en simulant un très grand nombre de chemins optiques (rayons) caractérisés par des grandeurs tirées au sort selon des pdfs (probability density functions) correctement choisies. Ces grandeurs représentent en général un type de processus radiatif (contribuant à l'émission), un point spectral, un point de départ et une direction. Dans le cas de la diffusion, les changements de direction peuvent être également déterminés aléatoirement. Lorsque tous les chemins optiques ont été construits, les puissances volumiques et les flux surfaciques radiatifs sont obtenus en sommant les différentes

contributions radiatives de chaque rayon dans chaque cellule. Compte tenu de cette description, on peut dire que ces méthodes sont des variantes statistiques de la méthode de lancer de rayons déterministe.

L'avantage de ces méthodes par rapport aux méthodes déterministes vient du fait que la complexité de leur formulation ainsi que les temps de calcul propres à leurs mises en œuvre augmentent relativement peu avec la complexité du problème. Dans les problèmes de transfert radiatif, cette complexité peut être due par exemple à une géométrie elle-même complexe, et à la prise en compte de multiples processus radiatifs tels que l'absorption ou la diffusion. Un autre avantage des méthodes de Monte Carlo est que l'erreur engendrée est uniquement d'origine statistique, ce qui signifie que la solution exacte peut être approchée aussi près que l'on veut en simulant un nombre de rayons suffisant. La vitesse de convergence est cependant faible pour ces méthodes puisqu'elles sont soumises à la loi des grands nombres : pour N événements aléatoires indépendants, l'écart type des grandeurs moyennes permettant d'estimer les flux et les puissances varie seulement en $1/\sqrt{N}$.

IV.3.2 Généralités sur le code ASTRE

Le code ASTRE (Approche Statistique des Transferts Radiatifs dans les Écoulements) est un code de transfert radiatif 3D basé sur une approche de Monte Carlo. Il a commencé à être développé par l'ONERA en 1998 en collaboration avec le laboratoire EM2C pour étudier les transferts radiatifs dans les flammes turbulentes [146, 149, 150, 151]. Les applications de ce code de calcul ont été étendues récemment aux cas des rentrées atmosphériques martiennes pour des milieux à l'ETL dans le cadre de la thèse de Soubrié en 2006 [10, 95].

On décrit dans les paragraphes qui suivent l'algorithme général du code ASTRE permettant de déterminer statistiquement les intégrales IV.5 et IV.6 donnant les puissances et les flux surfaciques radiatifs avec un modèle de propriétés radiatives donnant les coefficients d'absorption et d'émission monochromatiques de chaque cellule du maillage. Une telle modélisation (approche à haute résolution) des propriétés radiatives n'est en réalité pas utilisée puisqu'elle nécessiterait d'avoir calculé et stocké au préalable tous les spectres de toutes les cellules homogènes de la géométrie. La description du code ASTRE est cependant relativement simple et assez générale dans ce cas et permet d'exposer simplement les étapes principales de l'approche de Monte Carlo mise en œuvre. En pratique le code ASTRE est utilisé avec des modèles simplifiés de propriétés radiatives qui nécessitent suivant le modèle une formulation adaptée de l'ETR. Ce point est abordé en particulier dans la section IV.4 qui traite de l'implémentation dans le code ASTRE de la modélisation hybride des propriétés radiatives développée dans le chapitre III. Par ailleurs, le code ASTRE traite également la diffusion. Ce phénomène n'étant pas pris en compte dans notre étude, la description du traitement de la diffusion n'est pas retranscrite dans ce paragraphe.

La première étape de l'algorithme consiste à déterminer la puissance émise $P_{emi}(i)$ pour chaque élément de volume ou élément de surface i du maillage via les relations suivantes :

$$P_{emi}(i) = 4\pi V_i \int_0^\infty \eta_\sigma(i) d\sigma \quad \text{pour un élément de volume} \quad (\text{IV.7})$$

$$P_{emi}(i) = \pi S_i \int_0^\infty \epsilon_\sigma(i) L_\sigma^\circ(T_i) d\sigma \quad \text{pour un élément de surface,} \quad (\text{IV.8})$$

où V_i , S_i désignent respectivement le volume ou la surface de l'élément i , $\eta_\sigma(i)$ le coefficient d'émission relatif aux conditions thermochimiques de la cellule i et $\epsilon_\sigma(i)$ l'émissivité de l'élément de surface i caractérisé par une température T_i .

Ensuite, le nombre de rayons (tirs) total N (fixé par l'utilisateur) est réparti sur l'ensemble des éléments (de volume ou de surface). Cette répartition est réalisée selon l'une des deux méthodes suivantes : soit le nombre de tirs N_i pour chaque élément i est évalué au prorata de son émission *i.e.* avec la relation :

$$N_i = \frac{P_{emi}(i)}{\sum_{\text{élément } i'} P_{emi}(i')} N, \quad (\text{IV.9})$$

soit la répartition des tirs est uniforme telle que $N_i = N/N_{elem}$, $\forall i$, où N_{elem} est le nombre total d'éléments.

Une double boucle est alors effectuée sur tous les éléments i et sur tous les tirs affectés à chaque élément i . Chaque tir est caractérisé par un point de départ dans l'élément i , une direction, une puissance, et un nombre d'onde. Ces grandeurs sont déterminées de la manière suivante :

- Le point d'émission E de chaque tir est choisi de manière uniforme dans l'élément émetteur. Pour un élément de surface (qui peut être de nature quelconque), l'élément est tout d'abord découpé en triangles, puis un triangle est tiré suivant une loi de probabilité pondérée par la surface. Le point est alors tiré de manière uniforme dans ce triangle. Pour un élément de volume, la méthodologie est identique. L'élément est d'abord découpé en tétraèdres puis le point est tiré de manière uniforme dans l'un des tétraèdres choisi préalablement suivant une loi de probabilité pondérée par le volume.

- La direction du rayon est déterminée avec deux angles θ (zénith) et ϕ (azimut) calculés de manière aléatoire à partir de deux paramètres R_θ et R_ϕ tirés uniformément dans l'intervalle $[0,1]$. Pour un élément de volume, les angles sont définis par :

$$\theta = \arccos(1 - 2R_\theta) \quad (\text{IV.10})$$

$$\phi = 2\pi R_\phi, \quad (\text{IV.11})$$

dans le repère général de la géométrie. Pour un élément de surface émettant de manière isotrope, les angles sont définis par :

$$\theta = \arccos(\sqrt{R_\theta}) \quad (\text{IV.12})$$

$$\phi = 2\pi R_\phi, \quad (\text{IV.13})$$

dans un repère local au point d'émission où la direction zénithale est la normale à la paroi.

- Tous les rayons émis par un élément i transportent une puissance identique qui vaut P_{emi}^i/N_i (ceci permet de conserver l'émission de l'élément).

- Enfin, pour déterminer le nombre d'onde σ_t à affecter au rayon, on construit la pdf $P^i(\sigma)$ basée sur l'émission de l'élément i . Cette pdf est définie par :

$$P^i(\sigma)d\sigma = \frac{\eta_\sigma(i)d\sigma}{\int_0^{+\infty} \eta_\sigma(i)d\sigma} \quad \text{pour un élément de volume} \quad (\text{IV.14})$$

$$P^i(\sigma)d\sigma = \frac{\epsilon_\sigma(i)L_\sigma^\circ(T)d\sigma}{\int_0^{+\infty} \epsilon_\sigma(i)L_\sigma^\circ(T)d\sigma} \quad \text{pour un élément de surface} \quad (\text{IV.15})$$

La fonction de distribution cumulée de $P^i(\sigma)$ conduit à définir le paramètre R_{σ_t} :

$$R_{\sigma_t} = \int_0^{\sigma_t} P^i(\sigma)d\sigma = \frac{\int_0^{\sigma_t} \eta_\sigma(i)d\sigma}{\int_0^{+\infty} \eta_\sigma(i)d\sigma} \quad \text{pour un élément de volume} \quad (\text{IV.16})$$

$$R_{\sigma_t} = \int_0^{\sigma_t} P^i(\sigma)d\sigma = \frac{\int_0^{\sigma_t} \epsilon_\sigma(i)L_\sigma^\circ(T)d\sigma}{\int_0^{+\infty} \epsilon_\sigma(i)L_\sigma^\circ(T)d\sigma} \quad \text{pour un élément de surface.} \quad (\text{IV.17})$$

Le tirage de σ_t est effectué en choisissant R_{σ_t} uniformément dans l'intervalle $[0,1]$. Ce type de tirage permet de prendre en compte les zones spectrales les plus émettrices et de conserver l'émission de chaque élément.

Une fois ces différents paramètres déterminés pour un tir, on construit le chemin optique du rayon dans la direction choisie. L'absorption de la puissance du tir est traitée de manière déterministe. Dans chaque cellule traversée, le rayon dépose une fraction de sa puissance initiale en fonction de la transmission de la cellule. Suivant les notations de la figure IV.1 qui représente un chemin optique d'un rayon indicé n émis depuis la cellule i au point M_{ni} , la puissance déposée lors du $k^{\text{ième}}$ passage dans la cellule j est égale à :

$$P_{abs}(n, i, j, k) = \frac{P_{emi}(i)}{N_i} (\tau_{\sigma_t}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) - \tau_{\sigma_t}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}})) \prod_{r=1}^{\Xi_{nj_k}} (1 - \epsilon_{\sigma, nr}), \quad (\text{IV.18})$$

où M_{nj_k-} et M_{nj_k+} sont les points d'intersection de la cellule j avec le rayon n pour le $k^{\text{ième}}$ passage et Ξ_{nj_k} le nombre de réflexions subies par le chemin optique entre M_{ni} et M_{nj_k-} (sur des parois d'émissivité $\epsilon_{\sigma, nr}$). À noter que les transmittivités dans cette expression ne sont relatives qu'au milieu gazeux.

Lors de la $k^{\text{ième}}$ intersection du rayon avec un élément de surface j , la fraction de la puissance, transportée par le rayon n , absorbée par j est donnée par :

$$P_{abs}(n, i, j, k) = \frac{P_{emi}(i)}{N_i} \tau_{\sigma_t}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) \alpha_{\sigma_t}(j) \prod_{r=1}^{\Xi_{nj_k}} (1 - \epsilon_{\sigma, nr}), \quad (\text{IV.19})$$

où $\alpha_{\sigma_t}(j)$ désigne l'absorptivité de l'élément de surface j et Ξ_{nj_k} désigne le nombre de réflexions subies par le rayon n avant d'atteindre M_{nj_k} .

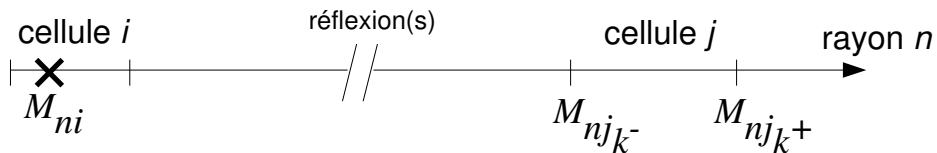


FIG. IV.1: Chemin optique d'un rayon n émis de la cellule i au point M_{ni} .

Le chemin d'un rayon est construit cellule par cellule (avec réflexion(s) le cas échéant) jusqu'à ce qu'un critère d'extinction soit atteint. Ce critère est basé sur la puissance transportée par le rayon. Lorsque celle-ci devient inférieure à un certain seuil, la puissance restante est supposée totalement absorbée par la cellule suivante.

Une fois les chemins optiques tracés pour tous les rayons de toutes les cellules, la puissance radiative volumique pour chaque cellule j s'obtient à partir des sommes suivantes :

$$P^R(j) = \frac{1}{V_j} \left[\left(\sum_{i=1}^{N_{elem}} \sum_{n=1}^{N_i} \sum_{k=1}^{N_{pass}^{nj}} P_{abs}(n, i, j, k) \right) - P_{emi}(j) \right], \quad (IV.20)$$

où N_{pass}^{nj} désigne le nombre de passages du rayon n dans la cellule j . Dans cette expression, la première somme désigne une sommation sur tous les éléments du maillage (surface ou volume). Pour les flux surfaciques, ils sont données par la même relation en remplaçant V_j par S_j , j désignant alors un élément de surface.

L'algorithme décrit ci-dessus correspond à une approche de Monte Carlo classique appelée Forward Method (FM) dans la littérature [149]. Le code ASTRE dispose d'autres méthodes reposant sur le principe de réciprocité. Le lecteur est invité à se référer à [149, 151] pour plus d'informations sur ces méthodes qui sont utilisées pour des milieux à l'ETL. Dans le cadre de nos applications (milieux hors ETL), les développements et la mise en œuvre de ASTRE ont été réalisés avec l'approche FM.

Par ailleurs, on notera que le code ASTRE est un code parallélisé sur le nombre de tirs effectués. Ceci permet de réaliser un nombre important de tirs répartis par paquets sur différents processeurs et d'obtenir ainsi des écarts types sur les résultats conformément à la relation suivante [147] :

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{E(E-1)} \sum_{i=1}^E [\Psi(N_i) - \Psi(N)]^2}, \quad (IV.21)$$

avec la moyenne

$$\Psi(N) = \frac{1}{E} \sum_{i=1}^E \Psi(N_i), \quad (IV.22)$$

où E est le nombre de paquets, N le nombre total de tirs, N_i le nombre de tirs affecté au $i^{\text{ème}}$ paquet, et $\Psi(N_i)$ l'estimation statistique d'une grandeur Ψ obtenu avec N_i tirs.

IV.4 Implémentation du modèle approché de rayonnement dans le code ASTRE

Le fonctionnement du code ASTRE a été décrit dans la section précédente pour un modèle de propriétés radiatives utilisant une approche raie par raie. Cette modélisation n'étant en réalité pas praticable pour traiter tous les processus radiatifs dans le cadre de rentrée atmosphérique, on utilise des modèles simplifiés de propriétés radiatives. Ces modèles requièrent une formulation adaptée de l'équation de transfert radiatif. Dans les travaux de Soubrié [10], pour étudier les transferts radiatifs dans les écoulements (non ionisés à l'ETL) de rentrée atmosphérique martienne, un modèle statistique à bandes étroites (MSBE), développé par Rivière *et al.* [96] pour traiter le rayonnement des espèces CO et CO_2 dans l'infrarouge, a été implémenté dans le code ASTRE. Dans le présent travail, nous avons implémenté le modèle hybride de rayonnement (MSBE pour les systèmes moléculaires

optiquement épais, approche raie par raie pour les raies atomiques et box model pour les autres contributions) développé dans le chapitre III pour les plasmas ionisés et hors ETL de rentrée terrestre. Ce travail s'est basé sur celui réalisé pour l'implémentation du MSBE martien [10] mais a été cependant rendu plus complexe compte tenu de la diversité des processus radiatifs mis en jeu pour les plasmas d'air ionisés, de l'aspect hors équilibre de l'écoulement (nécessitant une formulation spécifique de l'ETR (cf. chapitre II), et de la modélisation hybride des propriétés radiatives basée sur des modèles de bandes et une approche haute résolution.

IV.4.1 Formulation de l'ETR

Dans le cadre de la modélisation hybride développée dans le chapitre III, la luminance provenant du milieu peut être décomposée en trois parties suivant le type de contribution (en émission). On distinguera : (i) les systèmes électroniques moléculaires optiquement épais, (ii) les systèmes électroniques moléculaires optiquement minces et les continua, et enfin (iii) les raies atomiques. Les expressions des luminances exposées dans ce paragraphe s'appuient sur la formulation de l'ETR donnée dans les sections III.3 et III.6.1. Elles correspondent au traitement par bande spectrale du deuxième terme du membre de droite de la relation IV.2 dans le cas où M_0 est un point du volume. De la même manière que précédemment, on se place dans le cadre de parois opaques à émission isotrope.

On considère un chemin optique partant du point M_0 selon la direction $\mathbf{u}'$ jusqu'au point M selon $\mathbf{u}$ subissant un nombre Ξ de réflexions sur des parois d'émissivité $\epsilon_{\sigma,r}$ (r étant le numéro de la réflexion). Ce chemin est noté $(s_{M_0}, \mathbf{u}'; s_M, \mathbf{u})$.

La contribution des systèmes électroniques moléculaires optiquement épais étant traitée avec un MSBE, la luminance d'un système j moyennée sur une bande spectrale $\Delta\sigma$ s'écrit au point M :

$$\overline{L}^{\Delta\sigma}_j(M, \mathbf{u}) = \int_{s_{M_0}}^{s_M} \frac{\overline{\eta}^j(s')^{\Delta\sigma}}{\kappa^j(s')} \frac{\partial \overline{\tau}^{\Delta\sigma}_j(s' \rightarrow s_M)}{\partial s'} \prod_{j' \neq j} \overline{\tau}^{\Delta\sigma}_{j'}(s' \rightarrow s_M) ds' \prod_{r=1}^{\Xi} (1 - \overline{\epsilon}_r^{\Delta\sigma}). \quad (\text{IV.23})$$

Pour une contribution j traitée avec un box model (continua et systèmes électroniques optiquement minces), la luminance s'écrit :

$$\overline{L}^{\Delta\sigma}_j(M, \mathbf{u}) = \int_{s_{M_0}}^{s_M} \overline{\eta}^j(s')^{\Delta\sigma} \prod_{j'} \overline{\tau}^{\Delta\sigma}_{j'}(s' \rightarrow s_M) ds' \prod_{r=1}^{\Xi} (1 - \overline{\epsilon}_r^{\Delta\sigma}), \quad (\text{IV.24})$$

et enfin pour les raies atomiques qui sont traitées en raie par raie, la luminance monochromatique d'une raie j s'écrit :

$$L^j_{\sigma}(M, \mathbf{u}) = \int_{s_{M_0}}^{s_M} \eta^j_{\sigma}(s') \tau^{at}_{\sigma}(s' \rightarrow s_M) \prod_{j' \neq at.} \overline{\tau}^{\Delta\sigma}_{j'}(s' \rightarrow s_M) ds' \prod_{r=1}^{\Xi} (1 - \overline{\epsilon}_r^{\Delta\sigma}), \quad (\text{IV.25})$$

où τ^{at}_{σ} désigne la transmittivité de toutes les raies atomiques (at).

Dans ces relations, lorsque l'indice j ou j' désigne un système électronique moléculaire optiquement épais, la transmittivité associée à cette contribution est calculée à partir du

MSBE développé dans le chapitre III tel que :

$$\overline{\tau^j}^{\Delta\sigma}(s' \rightarrow s) = \exp\left(-\frac{\overline{W_V}}{\delta}(s' \rightarrow s, j, b)\right), \quad (\text{IV.26})$$

où l'entier b désigne le numéro de la bande spectrale $\Delta\sigma$ et,

$$\frac{\overline{W_V}}{\delta}(s' \rightarrow s, j, b) = k_{eq}^{j,b} u_{eq} \sqrt{1 - \Omega^{-1/2}}, \quad (\text{IV.27})$$

avec

$$\Omega = \left[1 - \left(\frac{1}{k_{eq}^{j,b}} \frac{\overline{W_D}}{\delta}(s' \rightarrow s, j, b)\right)^2\right]^{-2} + \left[1 - \left(\frac{1}{k_{eq}^{j,b}} \frac{\overline{W_L}}{\delta}(s' \rightarrow s, j, b)\right)^2\right]^{-2} - 1, \quad (\text{IV.28})$$

et

$$\frac{\overline{W_L}}{\delta}(s' \rightarrow s, j, b) = 2\beta_{Leq}^j \left(\sqrt{1 + \frac{k_{eq}^{j,b} u_{eq}}{\beta_{Leq}^{j,b}}} - 1 \right) \quad (\text{IV.29})$$

$$\frac{\overline{W_D}}{\delta}(s' \rightarrow s, j, b) = E\left(\frac{k_{eq}^{j,b} u_{eq}}{\beta_{Deq}^{j,b}}\right). \quad (\text{IV.30})$$

Les paramètres u_{eq} , $k_{eq}^{j,b}$, $\beta_{Deq}^{j,b}$ et $\beta_{Leq}^{j,b}$ sont définis comme suit :

$$u_{eq} = \int_{s'}^s x(s'') p(s'') ds'' \quad (\text{IV.31})$$

$$k_{eq}^{j,b} = \frac{1}{u_{eq}} \int_{s'}^s x(s'') p(s'') k^{j,b}(s'') ds'' \quad (\text{IV.32})$$

$$\beta_{Leq}^{j,b} = \frac{1}{k_{eq}^{j,b} u_{eq}} \int_{s'}^s x(s'') p(s'') k^{j,b}(s'') \beta_L^{j,b}(s'') ds'' \quad (\text{IV.33})$$

$$\beta_{Deq}^{j,b} = \frac{1}{k_{eq}^{j,b} u_{eq}} \int_{s'}^s x(s'') p(s'') k^{j,b}(s'') \beta_D^{j,b}(s'') ds'', \quad (\text{IV.34})$$

et la fonction E est définie comme :

$$E(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y e^{-\xi^2}}{1 + y e^{-\xi^2}} d\xi. \quad (\text{IV.35})$$

Les paramètres $k^{j,b}$, $\beta_L^{j,b}$ et $\beta_D^{j,b}$ sont calculés pour la contribution j , pour toutes les cellules traversées, par interpolation des paramètres du modèle MSBE qui ont été tabulés en températures et par bande spectrale.

Dans le cas où j ou j' désigne un système optiquement mince ou un continuum, la transmittivité se calcule plus facilement avec l'expression suivante :

$$\overline{\tau^j}^{\Delta\sigma}(s' \rightarrow s) = \exp\left(-\int_{s'}^s \overline{\kappa^j}^{\Delta\sigma}(s'') ds''\right). \quad (\text{IV.36})$$

Et enfin pour les raies atomiques pour lesquelles on utilise une approche raie par raie, la transmittivité τ_σ^{at} dans la relation IV.25 est égale à :

$$\tau_\sigma^{at}(s' \rightarrow s) = \exp \left(- \int_{s'}^s \kappa_\sigma^{at}(s'') ds'' \right), \quad (IV.37)$$

où κ_σ^{at} désigne le coefficient d'absorption monochromatique des raies atomiques.

La transmittivité des raies atomiques dans les produits des transmittivités qui apparaît dans les relations IV.23 et IV.24, est calculée suivant l'expression moyenne suivante :

$$\overline{\tau_\sigma^{at}}^{\Delta\sigma}(s' \rightarrow s) = \frac{1}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} \exp \left(- \int_{s'}^s \kappa_\sigma^{at}(s'') ds'' \right) d\sigma. \quad (IV.38)$$

En insérant les relations IV.23, IV.24 et IV.25 dans l'expression IV.1 et sans oublier la contribution des frontières, on obtient par analogie à la relation IV.5, la puissance radiative volumique en un point M dans le cadre de l'utilisation du modèle hybride de propriétés radiatives :

$$P^R(M) = P_{abs}^R(M) - P_{emi}^R(M), \quad (IV.39)$$

où $P_{abs}^R(M)$ et $P_{emi}^R(M)$ sont les puissances absorbée et émise au point M . La puissance $P_{abs}^R(M)$ est décomposée en quatre parties : (i) la puissance absorbée provenant des rayons émis par les frontières $P_{abs}^{lim}(M)$, (ii) la puissance absorbée provenant des rayons émis par les contributions traitées en MSBE $P_{abs}^{msbe}(M)$ (ces contributions sont indicées *msbe*), (iii) celle provenant des rayons émis par les contributions traitées en box model $P_{abs}^{box}(M)$ (indicées *box*), et (iv) celle issue des rayons émis par les raies atomiques $P_{abs}^{at}(M)$ (indicées *at*).

Pour ne pas alourdir les expressions des puissances avec la prise en compte des réflexions (qui ne présente pas de difficultés de fond), on considérera dans la suite de cette sous-section que les parois sont des corps noirs. On notera cependant que le code ASTRE peut traiter les réflexions de manière spéculaire ou diffuse. Les rayons sont alors partiellement absorbés lors de leur impact sur un élément de surface puis réorientés (si le rayon a assez d'énergie) vers le milieu suivant une direction dépendant du type de réflexion. Les corrélations spectrales entre luminances incidente et partante sont prises en compte de façon naturelle puisqu'on connaît l'« histoire » du rayon.

Sous cette considération, les puissances $P_{abs}^{lim}(M)$, $P_{abs}^{msbe}(M)$, $P_{abs}^{box}(M)$ et $P_{abs}^{at}(M)$ s'expriment comme suit :

$$P_{abs}^{lim}(M) = \sum_{band.} \Delta\sigma \int_{4\pi} -\overline{L_\sigma^o(T_{M_0})}^{\Delta\sigma} \left[\frac{\partial \left(\prod_j \overline{\tau_j^{\Delta\sigma}}(s_{M_0} \rightarrow s) \right)}{\partial s} \right]_{s=s_M} d\Omega. \quad (IV.40)$$

$$P_{abs}^{msbe}(M) = \sum_{msbe} \sum_{j \text{ band.}} \Delta\sigma \int_{4\pi} \left[- \int_{s_{M_0}}^s \frac{\overline{\eta_j^{\Delta\sigma}}(s')}{\overline{\kappa_j^{\Delta\sigma}}(s')} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \overline{\tau_j^{\Delta\sigma}}(s' \rightarrow s)}{\partial s'} \prod_{j' \neq j} \overline{\tau_j^{\Delta\sigma}}(s' \rightarrow s) \right) ds' \right]_{s=s_M} d\Omega \quad (IV.41)$$

$$P_{abs}^{box}(M) = \sum_{box} \sum_{j \text{ band.}} \Delta\sigma \int_{4\pi} \left[- \int_{s_{M_0}}^s \overline{\eta_j^{\Delta\sigma}}(s') \frac{\partial \left(\prod_{j'} \overline{\tau_j^{\Delta\sigma}}(s' \rightarrow s) \right)}{\partial s} ds' \right]_{s=s_M} d\Omega \quad (IV.42)$$

$$P_{abs}^{at}(M) = \sum_{at\ j} \int_0^{+\infty} \int_{4\pi} \left[- \int_{s_{M_0}}^s \eta_{\sigma}^j(s') \frac{\partial \left(\tau_{\sigma}^{at}(s' \rightarrow s) \prod_{j' \neq at} \overline{\tau}^{j'} \Delta\sigma(s' \rightarrow s) \right)}{\partial s} ds' \right]_{s=s_M} d\Omega d\sigma. \quad (IV.43)$$

où le point M_0 est le point de paroi à l'origine du rayon incident en M dans $d\Omega$.

La puissance absorbée est donc la somme de ces quatre contributions :

$$P_{abs}^R(M) = P_{abs}^{lim}(M) + P_{abs}^{msbe}(M) + P_{abs}^{box}(M) + P_{abs}^{at}(M). \quad (IV.44)$$

Concernant la puissance émise au point M d'un élément de volume, on peut l'écrire suivant la même décomposition comme :

$$\begin{aligned} P_{emi}^R(M) &= P_{emi}^{msbe}(M) + P_{emi}^{box}(M) + P_{emi}^{at}(M) \\ &= 4\pi \left[\sum_{msbe\ j\ band.} \sum_{\Delta\sigma} \overline{\eta}^j(M)^{\Delta\sigma} \Delta\sigma + \sum_{box\ j\ band.} \sum_{\Delta\sigma} \overline{\eta}^j(M)^{\Delta\sigma} \Delta\sigma + \sum_{at\ j} \Upsilon^j(M) \right], \end{aligned} \quad (IV.45)$$

où Υ^j est l'intensité en émission de la raie atomique j .

En ce qui concerne les flux pariétaux, le terme d'émission est identique à celui de l'expression IV.6 et le terme d'absorption est égal au terme $P_{abs}^R(M)$ (donnée dans la relation IV.44 en enlevant la dérivée partielle par rapport à l'abscisse du point M dans les expressions IV.40 à IV.43 qui correspond au dépôt au point M), multiplié par l'absorptivité de la paroi.

IV.4.2 Méthodologie numérique

On décrit dans cette section la méthodologie adoptée pour implémenter dans une méthode de Monte Carlo les grandeurs formulées dans le paragraphe précédent (*i.e.* puissances volumiques et flux radiatifs). De manière globale, la méthodologie reprend les grandes étapes décrites dans la section IV.3.2, mais l'utilisation d'une modélisation hybride des propriétés radiatives (modèle de bandes et approche raie par raie) a demandé certains développements spécifiques. Ceci étant, l'étape finale qui consiste à sommer pour chaque élément de surface et de volume les puissances absorbées et émises pour déterminer le champ de puissance et les flux radiatifs reste cependant rigoureusement la même (cf. relation IV.20 pour le champ de puissance).

IV.4.2.1 Répartition initiale des tirs dans les éléments de volumes et de surfaces

On cherche à évaluer les puissances et les flux radiatifs en simulant un nombre N de tirs au sein de la géométrie. Compte tenu des résultats obtenus dans le chapitre II concernant les luminances incidentes à la paroi d'un engin de rentrée à très haute vitesse, les processus lié-lié moléculaires (*mol*), lié-lié atomiques (*at*) et les continus (*cont*) contribuent chacun (plus ou moins suivant le point de trajectoire) à l'échauffement de la paroi. Pour s'assurer de faire émettre ces trois types de contribution, la première étape de l'algorithme consiste

à répartir le nombre de tirs N entre les trois types de processus sans oublier l'émission des frontières (*lim*) en particulier celle de la paroi qui peut être significative lorsque la température surfacique de l'engin devient élevée. Pour ce faire, on détermine au préalable les puissances émises par les atomes P_{emi}^{at} , les systèmes moléculaires P_{emi}^{mol} , les continua P_{emi}^{cont} et les frontières P_{emi}^{lim} :

$$P_{emi}^{at} = \sum_{cell. i} P_{emi}^{at}(i) = \sum_{cell. i} 4\pi V_i \sum_{at j} \Upsilon^j(i) \quad (IV.46)$$

$$P_{emi}^{mol} = \sum_{cell. i} P_{emi}^{mol}(i) = \sum_{cell. i} 4\pi V_i \sum_{mol j} \sum_{band. \Delta\sigma} \overline{\eta^j(i)}^{\Delta\sigma} \Delta\sigma \quad (IV.47)$$

$$P_{emi}^{cont} = \sum_{cell. i} P_{emi}^{cont}(i) = \sum_{cell. i} 4\pi V_i \sum_{cont j} \sum_{band. \Delta\sigma} \overline{\eta^j(i)}^{\Delta\sigma} \Delta\sigma \quad (IV.48)$$

$$P_{emi}^{lim} = \sum_{lim i} P_{emi}^{lim}(i) = \sum_{lim i} \pi S_i \sum_{band. \Delta\sigma} \overline{\epsilon(i)}^{\Delta\sigma} L_{\sigma_{c_b}}^{\circ}(T_i) \Delta\sigma, \quad (IV.49)$$

où T_i et S_i désignent la température et l'aire de l'élément de surface i , $L_{\sigma_{c_b}}^{\circ}(T_i)$ la luminance d'équilibre à la température T_i au centre de bande σ_{c_b} . Le détail des calculs des coefficients d'émission $\overline{\eta^j(i)}^{\Delta\sigma}$ et des intensités en émission des raies atomiques $\Upsilon^j(i)$ sont indiqués dans la section IV.4.3.

Ensuite, on affecte un nombre de tirs N^{lim} pour les frontières suivant la relation :

$$N^{lim} = \frac{P_{emi}^{lim}}{P_{emi}^{lim} + P_{emi}^{cont} + P_{emi}^{mol}} N. \quad (IV.50)$$

On ne prend pas en compte la puissance des atomes car elle est généralement bien supérieure à toutes les autres à cause des raies atomiques très intenses dans le VUV.

Pour les autres contributions, on répartit d'abord les tirs suivant :

$$N^{at} = \alpha_{at}(N - N^{lim}) \quad (IV.51)$$

$$N^{mol} = \alpha_{mol}(N - N^{lim}) \quad (IV.52)$$

$$N^{cont} = \alpha_{cont}(N - N^{lim}), \quad (IV.53)$$

avec

$$\alpha_{at} + \alpha_{mol} + \alpha_{cont} = 1. \quad (IV.54)$$

Les trois coefficients α_{at} , α_{mol} et α_{cont} sont choisis par l'utilisateur (par défaut, ils sont égaux à 1/3). Ensuite, on affecte un nombre de tirs N_i^{proc} à chaque élément de surface ou de volume i pour chaque type de processus (*proc*) au prorata de l'émission selon :

$$N_i^{proc} = \frac{P_{emi}^{proc}(i)}{\sum_i P_{emi}^{proc}(i)} N^{proc}, \quad (IV.55)$$

où l'indice *proc* désigne les indices *mol*, *at*, *cont* et *lim*.

IV.4.2.2 Traitement d'un rayon

Une fois le nombre de rayons réparti, on traite d'abord les rayons émis par les éléments de volume en effectuant une triple boucle : la première sur les trois processus (*mol*, *cont*

et *at*), la deuxième sur tous les éléments de volume, et enfin la dernière sur le nombre de rayons affecté pour le type de processus et la cellule traités. Pour le traitement des surfaces, une double boucle (sur les éléments puis sur les rayons) suffit. Pour chaque rayon, un point de départ et une direction sont déterminés de la même manière que celle indiquée dans la section IV.3.2 sur la description générale du code ASTRE. La puissance transportée par le rayon dépend du type de processus et de l'élément émetteur, et vaut $P_{emi}^{proc}(i)/N_i^{proc}$. Ensuite, le choix de la bande spectrale (ou du nombre d'onde) et le traitement de l'absorption (en MSBE, box model ou raie par raie), dépendent, au vu des relations IV.41 à IV.43, du système qui émet. On présente ci-dessous les algorithmes employés pour traiter les rayons émis par les trois types de processus (*mol*, *cont* et *at*) en présentant à chaque fois le traitement de l'absorption par les éléments de volume. Pour alléger les expressions, on considère, sauf mention contraire, que les éléments de surface sont des corps noirs. Le dernier paragraphe est consacré aux rayons émis depuis les frontières (*lim*). On ne parlera pas dans cette section de l'absorption par les éléments de surface qui ne présente pas de difficulté supplémentaire par rapport au traitement de l'absorption en volume.

Systèmes moléculaires

Les systèmes moléculaires sont traités en modèle de bandes. On aborde successivement pour ce type de processus le choix du système émettant, celui de la bande spectrale et enfin le traitement de l'absorption. Les expressions données sont relatives à un élément de volume i pour un rayon indicé n .

- On choisit le système émettant (indicé *isys*) parmi les systèmes moléculaires selon une pdf de l'émission de ces systèmes. Ce choix est réalisé en inversant la relation suivante :

$$R_{isys}^n = \frac{\sum_{k=1}^{isys} P_{emi}^k(i)}{\sum_{k=1}^{mol} P_{emi}^k(i)}, \quad (IV.56)$$

avec

$$P_{emi}^k(i) = \sum_{band. b} P_{emi}^{k,b}(i) = \sum_{band. b} 4\pi V_i \overline{\eta^k(i)}^{\Delta\sigma} \Delta\sigma, \quad (IV.57)$$

et R_{isys}^n un nombre généré aléatoirement de façon uniforme dans l'intervalle $[0,1]$ pour le $n^{ième}$ rayon. L'inversion consiste simplement à déterminer l'indice *isys* tel que

$$\frac{\sum_{k=1}^{isys-1} P_{emi}^k(i)}{\sum_{k=1}^{mol} P_{emi}^k(i)} \leq R_{isys}^n < \frac{\sum_{k=1}^{isys} P_{emi}^k(i)}{\sum_{k=1}^{mol} P_{emi}^k(i)}. \quad (IV.58)$$

- Le choix de la bande spectrale indicée *ib* est effectué à l'aide de la pdf de l'émission des bandes du système sélectionné. La relation à inverser est alors la suivante :

$$R_{ib}^n = \frac{\sum_{b=1}^{ib} P_{emi}^{isys,b}(i)}{\sum_{b=1}^{band.} P_{emi}^{isys,b}(i)}, \quad (IV.59)$$

où R_{ib}^n est un nombre également généré aléatoirement de façon uniforme dans l'intervalle $[0,1]$.

- Le traitement de l'absorption (*i.e.* la détermination de la puissance déposée dans chaque cellule traversée) dépend du système moléculaire *isys* émettant sélectionné : soit c'est un

système optiquement épais traité alors en MSBE, soit c'est un système optiquement mince traité alors en box model. On expose dans ce qui suit la procédure utilisée dans chacun des deux cas.

- Cas d'un système optiquement épais :

Pour bien comprendre les expressions utilisées pour traiter un système optiquement épais, nous nous plaçons dans un premier temps dans le cas monochromatique. De manière analogue à l'équation IV.18, la puissance déposée dans une cellule j lors du $k^{ième}$ passage d'un rayon n émis (de manière monochromatique en σ) par un système moléculaire *isys* optiquement épais depuis le point M_i de la cellule i s'écrit comme suit en prenant la notation de la figure IV.1 (page 173) :

$$P_{abs}(n, i, j, k) = \frac{P_{emi}^{mol}(i)}{N_i^{mol}} \left[\tau_{\sigma}^{isys}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) \prod_{is \neq isys} \tau_{\sigma}^{is}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) - \tau_{\sigma}^{isys}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \prod_{is \neq isys} \tau_{\sigma}^{is}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right]. \quad (IV.60)$$

Le traitement par bande spectrale d'un système optiquement épais doit tenir compte du fait que son émission est spectralement corrélée avec sa transmission. Les processus radiatifs entre systèmes étant supposés par ailleurs décorrélés (cf. §III.3.2), nous avons montré dans la section III.3.2, que pour un système, le rapport $\eta_{\sigma}/\kappa_{\sigma}$ est décorrélé du produit $\kappa_{\sigma}\tau_{\sigma}$ ($= \partial\tau_{\sigma}/\partial s$). Cette décorrélation permet d'écrire également que $\overline{\eta/\kappa}^{\Delta\sigma} \simeq \overline{\eta}^{\Delta\sigma}/\overline{\kappa}^{\Delta\sigma}$ (cf. §III.4.3.1). À partir de ces résultats et compte tenu de l'expression IV.47 de la puissance émise en mince, on peut écrire $P_{abs}(n, i, j, k)$ pour une bande spectrale $\Delta\sigma$ suivant l'expression (analogue à la relation IV.41 sous forme discrète) :

$$P_{abs}(n, i, j, k) = \frac{P_{emi}^{mol}(i)}{N_i^{mol}} \frac{1}{\kappa^{isys}(i)^{\Delta\sigma}} \left[\left[\frac{\partial \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s \rightarrow s_{M_{nj_k-}})}{\partial s} \right]_{s=s_{M_{ni}}} \prod_{is \neq isys} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) - \left[\frac{\partial \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s \rightarrow s_{M_{nj_k+}})}{\partial s} \right]_{s=s_{M_{ni}}} \prod_{is \neq isys} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right]. \quad (IV.61)$$



FIG. IV.2: Chemin optique d'un rayon n émis de la cellule i au point M_{ni} .

En prenant les notations de la figure IV.2, on peut faire l'approximation :

$$\left[\frac{\partial \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s \rightarrow s_{M_{nj_k}})}{\partial s} \right]_{s=s_{M_{ni}}} \approx \frac{\overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni+}} \rightarrow s_{M_{nj_k}}) - \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni-}} \rightarrow s_{M_{nj_k}})}{\delta s(M_{ni})}, \quad (\text{IV.62})$$

où $\delta s(M_{ni}) = s_{M_{ni+}} - s_{M_{ni-}}$. Cette approximation peut être insérée dans la relation IV.61 afin de la discrétiser en remplaçant M_{nj_k} par M_{nj_k-} et M_{nj_k+} . Elle est valable si $1 - \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni-}} \rightarrow s_{M_{ni+}}) \simeq \overline{\kappa^{isys}}(i)^{\Delta\sigma} \delta s(M_{ni})$; autrement dit si le système *isys* est optiquement mince dans l'intervalle $\delta s(M_{ni})$. En pratique, pour s'assurer de la validité de cette hypothèse, la distance $\delta s(M_{ni})$ est prise égale à 10^{-6} m. Dans ces conditions, on obtient la relation discrétisée suivante :

$$P_{abs}(n, i, j, k) = \frac{P_{emi}^{mol}(i)}{N_i^{mol}} \frac{1}{\overline{\kappa_i^{isys}}^{\Delta\sigma} \delta s(M_{ni})} \left[\left(\overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni+}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) - \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni-}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) \right) \right. \\ \times \prod_{is \neq isys} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) \\ \left. - \left(\overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni+}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) - \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni-}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right) \right. \\ \left. \times \prod_{is \neq isys} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right]. \quad (\text{IV.63})$$

Dans le cas où les réflexions sont prises en compte et en sommant sur tous les passages du rayon n dans la cellule j , la puissance déposée dans la cellule j s'écrit :

$$P_{abs}(n, i, j) = \frac{P_{emi}^{mol}(i)}{N_i^{mol}} \frac{1}{\overline{\kappa_i^{isys}}^{\Delta\sigma} \delta s(M_{ni})} \sum_{k=1}^{N_{pass}^{nj}} \left\{ \left[\left(\overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni+}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) - \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni-}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) \right) \right. \right. \\ \times \prod_{is \neq isys} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) \\ \left. - \left(\overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni+}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) - \overline{\tau^{isys}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni-}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right) \right. \\ \left. \times \prod_{is \neq isys} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right] \prod_{r=1}^{\Xi_{nj_k}} (1 - \overline{\epsilon_{nr}}^{\Delta\sigma}) \Big\}, \quad (\text{IV.64})$$

où N_{pass}^{nj} désigne le nombre de passages du rayon n à travers la cellule j . Ξ_{nj_k} désigne le nombre de réflexions que subit le rayon n avant d'atteindre pour la $k^{ième}$ fois la cellule j .

- Cas d'un système optiquement mince :

On n'a pas besoin de considérer de corrélations spectrales entre l'émission et la transmission de ces systèmes. La relation IV.60 peut être directement utilisée par bande spectrale en décorrélant tous les processus radiatifs. Suivant la même notation exposée dans le paragraphe précédent, la puissance déposée dans ce cas dans une cellule j

s'écrit (la relation IV.42 étant sa forme intégrale) :

$$P_{abs}(n, i, j, k) = \frac{P_{emi}^{mol}(i)}{N_i^{mol}} \left[\prod_{is} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k-}}) - \prod_{is} \overline{\tau^{is}}^{\Delta\sigma}(s_{M_{ni}} \rightarrow s_{M_{nj_k+}}) \right]. \quad (IV.65)$$

Dans les relations IV.63 et IV.65, les transmittivités des contributions traitées en modèle de bandes (MSBE ou box model) sont calculées à partir des relations IV.26 et IV.36 discrétisées sur les différents trajets à considérer. Les paramètres utiles (paramètres du MSBE et coefficients d'absorption) sont calculés, pour chaque élément traversé, par interpolation de paramètres pré-tabulés sur une grille de températures (cf. chapitre III). Plus de détails sont données dans le paragraphe IV.4.3.

Pour la contribution des raies atomiques à l'absorption, la transmittivité moyenne sur $\Delta\sigma$ des raies atomiques ne peut être calculée de manière déterministe à cause du temps CPU important que prendraient des calculs systématiques de spectres atomiques et de transmittivités moyennes. Pour pallier ce problème, la solution qui a été retenue est de mettre en oeuvre la relation suivante :

$$\overline{\tau^{at}}^{\Delta\sigma}(s' \rightarrow s) \approx \tau_{\sigma^*}^{at}(s' \rightarrow s) = \exp \left(- \sum_{\substack{cell. k \\ traversées}} \kappa_{\sigma^*}^{at}(k) \Delta s_k \right), \quad (IV.66)$$

où $\kappa_{\sigma^*}^{at}(k)$ est le coefficient d'absorption monochromatique des raies atomiques pour les conditions thermochimiques de la cellule k et au nombre d'onde σ^* qui est un nombre d'onde tiré uniformément dans la bande spectrale considérée. La grandeur Δs_k désigne la longueur parcourue par le rayon dans la cellule k . La précision de cette solution est donc statistique. La procédure de calcul du coefficient d'absorption monochromatique $\kappa_{\sigma^*}^{at}(k)$ est indiquée dans le paragraphe « Raies atomiques » ci-dessous.

Continua

Les continua étant également traités en modèle de bandes (box model dans ce cas), l'algorithme est similaire à celui décrit précédemment pour les systèmes moléculaires en ce qui concerne le tirage du système et de la bande spectrale. Ainsi le système *isys* et la bande spectrale *ib* sont choisis successivement avec les relations IV.56, IV.57 et IV.58 appliquées aux continua.

L'absorption est traitée exactement de la même manière que pour les systèmes moléculaires optiquement minces discutés ci-dessus. La puissance déposée dans les cellules par absorption est donc donnée par la relation IV.65 en remplaçant le rapport $P_{emi}^{mol}(i)/N_i^{mol}$ par $P_{emi}^{cont}(i)/N_i^{cont}$.

Raies atomiques

Le traitement des raies atomiques diffère des deux autres cas car on utilise une modélisation raie par raie plutôt qu'un modèle de bandes. Les raisons de ce choix sont discutées

dans le chapitre III. Cependant, l'approche générale, qui consiste, pour les raies atomiques, à déterminer la raie émettante puis le nombre d'onde qui caractérise le transport de la puissance par un rayon, est conservée par analogie au tirage du système puis de la bande spectrale pour les contributions traitées en modèles de bandes. On expose ici les procédures mises en œuvre pour choisir la raie et le nombre d'onde, et traiter l'absorption.

- Le tirage de la raie atomique émettante indicée ir est effectué selon la pdf de l'émission des raies de N , O , N^+ et O^+ . Ceci revient à inverser la pdf cumulée donnée par la relation :

$$R_{ir}^n = \frac{\sum_{k=1}^{ir} \Upsilon^k(i)}{\sum_{k=1}^{at} \Upsilon^k(i)}, \quad (IV.67)$$

où R_{ir}^n est un nombre uniformément généré dans l'intervalle $[0,1]$.

- Lors du tirage du nombre d'onde, on souhaite conserver statistiquement la densité spectrale de l'émission de la raie qui s'écrit :

$$4\pi V_i \eta_{\sigma}^{ir} = P_{emi}^{ir}(i) f_i^{V,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) \quad (IV.68)$$

où $f_i^{V,ir}$ est le profil Voigt, de la raie ir centrée en $\sigma_{c_{ir}}$, calculé pour les conditions thermo-chimiques de la cellule i . Ce profil vérifie :

$$\int_0^{+\infty} f_i^{V,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) d\sigma = 1. \quad (IV.69)$$

Ce profil normalisé peut donc être utilisé comme densité de probabilité pour sélectionner le nombre d'onde σ_t en inversant la pdf cumulée suivante :

$$R_{\sigma_t}^n = \int_0^{\sigma_t} f_i^{V,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) d\sigma, \quad (IV.70)$$

où $R_{\sigma_t}^n$ est un nombre généré aléatoirement dans l'intervalle $[0,1]$. Cependant l'inversion de la relation IV.70 n'est pas triviale compte tenu de la formule non analytique du profil Voigt (cf. équation II.25). Pour pallier cette difficulté, nous avons choisi de tirer le nombre d'onde suivant un profil Lorentz plus facile à inverser plutôt qu'un profil Voigt. Ce tirage entraîne cependant une modification de la représentation spectrale réelle de la raie (autrement dit on ne va pas répartir le nombre de tirs pour la raie en fonction de son émission spectrale réelle). Pour tenir compte de cette modification, il faut mettre en place une procédure de correction sur la puissance à affecter à chaque tir. Sachant que la puissance d'une raie s'exprime comme :

$$P_{emi}^{ir}(i) = 4\pi V_i \int_0^{+\infty} \Upsilon^{ir}(i) f_i^{V,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) d\sigma, \quad (IV.71)$$

en introduisant un profil Lorentz $f_i^{L,ir}$ dans cette expression, il vient :

$$P_{emi}^{ir}(i) = 4\pi V_i \int_0^{+\infty} \Upsilon^{ir}(i) \frac{f_i^{V,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}})}{f_i^{L,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}})} f_i^{L,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) d\sigma, \quad (IV.72)$$

où le profil Lorentz $f_i^{L,ir}$ est aussi caractérisé par

$$\int_0^{+\infty} f_i^{L,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) d\sigma = 1. \quad (IV.73)$$

Le tirage du nombre d'onde se faisant en inversant la pdf cumulée sur le profil Lorentz :

$$R_{\sigma_t}^n = \int_0^{\sigma_t} f_i^{L,ir}(\sigma - \sigma_{c_{ir}}) d\sigma, \quad (IV.74)$$

la puissance $P_{emi}^{ir}(i)$ est alors approchée par la relation statistique suivante :

$$P_{emi}^{ir}(i) \approx \frac{4\pi V_i}{N_{i,ir}^{at}} \sum_{n=1}^{N_{i,ir}^{at}} \Upsilon^{ir}(i) \frac{f_i^{V,ir}(\sigma_{tn} - \sigma_{c_{ir}})}{f_i^{L,ir}(\sigma_{tn} - \sigma_{c_{ir}})}, \quad (IV.75)$$

où $N_{i,ir}^{at}$ désigne le nombre de tirs réalisés pour la raie ir (toujours pour la cellule i) et σ_{tn} est le nombre d'onde tiré par inversion de la relation IV.74. Or pour un nombre de tirs suffisant, le nombre de tirs $N_{i,ir}^{at}$ s'approche de sa valeur déterministe donnée par :

$$N_{i,ir}^{at} = \frac{4\pi V_i \Upsilon^{ir}(i)}{P_{emi}^{at}(i)} N_i^{at}. \quad (IV.76)$$

En insérant cette relation dans l'expression IV.75, on obtient :

$$P_{emi}^{ir}(i) \approx \sum_{n=1}^{N_{i,ir}^{at}} \frac{P_{emi}^{at}(i)}{N_i^{at}} \frac{f_i^{V,ir}(\sigma_{tn} - \sigma_{c_{ir}})}{f_i^{L,ir}(\sigma_{tn} - \sigma_{c_{ir}})}. \quad (IV.77)$$

On remarque que dans cette expression le rapport $P_{emi}^{at}(i)/N_i^{at}$ désigne la puissance initialement affectée à chaque tir pour les processus atomiques lié-lié de la cellule i . On constate donc que pour conserver la représentation spectrale des raies lorsque l'on tire le nombre d'onde suivant un profil différent du profil réel de la raie, il faut corriger la puissance du tir émis (*i.e.* $P_{emi}^{at}(i)/N_i^{at}$) par le rapport des poids (profils) tel que :

$$\tilde{P}_{emi}^{ir}(i, n) = \frac{f_i^{V,ir}(\sigma_{tn} - \sigma_{c_{ir}})}{f_i^{L,ir}(\sigma_{tn} - \sigma_{c_{ir}})} \frac{P_{emi}^{at}(i)}{N_i^{at}}, \quad (IV.78)$$

où $\tilde{P}_{emi}^{ir}(n, i)$ est la puissance corrigée qui est alors affectée au $n^{\text{ième}}$ tir relatif à la raie atomique ir émettant depuis la cellule i .

- Concernant l'absorption de la puissance transportée par le rayon dans chaque cellule traversée, compte tenu de la relation IV.43, elle est traitée quasiment de la même manière que les systèmes moléculaires optiquement minces ou les continua. La puissance absorbée dans une cellule provenant d'un rayon émis par des raies atomiques est donnée par la relation IV.65 en remplaçant la puissance $P_{emi}^{mol}(i)/N_i^{mol}$ par $\tilde{P}_{emi}^{ir}(i, n)$. Pour le calcul de la transmittivité monochromatiques des raies atomiques, on utilise également la relation IV.66 (partie droite) avec $\sigma^* = \sigma_{tn}$.

Le calcul de la transmittivité des raies atomiques nécessite dans tous les cas le calcul de coefficients d'absorption monochromatiques relatifs aux raies atomiques à un certain nombre d'onde σ^* qui est suivant le cas : (i) tiré uniformément sur une bande spectrale (absorption du rayonnement des systèmes moléculaires et des continua par les raies atomiques) ou (ii) tiré suivant un profil de raie (absorption des raies atomiques par les raies atomiques). Pour chaque cellule i , ce coefficient est calculé avec la relation :

$$\kappa_{\sigma^*, i}^{at} = \sum_j^{\text{certaines raies at.}} \Upsilon_i^j f_i^{V,j}(\sigma^* - \sigma_{c_j}), \quad (IV.79)$$

dans laquelle la somme sur les raies atomiques concerne :

- dans le cas (i) les raies dont les positions sont contenues uniquement dans la bande spectrale ib traitée. En effet, des calculs tenant compte des raies atomiques contenues dans la bande spectrale ib mais aussi dans les bandes adjacentes ont été réalisés. La comparaison des résultats avec ceux réalisés avec seulement les raies de la bande ib n'a pas montré d'écarts significatifs. À titre indicatif, dans nos applications, l'absorption par les raies atomiques contribue à peu près à 5-10 % de l'absorption totale du rayonnement émis par les systèmes traités en bande.
- dans le cas (ii) les raies dont les positions sont contenues dans l'intervalle $[\sigma_{c_{ir}} - r_\sigma, \sigma_{c_{ir}} + r_\sigma]$ où r_σ est une valeur fixée par l'utilisateur (par défaut $r_\sigma = 100 \text{ cm}^{-1}$). On notera ici qu'il serait plus judicieux d'utiliser l'intervalle $[\sigma^* - r_\sigma, \sigma^* + r_\sigma]$ pour déterminer les raies (voisines) considérées pour calculer l'absorption. Cependant, σ^* étant un nombre issu d'un tirage aléatoire, ceci nécessiterait de déterminer les raies voisines pour chaque nombre d'onde tiré ce qui est coûteux en temps de calcul alors que l'utilisation de l'intervalle $[\sigma_{c_{ir}} - r_\sigma, \sigma_{c_{ir}} + r_\sigma]$ s'appuie simplement sur une pré-tabulation des raies contenues dans le voisinage de chaque raie j , le voisinage étant défini par $\sigma_{c_j} \pm r_\sigma$.

Frontières

Comme expliqué au début du paragraphe IV.4.2.2, tous les rayons émis par un élément frontière i ont une puissance égale à $P_{emi}^{lim}(i)/N_i^{lim}$ avec $P_{emi}^{lim}(i) = \pi S_i \sum_{\Delta\sigma} \overline{\epsilon(i)}^{\Delta\sigma} L_{\sigma_{c_b}}^\circ(T_i) \Delta\sigma$. Pour traiter l'absorption de cette puissance transportée par un rayon, on choisit de même que pour les systèmes traités en modèle de bandes, une bande spectrale ib (qui caractérisera le rayon n) au prorata de l'émission de l'élément de surface i avec la pdf cumulée :

$$R_{ib}^n = \frac{\sum_{b=1}^{ib} \overline{\epsilon(i)}^{\Delta\sigma} L_{\sigma_{c_b}}^\circ(T_i)}{\sum_{b=1}^{band.} \overline{\epsilon(i)}^{\Delta\sigma} L_{\sigma_{c_b}}^\circ(T_i)}, \quad (\text{IV.80})$$

où σ_{c_b} est le centre de la bande spectrale indicée b . Les bandes spectrales considérées sont les bandes du MSBE et du box model *i.e.* des bandes de 1000 cm^{-1} entre 1000 et 200000 cm^{-1} . L'absorption par les éléments de volume est traitée suivant la même procédure que pour les systèmes moléculaires optiquement minces.

IV.4.3 Étapes et procédures numériques d'un calcul type

Un calcul type est constitué d'une étape d'initialisation (répartition spatiale des tirs) et d'une étape de calcul de transfert (traitement des rayons). Dans ce paragraphe, on décrit d'un point de vue numérique, les procédures de calculs réalisés lors de ces deux étapes en spécifiant les données calculées, utilisées, ainsi que celles stockées, informations indispensables pour évaluer la taille mémoire nécessaire pour effectuer un calcul.

La procédure de répartition des tirs s'effectue après la lecture du maillage, des champs aérothermochimiques (températures et densités) ainsi que des paramètres des modèles de

¹Des tests ont été effectués par la suite pour évaluer la sensibilité de ce paramètre sur des calculs de transferts - cf. IV.5.4.2

bandes (MSBE et box model). Toutes ces données sont stockées. À titre indicatif, les paramètres tabulés des modèles de bandes représentent 122 Mo. La répartition des tirs nécessite de calculer les expressions de $P_{emi}^{proc}(i)$ (puissance émise par le processus *proc* dans l'élément géométrique *i*) données dans le paragraphe IV.4.2.1 pour tous les éléments *i* pour déterminer et stocker N_i^{proc} (nombre de tirs pour le processus *proc* pour l'élément *i*) et $P_{emi}^{proc}(i)/N_i^{proc}$ (la puissance transportée par chaque rayon émis par l'élément *i* pour le processus *proc*). Les calculs réalisés dépendent du type de processus *proc* (*mol*, *cont*, *at* ou *lim*) et sont décrits ci-dessous (hormis pour les frontières *lim* pour lesquelles les calculs sont triviaux) :

- Systèmes moléculaires : le calcul de $P_{emi}^{mol}(i)$ nécessite d'interpoler pour chaque système moléculaire et pour chaque bande spectrale les coefficients d'émission réduits (cf. expression III.139) qui font partie des paramètres des modèles de bandes. Les coefficients interpolés à deux températures sont éventuellement corrigés avec un facteur de correction (pour l'émission) $C_{emi}^j(i)$ (rapport de populations électroniques $n'_e/\hat{n}'_e$ - cf. expression III.129) pour tenir compte d'une température du mode électronique des particules différente de celle de vibration. Les facteurs de correction ($C_{emi}^j(i)$) sont stockés sur tout le maillage (cellule *i*) et pour tous les systèmes moléculaires (indice *j*) car ils sont susceptibles d'être utilisés pour construire les pdf des émissions lors du tirage des systèmes et des bandes spectrales. En vue de faire du transfert, des facteurs de correction ($C_{abs}^j(i)$) pour corriger les coefficients d'absorption sont par la même occasion calculés et stockés (cf. expressions III.135 et III.136).
- Continua : la procédure est quasiment identique au cas précédent pour calculer $P_{emi}^{cont}(i)$. La seule différence est qu'il n'est pas nécessaire de calculer les facteurs de correction $C_{emi}^j(i)$ et $C_{abs}^j(i)$, mais seulement les facteurs de déséquilibre $\chi_j^{neq}(i)$, pour les continua dépendant du déséquilibre chimique (indice *j*). Ces facteurs dépendent, suivant le cas, de fonctions de partition atomiques ou moléculaires. Ces fonctions de partition sont calculées par interpolation de fonctions de partition pré-tabulées à deux températures pour les diatomiques, et à une température et un rayon Debye pour les atomes. Les valeurs obtenues de $\chi_j^{neq}(i)$ sont stockées sur tout le maillage pour l'ensemble des continua dépendant du déséquilibre chimique.
- Raies atomiques : pour calculer $P_{emi}^{at}(i)$, nous calculons et stockons toutes les intensités en émission des raies sur tout le maillage. Ces calculs font appel à des données spectroscopiques issues de la base HTGR[89] et des fonctions de partition. Les intensités des raies en absorption sont par la même occasion calculées et stockées (données utiles pour le transfert).

Ensuite, pour traiter les rayons, on affecte à chacun d'eux un système (ou une raie) et une bande spectrale (ou un nombre d'onde) comme indiqué dans le paragraphe précédent. Ces affectations sont réalisées à partir de tirages aléatoires uniformes sur les pdf cumulées (des émissions des différents processus) qui sont calculées et stockées pour une cellule émettrice donnée. Ces pdf sont construites avec les mêmes données que celles utilisées précédemment pour la répartition des tirs. Le cas particulier du choix d'un nombre d'onde pour les raies atomiques requiert en plus des calculs de largeurs et de profils. Les données relatives aux calculs des largeurs collisionnelles sont issues de la base HTGR [89] et sont stockées pour toutes les raies pour la condition thermochimique de la cellule émettrice.

On détermine ensuite les transmittivités de tous les systèmes susceptibles d'absorber une

fraction de la puissance du rayon (ceci dépend de la bande spectrale ou du nombre d'onde affecté au rayon). Pour les systèmes traités en box model (continua et systèmes moléculaires optiquement minces), ceci revient à déterminer par interpolation les coefficients d'absorption réduits (paramètres préalablement stockés pendant la phase de lecture initiale), pour chaque cellule traversée, avec une éventuelle correction avec les facteurs $C_{abs}^j(i)$ pour les systèmes moléculaires optiquement minces ou les facteurs $\chi_j^{neq}(i)$ pour les continua dépendant du déséquilibre. Pour les systèmes traités en MSBE, la procédure est la même que pour les systèmes moléculaires minces avec en plus l'interpolation à deux températures des paramètres de chevauchement de raies (β_D, β_L) pour tenir compte des corrélations spectrales. Pour les raies atomiques, leur transmittivité est déterminée à partir de calculs de spectre réalisés pour chaque cellule traversée et pour un seul nombre d'onde. Ces calculs font intervenir des calculs systématiques de largeurs et de profils spectraux.

Compte tenu de toutes ces procédures, la place mémoire nécessaire à un calcul peut être évaluée de manière approchée avec la relation suivante qui dépend du nombre de cellules du maillage (n_{cell}) :

$$\text{Place mémoire} = (200 + 5.10^{-2}n_{cell}) \text{ Mo.} \quad (\text{IV.81})$$

Pour un nombre élevé de cellules, la place mémoire devient rapidement prohibitive (5.2 Go par exemple pour un maillage de 10^5 cellules). Ceci est en grande partie dû au stockage des intensités des raies atomiques sur tout le maillage. Sans ce stockage, la place serait approximativement de $(200 + 5.10^{-3}n_{cell})$ Mo, soit 700 Mo pour 10^5 cellules.

IV.5 Validation sur une configuration plans tangents

Pour valider l'implémentation dans le code ASTRE de la modélisation hybride des propriétés radiatives ainsi que les différentes procédures de traitement statistique des processus radiatifs, des calculs de puissances et de flux radiatifs ont été réalisés dans une configuration plans tangents et comparés à des résultats obtenus avec la méthode de lancer de rayons en utilisant également la modélisation hybride. La géométrie de la configuration utilisée est schématisée sur la figure IV.3. La paroi et l'infini amont sont considérés comme des murs plans infinis parallèles séparés par des couches homogènes (M_i, M_{i-1}) de plasmas qui sont contenues entre des plans parallèles à la paroi. Cette configuration a été réalisée à partir de maillages et de champs aérothermochimiques correspondant aux données et résultats de calculs du cas d'épreuve FIRE II avec le code CelHyo2D (décrit dans l'annexe B) le long de la ligne d'arrêt (cf. section II.3.1). On souligne que ces calculs CFD ont été réalisés par Soubrié [10].

IV.5.1 Champs aérothermochimiques

Dans le cadre de la thèse de Soubrié [10], l'écoulement autour de la sonde FIRE II a été simulé en 2D axisymétrique avec le code CelHyo2D pour plusieurs points de trajectoire. Ce code est brièvement décrit dans l'annexe B. On reporte brièvement ici les résultats, utilisés par la suite, obtenus pour trois points de trajectoire dont les conditions sont indiquées dans le tableau IV.1.

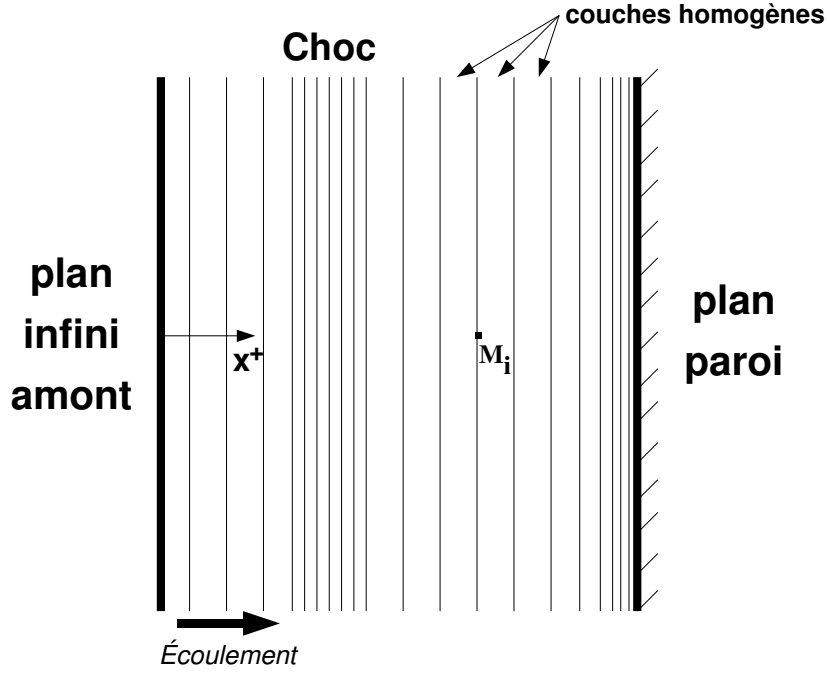


FIG. IV.3: Géométrie de la configuration plans tangents.

TAB. IV.1: Conditions de vol de la sonde FIRE II pour trois points de trajectoire.

Temps [s]	1634	1643	1648.5
Altitude [km]	76.42	53.04	41.23
Vitesse [km/s]	11.36	10.48	7.96
Densité [kg/m ³]	3.72E-5	7.80E-4	3.40E-3
T_{∞} [K]	195	276	260
T_{paroi} [K]	615	640	540

TAB. IV.2: Données des maillages pour le cas d'épreuve FIRE II issus de Soubrié [10].

Point de vol [s]	Rayon de nez [m]	Nombre de cellules	Taille de 1 ^{ère} maille [m] (direction longitudinale)
1634	0.935	35 × 73	0.025
1643	0.805	33 × 103	0.040
1648.5	0.720	35 × 87	0.025

Les calculs ont été réalisés avec une approche multi-température pour décrire le déséquilibre thermique de l'écoulement. Pour traiter le déséquilibre chimique, le modèle cinétique utilisé s'appuie sur le schéma réactionnel de Park [68] et tous les calculs ont été réalisés avec une condition de non catalycité à la paroi.

Concernant d'autres aspects de la modélisation physico-chimique mise en œuvre, ces calculs reposent sur des modèles relativement simplifiés dans la mesure où : (i) les termes de conduction thermique et de diffusion reposent sur l'hypothèse de nombre de Prandtl et de Lewis constants et égaux respectivement à 0.72 et 1.2, (ii) seuls les termes d'échanges V-T et

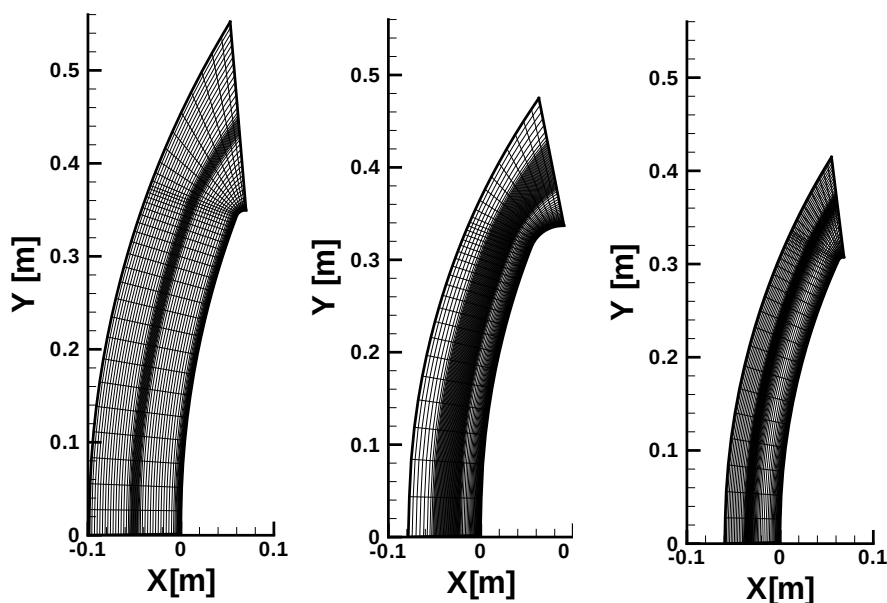
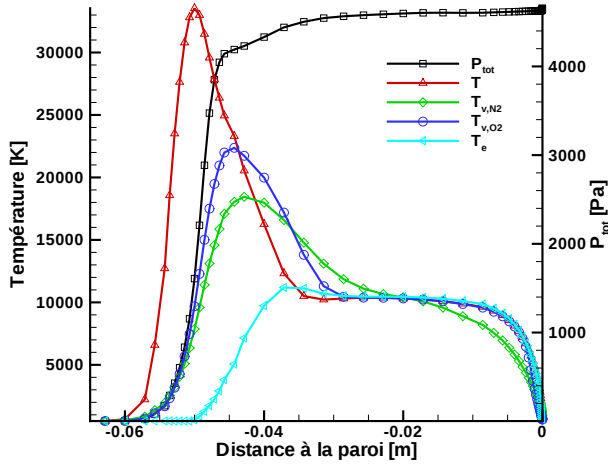


FIG. IV.4: Maillages correspondant aux trois boucliers thermiques de la sonde FIRE II [10].

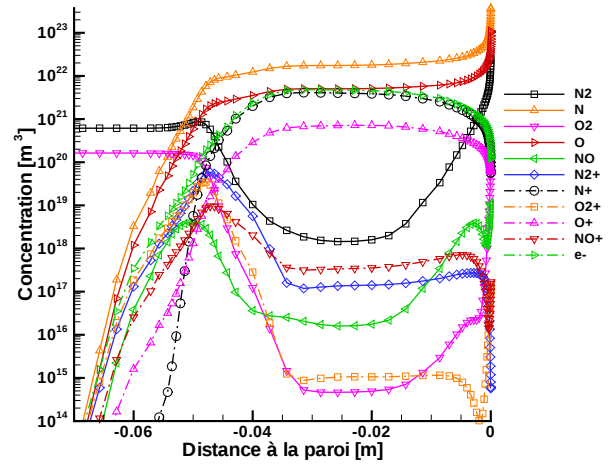
e-T sont pris en compte, et (iii) le couplage chimie/vibration n'a pas été pris en compte, ce qui revient à considérer que la température d'activation des réactions de dissociation/recombinaison est supposée égale à la température de translation des particules lourdes et que l'énergie de vibration perdue ou gagnée lors des dissociations/recombinaisons est égale à l'énergie de vibration moyenne de la molécule. Cette modélisation simplifiée des processus physico-chimiques peut être améliorée avec l'utilisation de certains modèles de relaxation et de couplage chimie/vibration implémentés dans le code CelHyo2D (cf. annexe B). Ceci dépasse le cadre du travail rapporté dans cette section qui n'a pour but que de valider l'implémentation du modèle hybride de rayonnement dans le code ASTRE. Les champs aérothermochimiques (températures et densités d'espèces) sont des données d'entrée du code ASTRE.

Les calculs avec CelHyo2D ont été réalisés avec trois maillages différents, puisque chaque point de trajectoire représente une configuration géométrique différente de la sonde FIRE II (le premier point avant l'éjection du premier bouclier, le deuxième après l'éjection du premier et le troisième après l'éjection du deuxième bouclier). La figure IV.4 montre les trois maillages utilisés. Les caractéristiques de ces maillages, qui ont été raffinés au niveau du choc, sont reportées dans le tableau IV.2. Pour la configuration plans tangents étudiée ici, on retiendra simplement la discrétisation normale à la paroi sur la ligne d'arrêt.

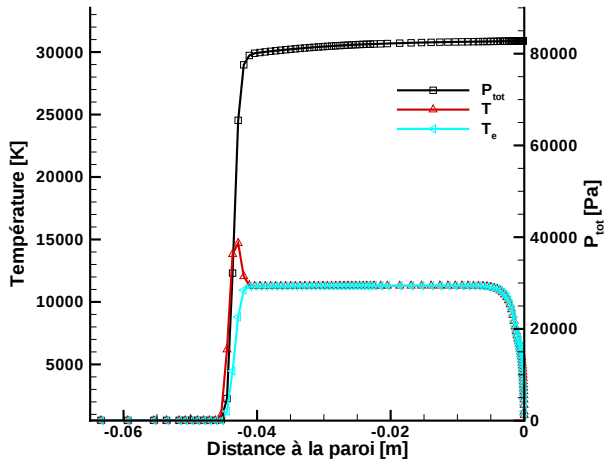
On représente sur les figures IV.5, l'évolution des champs aérothermochimiques (températures et concentrations) le long de la ligne d'arrêt pour les points de trajectoire 1634 s, 1643 s et 1648.5 s. La modélisation multi-température est différente suivant le point de vol simulé. Pour le cas 1634 s, cas fortement hors d'équilibre, la modélisation multi-température la plus complète disponible dans le code a été utilisée ($T, T_{v,N_2}, T_{v,O_2}, T_e$). Pour le deuxième point, proche de l'équilibre, un modèle à deux températures (T, T_e) a été mis en œuvre en considérant la vibration à l'équilibre avec la translation des espèces lourdes. Et enfin pour le dernier point de trajectoire, quasiment à l'équilibre, un modèle à une seule température



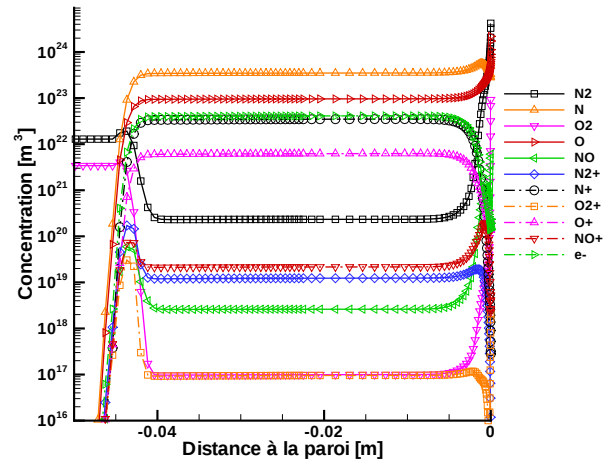
(a) Point de trajectoire 1634 s



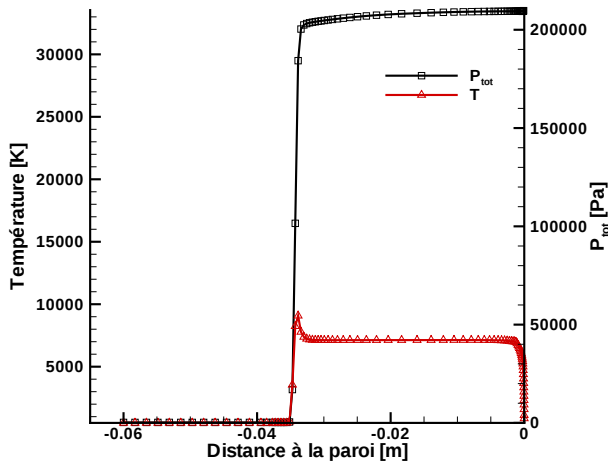
(b) Point de trajectoire 1634 s



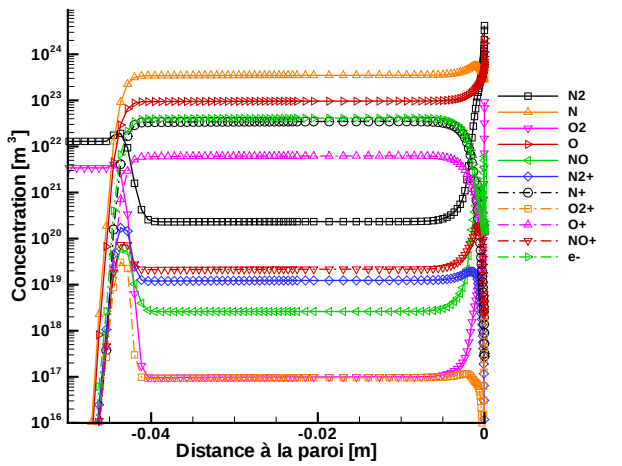
(c) Point de trajectoire 1643 s



(d) Point de trajectoire 1643 s



(e) Point de trajectoire 1648.5 s



(f) Point de trajectoire 1648.5 s

FIG. IV.5: Profils des températures, de pression et des concentrations le long de la ligne d'arrêt obtenus avec le code CelHyo2D pour trois points de trajectoire de FIRE II [10].

a été utilisé. Une comparaison globale de ces champs avec les champs fournis par l'ESA générés avec le code TINA [57, 58] pour le même cas d'épreuve (cf. chapitre II) montre des évolutions similaires (niveau de pression, températures, distance choc/paroi...).

Lors de l'utilisation de ces champs pour déterminer les propriétés radiatives, on considérera des distributions de Boltzmann pour les modes rotationnels, vibrationnels et électroniques respectivement aux températures T , T_v et T_e .

IV.5.2 La méthode de lancer de rayons

La méthode de lancer de rayons a été mise en œuvre pour la configuration plans tangents décrite par la figure IV.3. Cette méthode consiste à discrétiser l'espace angulaire autour de chaque point M_i (pour lequel on souhaite avoir le flux radiatif) et de résoudre l'ETR pour chaque chemin optique considéré, du point frontière du chemin jusqu'au point M_i . Le flux radiatif dans la direction $\mathbf{x}^+$ sera indexé par un « + » (cf. figure IV.3) et par un « - » dans le cas contraire.

Le flux radiatif dans la direction $\mathbf{x}^+$ au point M_i est défini par :

$$q_+^R(M_i) = \int_0^{+\infty} \int_{\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}^+ > 0} L_\sigma(M_i, \mathbf{u}) |\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}^+| d\Omega d\sigma, \quad (\text{IV.82})$$

où $L_\sigma(M_i, \mathbf{u})$ désigne la luminance monochromatique au point M_i suivant la direction du vecteur unitaire $\mathbf{u}$. Ce flux radiatif partiel, $q_+^R(M_i)$, correspondant aux directions de propagation du rayonnement satisfaisant $\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}^+ > 0$ provient de l'émission de la couche de plasma située à gauche du point M_i sur la figure IV.3. De la même manière, $q_-^R(M_i)$ est défini avec la même expression que IV.82 en considérant les directions satisfaisant $\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}^+ < 0$ et provient de l'émission de la couche de plasma située à droite du point M_i .

Compte tenu de la configuration plans tangents étudiée, la relation IV.82 peut s'écrire plus simplement comme :

$$q_+^R(M_i) = \int_0^{+\infty} 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} L_\sigma(M_i, \theta) \cos\theta \sin\theta d\theta d\sigma, \quad (\text{IV.83})$$

où l'intégration angulaire se résume à l'intégration sur l'angle zénithal θ entre $\mathbf{u}$ et $\mathbf{x}^+$ compris entre 0 et $\pi/2$. Dans une approche lancer de rayons, cette relation est alors discrétisée et peut s'écrire comme suit :

$$q_+^R(M_i) = \int_0^{+\infty} \pi \sum_{n=1}^{N_r} L_\sigma(M_i, \theta'_n) [\sin^2\theta_n - \sin^2\theta_{n-1}] d\sigma, \quad (\text{IV.84})$$

où N_r est le nombre de rayon simulés, θ_n sont les angles correspondant à la discrétisation et sont définis par

$$\theta_n = n \frac{\pi}{2N_r}, \quad n \in [0; N_r], \quad (\text{IV.85})$$

et θ'_n sont les angles définissant la direction des rayons et sont reliés aux angles θ_n suivant la relation :

$$\theta'_n = \frac{\theta_n + \theta_{n-1}}{2}, \quad n \in [1; N_r]. \quad (\text{IV.86})$$

La détermination de la luminance $L_\sigma(M_i, \theta'_n)$ dans l'expression IV.84 est effectuée en intégrant l'ETR le long du rayon n incident en M_i , selon $\mathbf{u}$ (repéré par l'angle θ'_n), discrétisé en éléments homogènes d'épaisseur :

$$\Delta \tilde{l}_j = \frac{\Delta l_j}{\cos \theta'_n}, \quad (\text{IV.87})$$

où Δl_j est la taille de chaque cellule j le long de la ligne d'arrêt, j variant de 1 à $i-1$ (resp. $n_{point} - 1$ à i)² pour le calcul de $q_+^R(M_i)$ (resp. $q_-^R(M_i)$). Nous avons alors mis en œuvre les relations établies dans la section III.6.1 (donnant les expressions discrétisées de luminance adaptées à la modélisation hybride) en considérant que la paroi est au point M_i et que les cellules ont des épaisseurs données par la relation IV.87.

Dans les calculs, pour éviter d'avoir des cellules optiquement épaisses (cf. section III.6.2), un découpage systématique des cellules par 5 a été effectué ce qui assure que l'effet de l'épaisseur optique est faible. De plus, le nombre de rayons lancés pour chaque point M_i est pris égal à 40 (20 pour le calcul de $q_+^R(M_i)$ et 20 pour le calcul $q_-^R(M_i)$), valeur suffisante pour obtenir des résultats convergés.

IV.5.3 Mise en œuvre du code ASTRE

Le code ASTRE étant un code 3D, nous avons reproduit la configuration plans tangents à l'aide d'une boîte parallélépipédique ($0.1 \times 0.2 \times 0.1$ m, dans un repère $(0, x, y, z)$) en reproduisant la discrétisation de la ligne d'arrêt du point de trajectoire 1634 s suivant la direction x . La boîte est alors constituée de 73 cellules parallélépipédiques dans la direction x et d'une seule dans les directions y et z . Par rapport à la figure IV.3, la paroi et l'infini amont sont représentés respectivement par les plans $x = 0$ et $x = 0.1$ m. Pour simuler le fait que la paroi et l'infini sont des murs plans infinis, des conditions de symétrie sont appliquées sur les quatre autres faces du parallélépipède :

$$\text{plan } x = 0 : \quad \text{corps noir à la température de paroi } T_{paroi} \quad (\text{IV.88})$$

$$\text{plan } x = 0.1 : \quad \text{corps noir à la température } T_\infty \quad (\text{IV.89})$$

$$\text{plan } y = 0 : \quad \text{Miroir (réflexions spéculaires)} \quad (\text{IV.90})$$

$$\text{plan } y = 0.2 : \quad \text{Miroir (réflexions spéculaires)} \quad (\text{IV.91})$$

$$\text{plan } z = 0 : \quad \text{Miroir (réflexions spéculaires)} \quad (\text{IV.92})$$

$$\text{plan } z = 0.1 : \quad \text{Miroir (réflexions spéculaires)} \quad (\text{IV.93})$$

Le code ASTRE a été mis en œuvre avec la méthodologie numérique développée dans la section IV.4.2. Dans tous les calculs réalisés avec ASTRE dont les résultats sont présentés dans ce chapitre, le critère d'extinction des rayons a été fixé à 0.1 % de la puissance transportée initialement par le rayon. Divers tests ont montré que cette valeur permet d'obtenir des résultats avec un bon compromis précision/temps CPU.

² n_{point} étant le nombre de points de discrétisation de la ligne d'arrêt.

IV.5.4 Comparaison méthode de lancer de rayons/code ASTRE

La validation de l'implémentation de la modélisation hybride des propriétés radiatives dans le code ASTRE par rapport à une méthode de lancer de rayons s'est faite en plusieurs étapes : (i) pour les systèmes moléculaires et les continua, (ii) pour les raies atomiques, et enfin (iii) une validation globale pour toutes les contributions.

IV.5.4.1 Systèmes moléculaires et continua

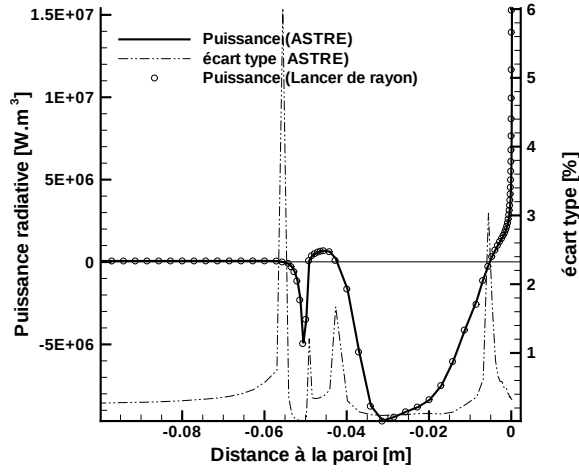
Nous avons comparé les champs de puissance et les flux au mur plan correspondant à la paroi de l'engin, obtenus avec le code ASTRE à ceux obtenus avec la méthode de lancer de rayons. Les champs aérothermochimiques utilisés sont ceux correspondant au temps de vol 1634 s. On rappelle que pour ce point de trajectoire, la discrétisation entre les deux murs plans est de 73 cellules. Les comparaisons ont été faites système par système (i.e. émission et absorption d'un seul système) et ont montré à chaque fois de très bons accords. Compte tenu du nombre important de ces systèmes (19 systèmes électroniques moléculaires et 14 continua), nous ne présentons pas ces résultats mais des résultats plus globaux concernant des groupes de contributions qui sont traitées de manière similaire.

La figure IV.6 montre à ce titre des comparaisons de champs de puissance issus de différents calculs obtenus avec le code ASTRE et la méthode de lancer de rayons pour différents types de contributions :

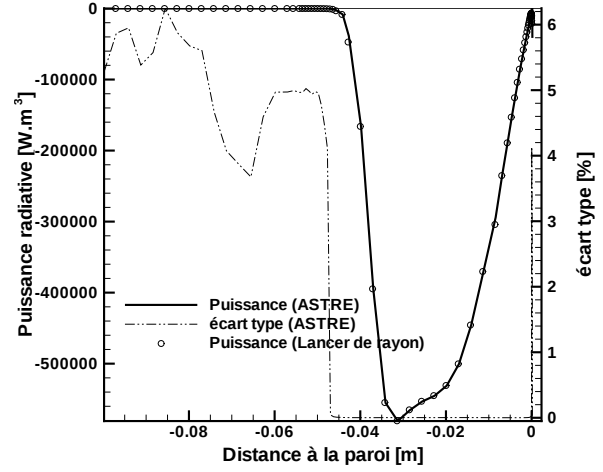
- les continua dépendant du déséquilibre dans notre modélisation (photoionisation et photodissociation - figure IV.6(a)),
- les continua non dépendant du déséquilibre (bremsstrahlung et photodétachement - figure IV.6(b)),
- les systèmes moléculaires traités en box model (systèmes électroniques moléculaires de l'infrarouge et du visible - figure IV.6(c)),
- les systèmes électroniques moléculaires traités en MSBE, dont les états hauts des transitions sont non prédissociés ($\text{NO}(\gamma, \gamma', \beta, \beta')$ - figure IV.6(d)),
- les systèmes électroniques moléculaires traités en MSBE, dont les états hauts des transitions sont prédissociés (N_2 (VUV), NO (δ, ϵ) et O_2 (SR) - figure IV.6(e)),
- l'ensemble des continua et des systèmes moléculaires (figure IV.6(f)).

L'absorption prise en compte est seulement celle de contribution étudiée. Sur ces figures, compte tenu de l'expression IV.39 de la puissance, lorsque les puissances sont négatives, ceci indique que la cellule émet plus qu'elle n'absorbe. On observe une très bonne comparaison entre la méthode de référence (lancer de rayons) et les calculs ASTRE.

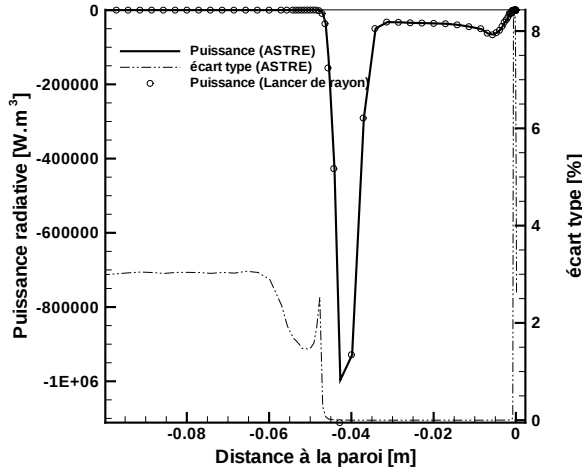
Les écarts types pour chaque calcul ASTRE sont également représentés. Ils sont obtenus à partir d'une répartition sur 16 processeurs du nombre total de tirs. Hormis pour le dernier cas réalisé avec un nombre total de tirs égal à $8 \cdot 10^5$ tirs ($4 \cdot 10^5$ pour les continua et $4 \cdot 10^5$ pour les systèmes moléculaires), tous les calculs ont été réalisés avec $4 \cdot 10^5$ tirs (soit 25000 tirs sur chaque processeur). On peut noter que dans chaque cas les comparaisons sont très satisfaisantes avec des écarts types (en relatif) très faibles ce qui indique que les calculs avec le code ASTRE ont atteint un bon niveau de convergence. On observe néanmoins dans certaines zones, des écarts types élevés. Ils correspondent à des points où la puissance radiative est nulle ou quasi-nulle. En effet, l'obtention de la valeur 0 pour la puissance,



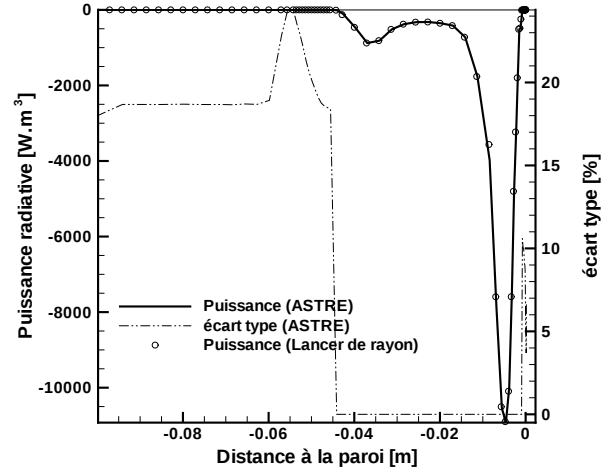
(a) Continua dépendant du déséquilibre.



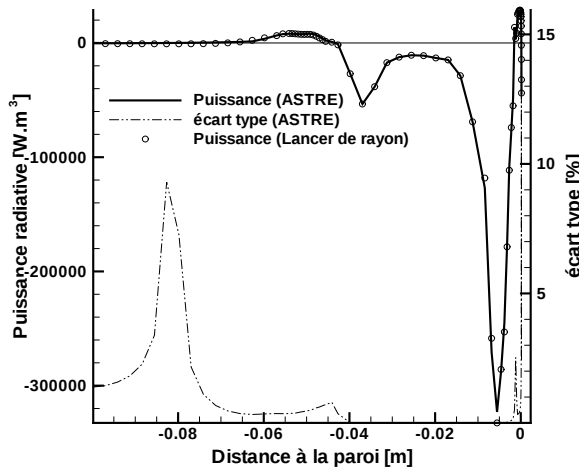
(b) Continua non dépendant du déséquilibre.



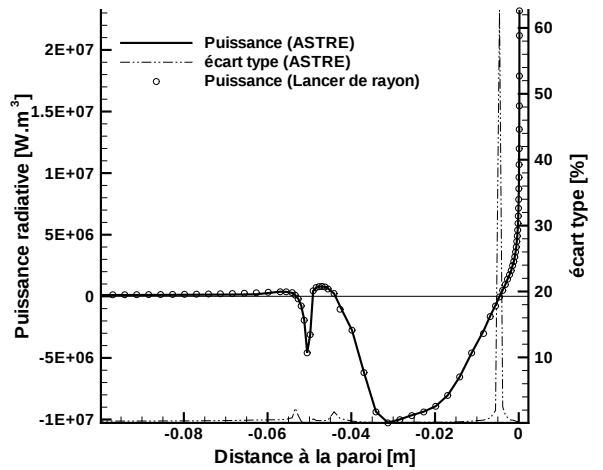
(c) Syst. mol. traités en box model.



(d) Syst. mol. (non prédissociés) traités en MSBE.



(e) Syst. mol. (prédissociés) traités en MSBE.



(f) Continua et systèmes moléculaires.

FIG. IV.6: Évolution de la puissance due aux continua et aux systèmes moléculaires entre la paroi et l'infini amont. Résultats obtenus avec le code ASTRE et la méthode de lancer de rayons.

TAB. IV.3: Flux radiatifs à la paroi.
 $q^R [W.m^{-2}]$

	Lancer de rayons	ASTRE (Écart type en %)	Écart relatif
continua dépendant du déséq. chim.	1.066×10^5	$1.063 \times 10^5 (\pm 0.146\%)$	0.2 %
continua non dépendant du déséq. chim.	8.318×10^3	$8.340 \times 10^3 (\pm 0.183\%)$	-0.259 %
syst. mol. opt. mince	4.040×10^3	$4.051 \times 10^3 (\pm 0.183\%)$	-0.282 %
syst. mol. opt. épais (non prédissocié)	3.806×10^1	$3.816 \times 10^1 (\pm 0.184\%)$	-0.279 %
syst. mol. opt. épais (prédissocié)	1.192×10^3	$1.190 \times 10^3 (\pm 0.10\%)$	-0.164 %
continua et syst. mol.	1.160×10^5	$1.156 \times 10^5 (\pm 0.174\%)$	0.335 %

issue d'une différence entre puissance émise et puissance absorbée non nulles, est difficile à obtenir avec une méthode Monte Carlo. Cependant, ces erreurs, intrinsèques à cette approche statistique, sont sans importance vu les très faibles valeurs de la puissance en ces points.

La comparaison des flux radiatifs à la paroi est reportée dans le tableau IV.3, pour les cas de figure énoncés précédemment. Les écarts types pour les calculs ASTRE sont tous compris entre 0.1 et 0.2 %. Par rapport à ces valeurs, les écarts types obtenus pour les puissances des contributions optiquement minces sont bien inférieurs. C'est le cas par exemple des systèmes moléculaires traités en box model (figure IV.6(c)). Ceci s'explique par le fait que l'approche de Monte Carlo dans le code ASTRE conserve l'émission des cellules et donc dans ce cas la précision des calculs pour des contributions optiquement minces est naturellement très bonne pour très peu de tirs. Par contre pour les flux, il faut avoir en terme de discrétisation spatiale un nombre de tirs suffisant pour que le flux arrivant à la paroi soit représentatif de l'émission du milieu.

Concernant la comparaison avec les résultats obtenus avec la méthode de lancer de rayons, les écarts sont très faibles, de l'ordre de 0.2 - 0.3 % mais restent néanmoins légèrement supérieurs aux écarts types des calculs ASTRE compris entre 0.1 et 0.2 %. Compte tenu de ces très faibles écarts et de la valeur du critère d'extinction des rayons (0.1 % de la puissance initiale), les résultats peuvent être considérés comme une validation dans la configuration étudiée.

Le tableau IV.4 récapitule les temps de calcul des six cas précédemment présentés. Ces calculs ont été réalisés sur des processeurs Intel Montecito cadencés à 1.6 GHz. Les temps CPU indiqués sont relatifs à un seul processeur. Le temps d'initialisation (« temps init. ») correspond au temps entre le début du calcul et le début du traitement des tirs. Autrement dit, c'est le temps de lecture des fichiers d'entrée (maillage, champs thermochimiques, paramètre du modèle MSBE...), auquel il faut ajouter le temps de calcul de certains paramètres d'interpolation (pour le modèle MSBE) et le temps pour répartir les tirs dans les cellules.

TAB. IV.4: Temps CPU relatifs à un processeur pour le traitement des systèmes en bande.

	nb de tirs	temps tot. [s]	temps init. [s]	temps moyen pour 1 tir [s]
continua dépendant du déséq. chim.	25000	13.5	3.36	3.72×10^{-4}
continua non dépendant du déséq. chim.	25000	11.19	2.96	2.76×10^{-4}
syst. mol. opt. mince	25000	18.75	3.66	5.43×10^{-4}
syst. mol. opt. épais (non prédissocié)	25000	40.05	3.80	1.39×10^{-3}
syst. mol. opt. épais (prédissocié)	25000	52.91	5.66	1.83×10^{-3}
continua et syst. mol.	50000	117.1	10.76	2.06×10^{-3}

On remarque que ce temps est relativement court (quelques secondes) et n'est susceptible d'augmenter qu'avec le nombre de cellules du maillage. Le temps total est d'autant plus important que le type de contribution est compliqué à traiter. Ainsi, les continua non dépendant du déséquilibre chimique (box model à deux paramètres) traités seuls prennent quatre fois moins de temps que les systèmes moléculaires optiquement épais prédissociés (MSBE à cinq paramètres). Ceci est également visible au regard des temps moyens de calcul d'un tir. La dernière ligne du tableau IV.4 correspond au cas où toutes les contributions traitées en modèle de bandes sont prises en compte en émission mais aussi en absorption. Le fait qu'il y ait plus de contributions en absorption augmente logiquement les temps de calcul.

Concernant la place mémoire, ces calculs ont nécessité environ 200 Mo par processeur.

IV.5.4.2 Raies atomiques

Pour traiter la contribution des raies atomiques, la procédure donnée dans la section IV.4.2 a été implémentée dans le code ASTRE. Des calculs de puissance et de flux ont ensuite été réalisés sur la même configuration que dans le paragraphe précédent (*i.e.* champs issus du point de trajectoire 1634 s).

La figure IV.7 (à gauche) montre les champs de puissance obtenus avec le code ASTRE pour différents nombres de tirs et avec la méthode de lancer de rayons, uniquement pour les raies atomiques. Les calculs ASTRE ont été réalisés avec la valeur par défaut de $r_\sigma = 100 \text{ cm}^{-1}$, c'est-à-dire que pour calculer la puissance absorbée dans chaque cellule, on considère toutes les raies à une distance de 100 cm^{-1} autour du centre de la raie tirée. La figure IV.7 (à droite) montre les écarts types de chaque calcul ASTRE qui ont été réalisés sur 16 processeurs. On note un très bon accord entre le calcul de référence (lancer de rayons) et le calcul ASTRE convergé³ à quelques pourcents avec 12.8 millions de tirs.

En ce qui concerne les flux à la paroi, le tableau IV.5 récapitule les résultats. On remarque tout d'abord que les écarts types des résultats obtenus pour les raies atomiques sont plus importants que ceux obtenus pour les contributions traitées par bande (cf. figure IV.6 et tableau IV.3). Par exemple pour 800000 tirs, l'écart type sur le calcul du flux à la paroi pour les raies atomiques est de 0.98 % alors qu'il n'est que de 0.174 % pour l'ensemble des

³Hormis, comme dans le cas précédent des contributions en bande, pour des points de la ligne d'arrêt où les puissances sont quasi nulles, près de la couche limite par exemple.

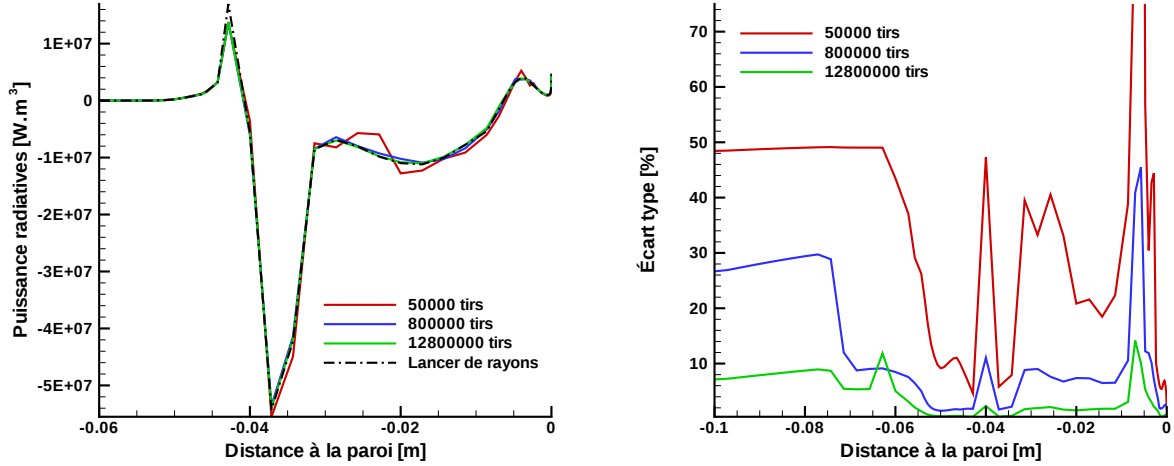


FIG. IV.7: Évolution de la puissance radiative due aux raies atomiques (à gauche) entre la paroi et l'infini amont. Résultats obtenus avec le code ASTRE pour différents nombres de tirs et avec la méthode de lancer de rayons. Évolution des écarts types (à droite) pour les calculs ASTRE.

TAB. IV.5: Influence du nombre de tirs sur le flux radiatif à la paroi dû aux raies atomiques ($r_\sigma = 100 \text{ cm}^{-1}$).

$q^R [W.m^{-2}]$			
Lancer de rayons	ASTRE (Écart type en %)	Nb tirs	Écart relatif
2.01×10^5	$2.00 \times 10^5 (\pm 3.03\%)$	50000	0.44 %
	$1.97 \times 10^5 (\pm 0.98\%)$	800000	-1.59 %
	$1.99 \times 10^5 (\pm 0.20\%)$	12.8 millions	0.33 %

systèmes moléculaires et les continua. Cette remarque s'applique également pour les champs de puissance. Ceci peut s'expliquer par le fait que les raies atomiques sont très épaisses (en particulier dans le VUV) et que le choix de la raie puis du nombre d'onde que l'on affecte à chaque tir repose sur des considérations qui privilégient des nombres d'onde au centre des raies très intenses donc fortement auto-absorbées ; autrement dit, la majorité des tirs ne contribuent pas à faire du transfert puisqu'ils ne sortent pas des mailles émettrices. Ce point est discuté dans le dernier paragraphe de cette section en ce qui concerne les temps de calcul.

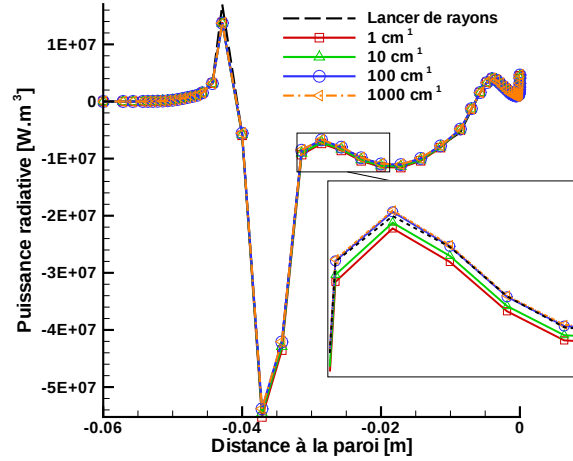
Dans le cas de figure étudié dans cette section, un calcul avec 12.8 millions de tirs permet d'obtenir une convergence très satisfaisante aussi bien sur les flux que sur les puissances. En ce qui concerne la comparaison avec les calculs réalisés avec la méthode de lancer de rayons, les résultats montrent un très bon accord entre les deux types de calculs avec des écarts sur les flux inférieurs au pourcent.

Nous avons étudié la sensibilité des résultats au paramètre r_σ en comparant les résultats obtenus avec $r_\sigma = 1, 10, 100$ et 1000 cm^{-1} et 12.8 millions de tirs. La figure IV.8 et le tableau IV.6 montrent les résultats respectivement sur les puissances et les flux. Tout d'abord, les écarts observés sur les puissances sont relativement faibles, ce qui indique que l'absorption des raies atomiques est principalement due à l'auto-absorption. Le tableau IV.6 indique à ce titre qu'il y a seulement un écart de près de 5 % entre calcul ASTRE et lancer de rayons pour $r_\sigma = 1 \text{ cm}^{-1}$. Pour un rayon supérieur ou égal à 100 cm^{-1} , on observe que l'ensemble

TAB. IV.6: Influence du paramètre r_σ sur le flux radiatif à la paroi dû aux raies atomiques (12.8×10^6 tirs pour le calcul *ASTRE*).

$q^R [W.m^{-2}]$		$r_\sigma [cm^{-1}]$	Écart relatif
Lancer de rayons	ASTRE (Écart type en %)		
2.01×10^5	$2.10 \times 10^5 (\pm 0.3\%)$	1	-4.66 %
	$2.06 \times 10^5 (\pm 0.3\%)$	10	-2.66 %
	$2.00 \times 10^5 (\pm 0.3\%)$	100	0.33 %
	$1.99 \times 10^5 (\pm 0.3\%)$	1000	0.83 %

des résultats convergent, puisque le champ de puissance et le flux n'évoluent quasiment plus. Dans le tableau IV.6, les résultats indiquent que l'écart entre les flux calculés par le code *ASTRE* avec $r_\sigma = 10$ et 100 cm^{-1} est de plus de 3 % alors qu'il n'est plus que de 0.5 % pour $r_\sigma = 100$ et 1000 cm^{-1} .

**FIG. IV.8:** Évolution de la puissance radiative due aux raies atomiques entre la paroi et l'infini amont. Résultats obtenus avec le code *ASTRE* (12.8×10^6 tirs) pour différentes valeurs de r_σ et avec la méthode de lancer de rayons.

Nous avons également analysé les temps de calcul pour le traitement des raies atomiques. Le tableau IV.7 récapitule les temps CPU pour un processeur pour les calculs précédemment cités. Par rapport au tableau IV.4 relatif aux systèmes traités en bande, la colonne r_σ a été rajoutée. Les temps d'initialisation (« temps init. ») sont de l'ordre de 2 à 3 s et donc du même ordre de grandeur que pour les systèmes en bandes. L'effet du rayon r_σ sur les temps moyens de calcul d'un tir est significatif en particulier lors du passage de r_σ de 100 à 1000 cm^{-1} avec un facteur de plus de deux. Cette augmentation du temps de calcul est à rapprocher de la précision que cela apporte, *i.e.* 0.5 % sur les flux comme évoqué précédemment. En revanche, le passage de r_σ de 1 à 100 cm^{-1} entraîne une augmentation d'un facteur 1.45 sur les temps CPU mais pour un gain en précision de l'ordre de 5 %. La valeur par défaut de $r_\sigma = 100 \text{ cm}^{-1}$ nous semble être un bon compromis entre précision et temps de calcul. Par la suite, tous les calculs ont été effectués avec $r_\sigma = 100 \text{ cm}^{-1}$.

De manière générale, les temps CPU moyens pour un tir sont de l'ordre de 10^{-5} s soit un

TAB. IV.7: *Temps CPU relatifs à un processeur pour le traitement des raies atomiques.*

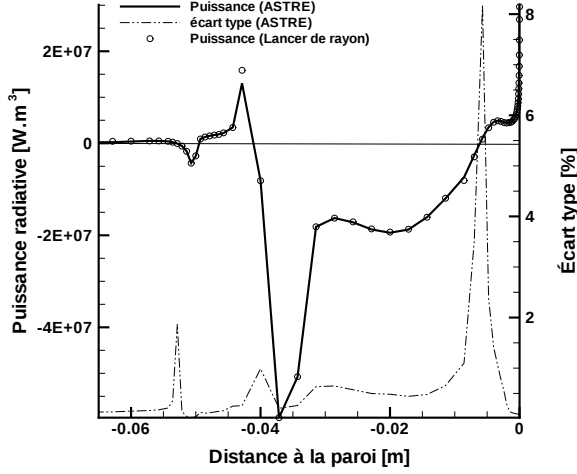
nb de tirs	r_σ [cm ⁻¹]	temps tot. [s]	temps init. [s]	temps moyen pour 1 tir [s]
3125	100	4.44	2.44	
50000	100	6.56	2.50	
800000	100	33.70	2.53	
800000	1	24.20	2.42	2.60×10^{-5}
800000	10	25.43	2.46	2.75×10^{-5}
800000	100	33.70	2.53	3.78×10^{-5}
800000	1000	71.40	2.45	8.80×10^{-5}

à deux ordres de grandeur de moins que pour les systèmes traités en bandes. Cette différence s'explique par le fait que le libre parcours moyen des paquets d'énergie est beaucoup plus faible que pour un rayon transportant du rayonnement provenant des systèmes en bandes car comme indiqué précédemment les tirs pour les raies atomiques sont préférentiellement réalisés pour des zones spectrales très épaisses (méthode par défaut). Cette caractéristique diminue donc fortement le temps de calcul moyen d'un tir mais c'est au détriment de la convergence du calcul : par rapport aux systèmes en bandes, il faut, pour les raies atomiques, beaucoup plus de tirs pour faire du transfert « utile » et ainsi obtenir les mêmes niveaux de convergence. Afin d'accélérer la convergence des calculs, nous avons mis en œuvre des méthodes qui privilégient un tirage du nombre d'onde dans les ailes de raies plutôt qu'au centre. Ces méthodes reposent sur l'épaississement du profil des raies en fonction d'une longueur de référence. Ceci entraînant une modification des zones spectrales les plus émettrices, les puissances transportées par les tirs sont corrigées par le rapport des profils (profil réel/profil épaissi) afin de conserver la représentation spectrale réelle des raies, de la même manière que le rapport que l'on utilise entre profil Voigt et profil Lorentz (cf. §IV.4.2.2). Nous avons testé ces méthodes de biais pour différentes longueurs de référence. Ces tests montrent que le nombre de tirs quittant les cellules émettrices est beaucoup plus important par rapport à la méthode par défaut mais les résultats sur les écarts types ne semblent pas s'améliorer significativement. De plus, les temps de calcul s'en trouvent augmentés puisque le trajet des rayons est alors plus important. D'autre part, la longueur de référence nécessaire à ces méthodes est un paramètre susceptible de varier d'un cas d'étude à un autre. Suite à ces différents tests, nous n'avons pas retenu l'utilisation de ces méthodes de biais pour les calculs dont les résultats sont présentés dans ce manuscrit.

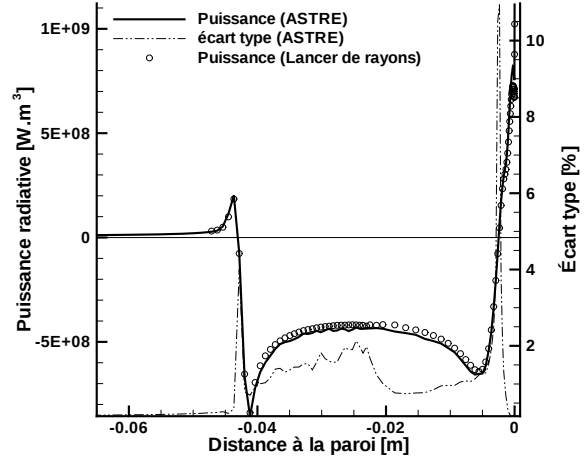
Concernant la place mémoire, tous les calculs présentés dans cette section ont nécessité environ 200 Mo par processeur comme pour le cas des systèmes en bande vu précédemment.

IV.5.4.3 Validation globale

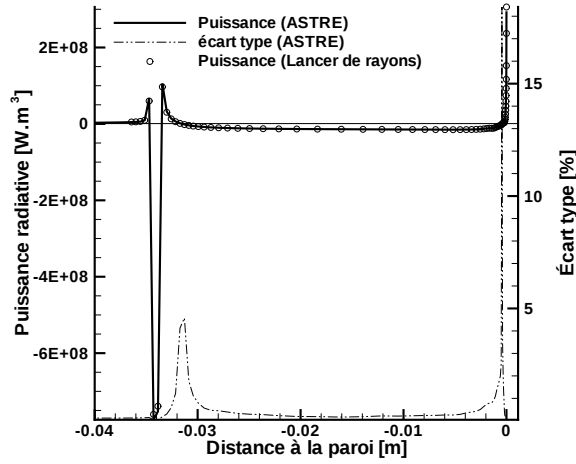
Une validation globale de l'implémentation du modèle hybride de rayonnement dans ASTRE a été effectuée pour trois champs aérothermochimiques correspondant à ceux de l'écoulement sur la ligne d'arrêt de trois points de trajectoire de la sonde FIRE II (cf. tableau IV.1). La validation a été réalisée comme précédemment, *i.e.* sur les flux et les puissances en comparaison à une méthode de lancer de rayons. On considère cette fois-ci



(a) Cas 1634 s.



(b) Cas 1643 s.



(c) Cas 1648.5 s.

FIG. IV.9: Évolution de la puissance radiative entre la paroi et l'infini amont. Résultats obtenus avec le code ASTRE (51.2×10^6 tirs) et la méthode de lancer de rayons pour les trois points de trajectoire.

tous les systèmes émetteurs et absorbants ainsi que le rayonnement de la paroi.

La figure IV.9 montre les résultats obtenus pour les champs issus des points de trajectoire 1634 s, 1643 s et 1648.5 s. Les calculs avec ASTRE ont été réalisés avec 51.2 millions de tirs sur 64 processeurs (soit 800000 tirs par processeur) et une répartition des tirs entre les raies atomiques, les systèmes moléculaires et les continua telle que $\alpha_{at} = 5/6$, $\alpha_{mol} = 1/12$ et $\alpha_{cont} = 1/12$. Ce choix de répartition non uniforme des tirs repose sur les résultats obtenus précédemment en ce qui concerne la convergence de l'approche Monte Carlo : à niveau de convergence égal, il faut, pour les raies atomiques, un nombre de tirs bien supérieur à celui nécessaire pour les systèmes traités en bande. Pour le paramètre r_σ , nous avons pris la valeur par défaut de 100 cm^{-1} . Le nombre de tirs choisi est suffisant pour obtenir des calculs convergés avec des écarts types de l'ordre du pourcent sur les champs de puissance hormis pour les points où la puissance est quasi-nulle.

Les figures IV.9(a), IV.9(b), IV.9(c) montrent que les comparaisons avec les puissances

TAB. IV.8: *Flux radiatifs à la paroi.*

	$q^R[W.m^{-2}]$		
	Lancer de rayons	ASTRE (Écart type en %)	Écart relatif
1634 s	2.975×10^5	$2.975 \times 10^5(\pm 0.10\%)$	-0.17 %
1643 s	8.537×10^6	$8.853 \times 10^6(\pm 0.10\%)$	-3.67 %
1648.5 s	3.620×10^5	$3.617 \times 10^5(\pm 0.07\%)$	0.083 %

TAB. IV.9: *Temps CPU relatif à un processeur.*

	nb	temps	temps	temps moyen
	de tirs	tot. [s]	init. [s]	pour 1 tir [s]
1634 s	800000	703.2	11.95	8.15×10^{-4}
1643 s	800000	484.5	19.5	5.69×10^{-4}
1648.5 s	800000	434.5	12.67	5.18×10^{-4}

obtenues avec la méthode de lancer de rayons sont très satisfaisantes pour les trois cas de figure. Pour les flux à la paroi, le tableau IV.8 récapitule les résultats obtenus. On remarque globalement que les écarts types sur les flux sont inférieurs à ceux sur les champs de puissance indiquant qu'il est moins coûteux d'obtenir des flux convergés que des puissances convergées. Le tableau IV.8 indique également les écarts relatifs entre calcul ASTRE et lancer de rayons. Les écarts sont globalement faibles mais pas négligeables pour le cas de calcul 1643 s, où l'écart est de 3.67 % alors que l'écart type est de 0.10 % pour ce calcul. Cet écart peut être dû : (i) à la méthode de lancer de rayons utilisant des cellules non suffisamment découpées (découpage par défaut de 5) ou à une discrétisation angulaire non suffisante, (ii) à la méthodologie dans ASTRE, où le rayon $r_\sigma = 100 \text{ cm}^{-1}$ n'est pas suffisant pour décrire l'absorption des raies atomiques par les raies atomiques⁴. Différentes pistes peuvent expliquer cet écart qui reste cependant assez faible démontrant que l'implémentation de la modélisation hybride dans le code ASTRE est validée.

Concernant les temps de calcul, le tableau IV.9 reporte les temps CPU des trois calculs présentés dans cette section qui ont été réalisés sur des processeurs Intel Montecito cadencés à 1.6 GHz. On remarque globalement que les temps moyens d'un tir sont du même ordre de grandeur, entre 5 et 8.10^{-4} s. Les temps CPU pour le cas 1634 s qui sont un peu plus importants que pour les deux autres cas s'expliquent par le fait que c'est un cas à relative basse pression (≈ 0.05 bar) et donc optiquement moins épais que les deux autres (0.8 et 2 bar).

IV.6 Application 3D : FIRE II

On présente dans cette section des champs 3D de puissance et de flux radiatif à la paroi obtenus avec le code ASTRE pour le cas de rentrée FIRE II. Les champs aérothermo-chimiques sont issus des calculs réalisés en 2D axisymétrique par Soubrié [10] avec le code

⁴Les calculs avec la méthode de lancer de rayons ont été réalisés avec des spectres atomiques calculés avec une portée de raie de 1000γ (environ 1000 cm^{-1}), γ étant la largeur de la raie

CelHyo2D et précédemment présentés dans la section IV.5.1 pour trois points de trajectoire. La figure IV.10 montre à titre illustratif le champ 2D de la température translationnelle des électrons libres dans la couche de choc pour les points de rentrée 1634 s, 1643 s et 1648.5 s. On rappelle que dans nos calculs de rayonnement, c'est cette température qui est utilisée pour peupler les états électroniques suivant une distribution de Boltzmann.

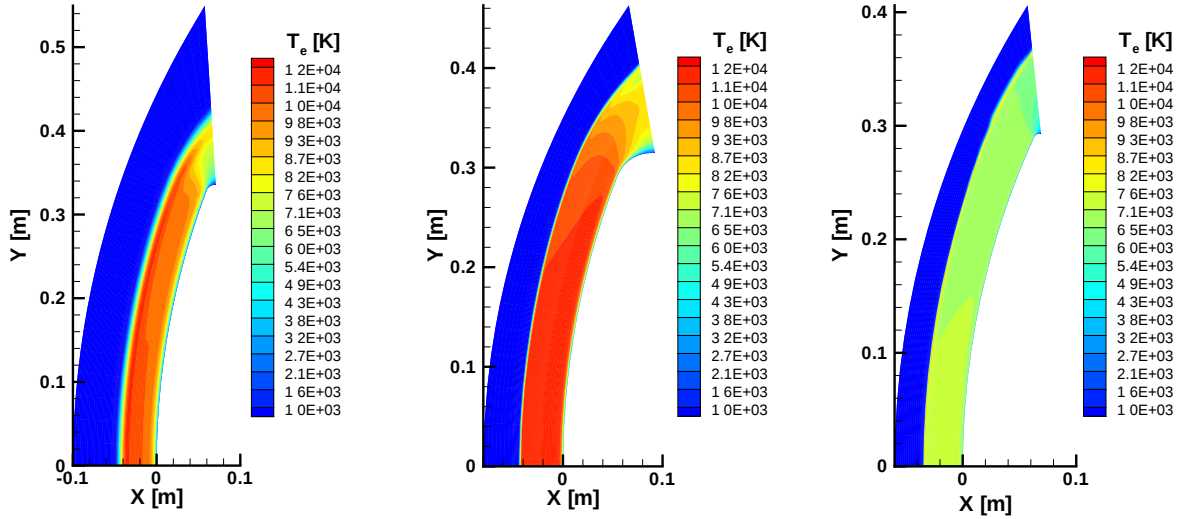


FIG. IV.10: Champs de température des électrons libres pour les points de trajectoire 1634 s, 1643 s et 1648.5 s.

Pour utiliser le code ASTRE qui ne fonctionne qu'en 3D, des maillages 3D ont été construits par rotation des maillages 2D et les grandeurs thermochimiques (températures, pression, densités...) définies aux centres des mailles 2D ont été rapportées aux centres des mailles 3D. La géométrie étudiée étant axisymétrique, on peut se limiter à effectuer les calculs sur un seul secteur angulaire (*i.e.* même nombre de cellules en 2D qu'en 3D) en prenant des conditions aux limites de type « miroir ». Cette configuration étudiée dans le paragraphe IV.6.1 permet de diminuer de manière importante le nombre de cellules par rapport à une géométrie 3D complète de la couche de choc. Dans la section IV.6.2, nous nous sommes affranchis de cette simplification et nous avons réalisé un calcul de démonstration pour une géométrie modélisant l'intégralité de la couche de choc, ceci dans le but de montrer la faisabilité de calculs de rayonnement avec ASTRE sur un nombre beaucoup plus important de cellules (cas rencontré notamment pour des champs aérothermochimiques 3D⁵).

IV.6.1 Calcul sur un secteur angulaire de la couche de choc

La figure IV.11 montre un exemple de secteur angulaire obtenu à partir du maillage 2D de la couche de choc du point de trajectoire 1634 s. L'angle de ce secteur doit être assez faible car l'arc de cercle (dû à la rotation du maillage 2D lors de la création du maillage 3D)

⁵Cette configuration est utilisée pour étudier l'effet de l'angle d'attaque par exemple lors de la rentrée atmosphérique.

est approximé par un segment de droite dans les calculs. Pour nos calculs, nous avons pris un angle de 5° pour construire tous les secteurs angulaires considérés dans cette section.

Dans cette configuration, les conditions aux limites pour les six faces sont récapitulées sur la figure IV.11 de droite. Les conditions aux limites nommées « miroir » permettent de simuler l'émission provenant de toute la couche de choc. Le résultat obtenu dans un seul secteur est donc représentatif de toute la géométrie 3D axisymétrique.

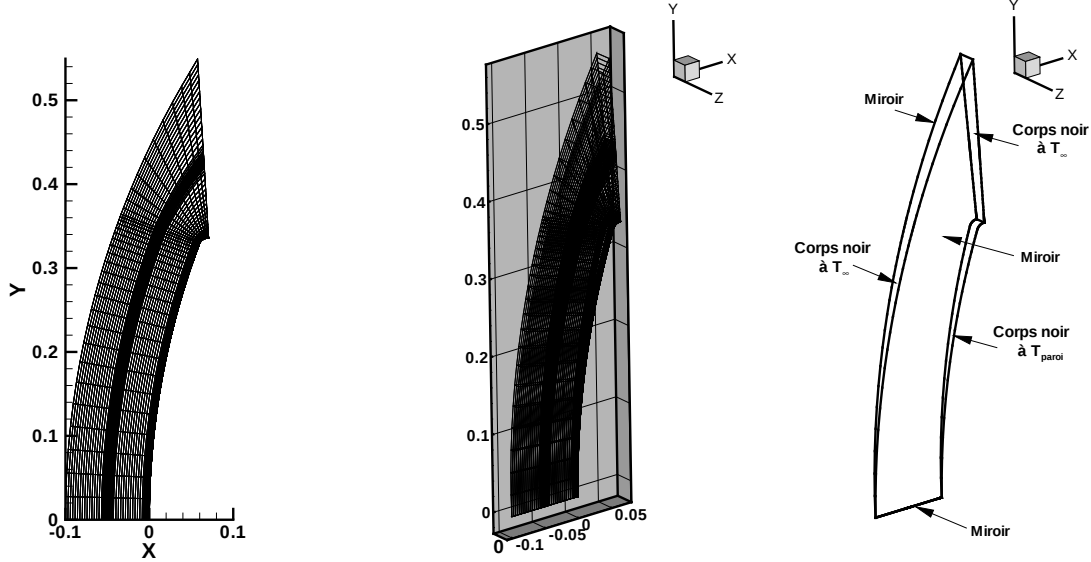


FIG. IV.11: Tranche de maillage 3D (au milieu) avec les conditions aux limites (à droite) pour une géométrie axisymétrique correspondant à un maillage 2D (à gauche) - point de trajectoire 1634 s de la sonde FIRE II.

Le code ASTRE a été mis en œuvre avec la modélisation hybride des propriétés radiatives implémentée suivant la méthodologie expliquée dans la section IV.4. Les calculs ont été réalisés pour les points de trajectoire 1634 s, 1643 s et 1648.5 s dans les conditions suivantes (similaires aux calculs de validation réalisés dans la section IV.5.4.3 mais avec deux fois plus de tirs) : (i) 102.4 millions de tirs répartis sur 64 processeurs, (ii) une répartition des tirs suivant $\alpha_{at} = 5/6$, $\alpha_{mol} = 1/12$ et $\alpha_{cont} = 1/12$ pour les trois types de processus et (iii) un rayon r_σ de 100 cm^{-1} , (iv) un critère d'extinction des rayons de 0.1 %, et (v) un intervalle spectral couvrant tout le spectre de 1000 à 200000 cm^{-1} .

Les figures IV.12(a), IV.12(d) et IV.12(g) montrent les champs de puissance en 2D (plan $z=0$) pour les trois points de trajectoire. Les puissances négatives indiquent que la zone émet plus de rayonnement qu'elle en absorbe et inversement pour les puissances positives. L'amplitude de la puissance s'atténue peu à peu au fur et à mesure qu'on s'éloigne de la ligne d'arrêt (zone où les températures sont maximales). Les figures IV.12(c), IV.12(f) et IV.12(i) montrent les champs de puissance sur la ligne d'arrêt des trois points de trajectoire. On retrouve qualitativement la même évolution pour chaque point : (i) un pic d'émission (puissance nette négative) où les températures électroniques et vibrationnelles sont les plus importantes (cf. figures IV.5 - cette zone est d'autant plus étroite que le pic des températures est étroit), (ii) une absorption par le gaz (puissance nette positive) en amont de ce pic d'émission (et aussi en aval sur un petit intervalle pour le cas 1648.5 s), (iii) suivi d'un plateau plus ou moins long où la puissance est quasiment constante jusqu'à la couche limite

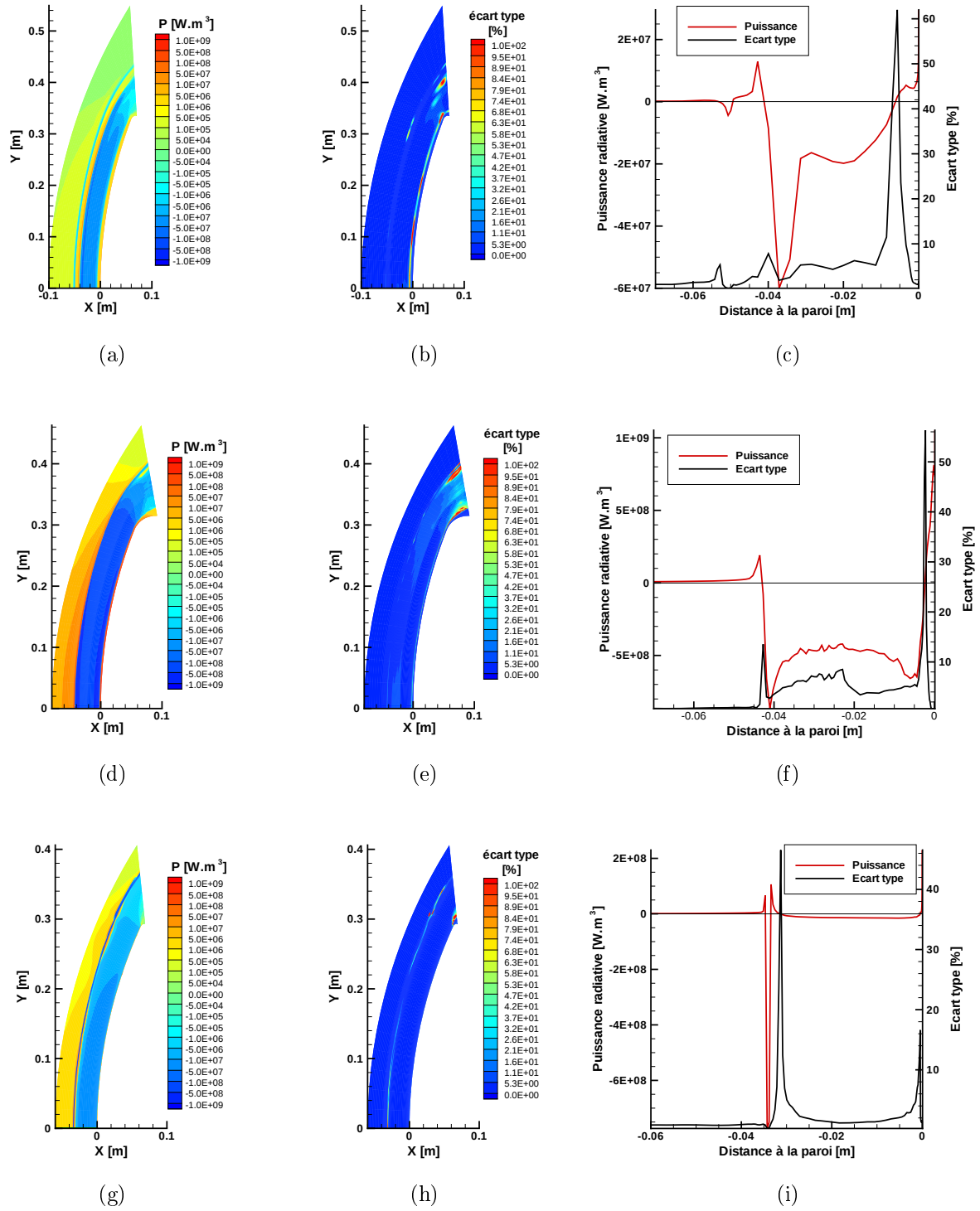


FIG. IV.12: Champs en 2D de puissance (à gauche) et écart type (au milieu) et coupes 1D de champs de puissance le long de la ligne d'arrêt (à droite) pour les points de trajectoire 1634 s (figures (a), (b) et (c)), 1643 s (figures (d), (e) et (f)) et 1648.5 s (figures (g), (h) et (i)).

où (iv) le milieu absorbe fortement. Ces champs sont qualitativement identiques aux calculs réalisés avec la méthode des plans tangents (cf. figure IV.9).

Les champs en 2D des écarts types (relatifs) sur les puissances sont représentés sur les

TAB. IV.10: Flux radiatifs au point d'arrêt.

	$q^R[W.m^{-2}]$		
	ASTRE plans tangents (E. type en %)	ASTRE 3D (E. type en %)	Écart relatif
1634 s	$2.975 \times 10^5 (\pm 0.10\%)$	$2.717 \times 10^5 (\pm 0.96\%)$	9.50 %
1643 s	$8.853 \times 10^6 (\pm 0.10\%)$	$7.931 \times 10^6 (\pm 0.48\%)$	11.62 %
1648.5 s	$3.617 \times 10^5 (\pm 0.07\%)$	$3.159 \times 10^5 (\pm 0.55\%)$	12.67 %

figures IV.12 du milieu et sur les figures de droite au niveau de la ligne d'arrêt. Ils sont de l'ordre de 5 % (voire plus faibles dans certaines zones) dans l'ensemble de la couche de choc pour les trois cas de rentrée, hormis dans certaines zones particulières. En effet, on observe des valeurs plus élevées situées, comme dans le cas du mur plan, dans les zones où la puissance radiative est quasiment nulle et issue d'une différence entre les puissances absorbée et émise qui sont non négligeables. C'est le cas par exemple, pour les trois cas étudiés, de l'entrée dans la couche limite « froide » à travers laquelle la puissance change de signe. On a ainsi une fine couronne juste en amont de la paroi où les écarts types sont élevés. La couche limite étant de plus en plus fine au fur et à mesure que la pression monte dans la couche de choc et donc que la sonde descend, cette couronne s'amincit et se rapproche de la paroi entre le premier et le dernier points de trajectoire étudiés. Pour le cas 1648.5 s, ce phénomène (passage par une puissance nulle) se produit également juste après la forte émission radiative au niveau du choc qui est suivie par une forte absorption. Dans une optique de coupler les phénomènes radiatifs avec l'aérothermochimie, ces erreurs de précision ne devraient pas avoir de conséquence vu les faibles puissances mises en jeu.

On note également que dans la zone de la couche de choc éloignée de la ligne d'arrêt, qui est donc un peu plus froide (comme le montrent les figures IV.10 en terme de température des électrons libres), les écarts types relatifs sont plus élevés (10-20 %) que dans le reste de la géométrie. Ceci peut s'expliquer en partie par le fait que la répartition des tirs se faisant au prorata de l'émission des cellules, on affecte moins de tirs dans les zones moins chaudes mais néanmoins émettrices. Il y a donc moins d'évènements (de tirs) pour faire du transfert dans ces zones-ci. Dans le cas 1648.5 s, qui présente une chute de température relativement faible, comme le montre la figure IV.10 de droite, les incertitudes sont moindres.

La figure IV.13 montre, pour chaque point de trajectoire, l'évolution du flux radiatif le long de la paroi, le point d'abscisse $x=0$ désignant le point d'arrêt. Les flux sont maximum au point d'arrêt et diminuent progressivement lorsqu'on s'en éloigne. Pour les trois cas étudiés, les flux sont positifs sur l'ensemble de la paroi, c'est-à-dire que le flux incident issu du rayonnement de la couche de choc est supérieur au flux émis par la paroi. Le tableau IV.10 résume les résultats obtenus pour le flux au point d'arrêt entre la configuration plans tangents et la configuration 3D réelle pour les trois points de trajectoire. On observe un écart de l'ordre de 10 % entre les deux types de calcul. On remarque également que cet écart diminue lorsque la paroi de la sonde devient de plus en plus émoussée (voir les rayons de nez indiqués dans le tableau IV.2), se rapprochant ainsi de la configuration plan tangent.

La figure IV.13 montre également que les écarts types sur les flux sont globalement très faibles (en dessous du pourcent), hormis dans la partie supérieure la plus éloignée du point d'arrêt où l'écart type augmente légèrement (2-3 %) pour les mêmes raisons invoquées précédemment sur les écarts types des puissances.

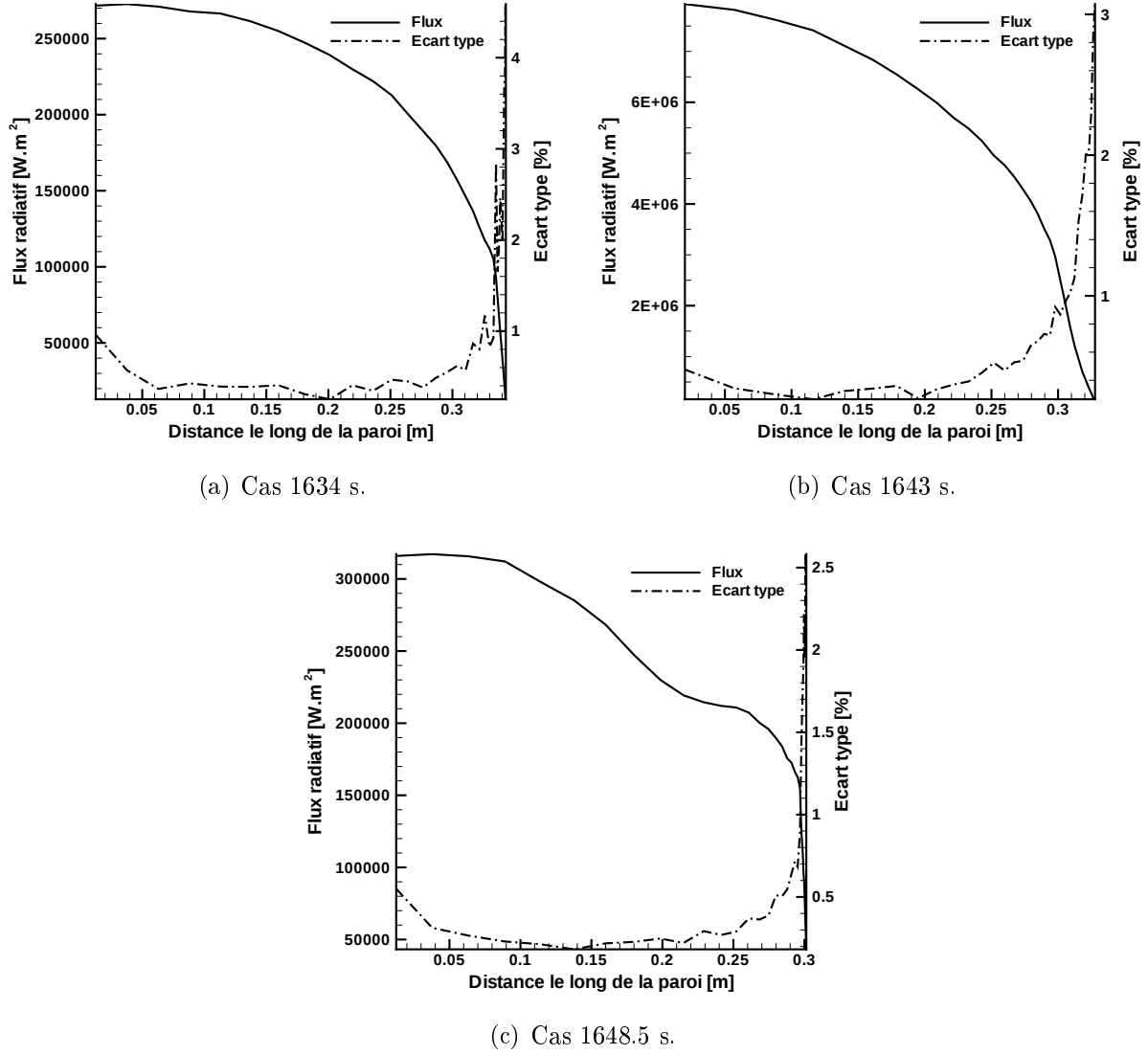


FIG. IV.13: Flux surfacique le long de la paroi de la sonde FIRE II pour trois points de trajectoire.

Pour ces calculs 3D, nous avons estimé les temps CPU. Le tableau IV.11 récapitule les résultats pour un processeur sur lequel 1.6 millions de tirs ont été effectués (calcul sur 64 processeurs sur lesquels, on a réparti 102.4 millions de tirs). Les temps d'initialisation restent faibles (de 20 à 30 s) et le temps moyen d'un tir augmente de 30 à 50 % par rapport à la mise en œuvre du code ASTRE dans le cas plans tangents. Ceci est dû au fait que dans le cas de la géométrie réelle 3D, les rayons traversent beaucoup plus de cellules que dans le cas de la configuration plans tangents. Les temps totaux restent cependant toujours raisonnables compte tenu du degré de précision obtenu pour ces calculs. En terme de place mémoire, les calculs ont nécessité respectivement 341 Mo, 389 Mo et 370 Mo pour les points de trajectoire 1634 s (2555 cellules), 1643 s (3399 cellules) et 1648.5 s (3045 cellules).

IV.6.2 Calcul global de la couche de choc

Nous avons réalisé un calcul de démonstration pour une géométrie complète de la couche de choc. Le maillage utilisé a été généré à partir d'un maillage 2D de la même manière

TAB. IV.11: Temps CPU relatif à un processeur.

	nb de tirs	temps tot. [s]	temps init. [s]	temps moyen pour 1 tir [s]
1634 s	1.6 millions	1867.7	22.83	1.14×10^{-3}
1643 s	1.6 millions	1276.9	30.65	7.75×10^{-4}
1648.5 s	1.6 millions	1589.3	24.0	9.64×10^{-4}

que précédemment mais avec un nombre de secteurs permettant toute la révolution autour de l'axe de la ligne d'arrêt. La géométrie finale constituée de 29 secteurs angulaires est présentée sur la figure IV.14 pour le point de rentrée 1643 s. La géométrie totalise 98571 cellules. Cependant pour des raisons de place mémoire, les intensités des raies atomiques n'ont été stockées que pour un seul secteur.

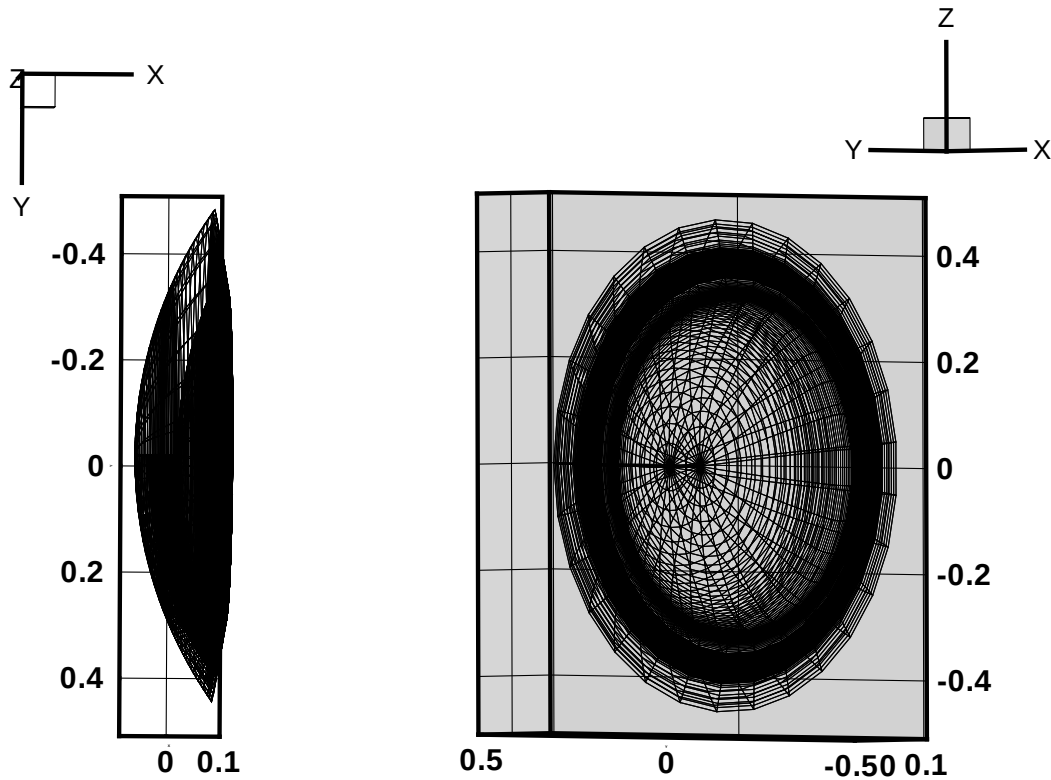


FIG. IV.14: Maillage 3D pour une géométrie axisymétrique de la couche de choc du point de rentrée 1643 s de la sonde FIRE II.

La mise en œuvre du code ASTRE a été réalisée avec les mêmes paramètres que les calculs précédents (cf. §IV.6.1). Seuls diffèrent le nombre de tirs et le nombre de processeurs utilisés (ici 32). Deux calculs ont été réalisés pour le point de trajectoire 1643 s, le premier avec 18.56 millions de tirs ce qui représente 20000 tirs par processeur et par secteur angulaire et le deuxième avec 185.6 millions de tirs, soit dix fois plus (200000 par secteur et par processeur). Les résultats seront cependant moins bien convergés que ceux présentés précédemment pour

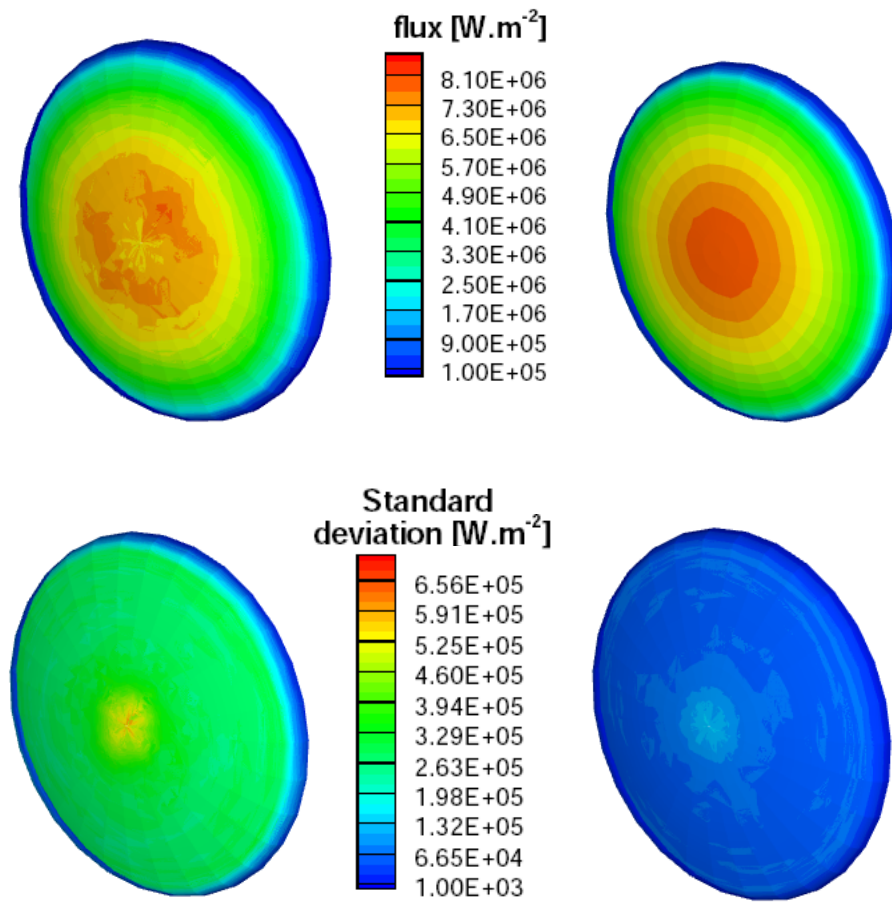


FIG. IV.15: Flux radiatifs à la paroi (figures du haut) et écarts types associés à ces calculs (figures du bas). À gauche, les résultats pour 18.56 millions de tirs et à droite pour 185.6 millions de tirs. Point de trajectoire 1643 s de la sonde FIRE II.

un seul secteur où l'on a utilisé 1.6 millions de tirs par processeurs sur 64 processeurs, *i.e.* 16 fois plus de tirs par secteur si l'on ramène les calculs au même nombre de processeurs. Les écarts types sont par conséquent plus élevés (de l'ordre d'un facteur 4).

La figure IV.15 montre les flux radiatifs à la paroi et leur écart type en absolu obtenus pour les deux calculs. Pour 18.56 millions de tirs, le flux est bruité au niveau du centre du bouclier avec des écarts types de l'ordre de 8-10 %. Globalement, la décroissance attendue du flux du centre vers la périphérie de la couche de choc est observée. Pour 185.6 millions de tirs, les flux sont convergés à 2-3 %. La valeur au centre est de l'ordre de 8.10^6 W.m^{-2} (± 2 à 3 % suivant le plan de coupe) ce qui concorde avec la valeur obtenue de $7.931 \cdot 10^6 \text{ W.m}^{-2}$ dans l'étude précédente sur un seul secteur angulaire.

Pour les puissances radiatives, la figure IV.16 montre les champs obtenus pour les deux calculs avec les écarts types associés. Pour le premier calcul avec relativement peu de tirs par secteur, les puissances sont quasiment symétriques entre le secteur du haut et celui du bas malgré des écarts types importants pouvant aller jusqu'à plus de 100 %. On constate que les écarts types pour les puissances sont plus élevés que pour les flux, preuve de la meilleure convergence de ces derniers. Pour le deuxième calcul, avec dix fois plus de tirs, les écarts types ont bien diminué (suivant la loi en $1/\sqrt{N}$) mais restent tout de même importants,

de l'ordre de 10-30 % dans la majeure partie de la couche de choc et plus encore dans les zones froides à la périphérie du bouclier. Ce point de trajectoire est le plus difficile à faire converger en terme de puissance parmi les trois points étudiés au regard des écarts types présentés sur la figure IV.12. Hormis pour les flux où les résultats sont satisfaisants, la convergence des puissances en dessous du seuil de 5 % nécessiterait plus de tirs.

Pour les temps CPU, à titre indicatif, le dernier calcul a nécessité 1h27 sur chaque processeur (Intel Montecito cadencé à 1.6 GHz). Le temps d'initialisation est relativement faible avec 54 s et le temps moyen pour chaque tir est de $8.07 \cdot 10^{-4}$ s, *i.e.* du même ordre de grandeur que pour un calcul sur un seul secteur angulaire réalisé précédemment. En terme de place mémoire, les calculs ont nécessité 670 Mo par processeur.

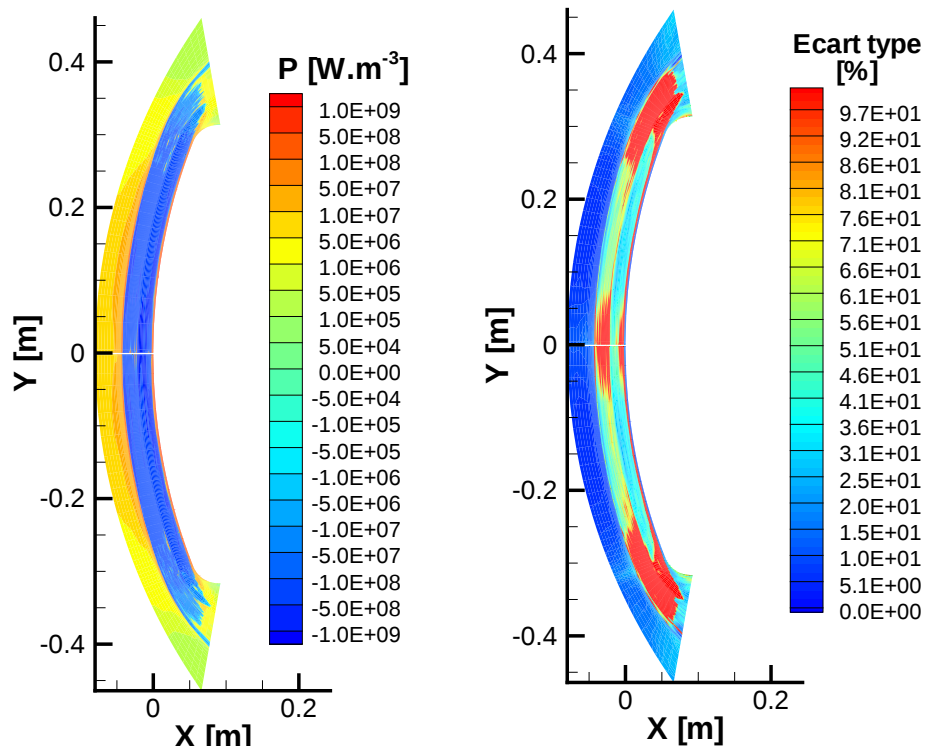
IV.7 Conclusion

Pour obtenir les champs de puissances et les flux radiatifs dans les couches de choc multi-dimensionnelles de rentrées atmosphériques terrestres, nous avons développé dans ce chapitre une méthodologie numérique basée sur une approche Monte Carlo en utilisant le modèle de propriétés radiatives relatif au plasma d'air ionisé hors d'équilibre développé dans le chapitre III. La méthodologie s'appuie sur une formulation hors d'équilibre de l'ETR adaptée à un traitement statistique des transferts radiatifs. Plus précisément, la répartition des rayons sur toute la couche de choc et les phénomènes de transmission/absorption sont traités de manière déterministe et les événements liés à l'émission sont traités de manière stochastique (tirages aléatoires des points d'émissions, des directions, des systèmes émettants et de la zone spectrale mise en jeu). L'implémentation du modèle de propriétés radiatives et des algorithmes a été réalisée dans le solveur radiatif ASTRE.

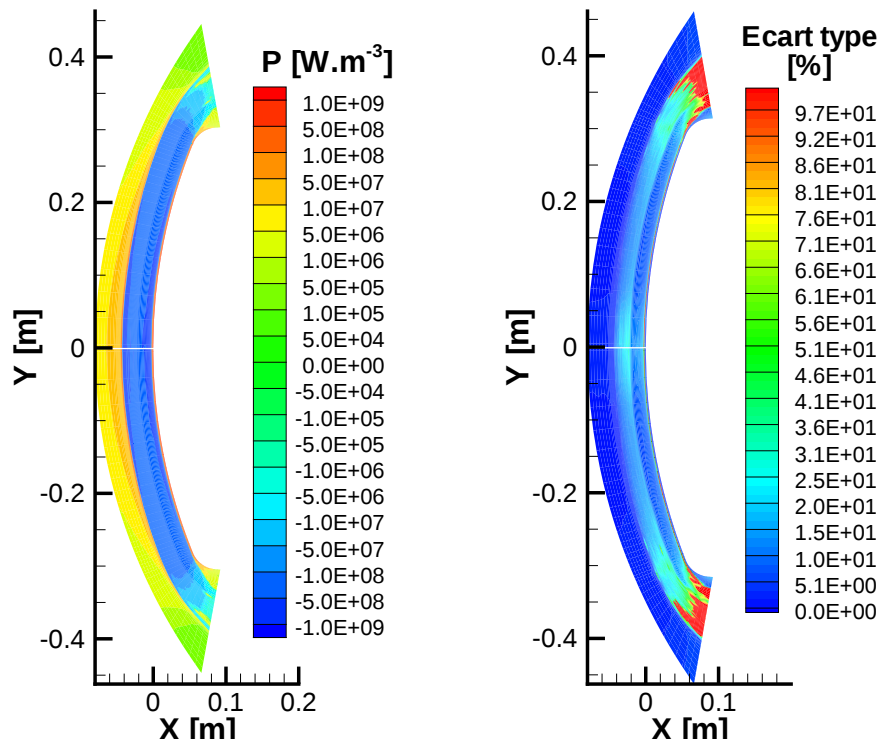
La complexité de la méthodologie mise en place est liée au nombre important de processus radiatifs mais surtout à l'aspect hybride du modèle de rayonnement reposant sur des modèles de bandes (pour les systèmes moléculaires et les continua) et une approche raie par raie (pour les raies atomiques).

L'implémentation dans le code ASTRE a été validée par comparaison à la méthode de lancer de rayons dans une configuration plans tangents. À partir de champs aérothermochimiques sur ligne d'arrêt relatifs au cas de rentrée FIRE II, le champ de puissance et le flux radiatif à la paroi ont été calculés pour différentes contributions et différents points de trajectoire. Les comparaisons entre la méthode de lancer de rayons et le code ASTRE ont montré dans tous les cas de très bons accords avec des écarts relatifs de quelques pourcents au maximum. Outre la validation, ces différents tests ont permis de voir que les contributions des raies atomiques nécessitent beaucoup plus d'événements (tirs) que les systèmes traités en bandes à convergence égale. Ce constat s'explique par le fait que l'algorithme utilisé pour traiter les raies atomiques privilégie statistiquement des événements dans les régions spectrales optiquement très épaisses et donc inutiles en terme de transfert. Cependant, en terme de temps de calcul, ces tirs coûtent peu cher car leur durée de vie (longueur du trajet optique) est très courte.

Suite à cette validation, le code ASTRE a été mis en œuvre pour réaliser des calculs 3D sur le cas d'épreuve FIRE II pour trois points de trajectoire et pour un secteur angulaire de la couche de choc dont les champs aérothermochimiques sont issus de calculs CFD



(a) 18.56 millions de tirs



(b) 185.6 millions de tirs

FIG. IV.16: Coupe 2D de champs de puissance (à gauche) et d'écart type (à droite) pour le point de trajectoire 1643 s.

2D axisymétriques. Les résultats en terme de puissance et de flux pariétal montrent une bonne convergence des calculs Monte Carlo pour des temps CPU et une place mémoire très raisonnables. La comparaison avec les calculs dans une configuration plans tangents montre des écarts de l'ordre de 10 % pour les trois points de trajectoire étudiés.

Enfin, un calcul de démonstration a été réalisé pour montrer la faisabilité d'utiliser le code ASTRE avec le modèle hybride de propriétés radiatives pour déterminer les puissances volumiques sur toute la couche de choc et les flux pariétaux sur tout le bouclier avec des niveaux de précision et des temps de calcul acceptables.

Conclusion et perspectives

Nous avons développé dans cette étude des modèles et des outils pour déterminer les transferts radiatifs dans les couches de chocs hors d'équilibre et multi-dimensionnelles rencontrées dans les rentrées atmosphériques terrestres. Les travaux réalisés et présentés ont été regroupés en trois parties.

- La première partie a consisté à formuler l'expression des propriétés radiatives pour des plasmas de N_2-O_2 en déséquilibre chimique et thermique. Cette formulation s'est appuyée sur la base de données spectroscopiques HTGR [89] développée au laboratoire EM2C et sur une modélisation hybride du déséquilibre thermique, *i.e.* niveau par niveau pour les niveaux électroniques des particules⁶ et multi-température pour les niveaux rovibrationnels des espèces diatomiques et pour les modes de translations des particules lourdes et des électrons libres. Ce choix de modélisation a été fait pour être en adéquation avec les développements, de plus en plus nombreux dans la littérature, des modèles collisionnel-radiatif de type électronique spécifique.

Les expressions obtenues ont été mises en oeuvre avec une approche raie par raie sur le cas test FIRE II, cas représentatif des rentrées terrestres à vitesse hypersonique, pour déterminer des luminances au point d'arrêt pour quatre points de trajectoire. Les champs aérothermochimiques utilisés résultent de calculs CFD obtenus avec une approche à deux températures. Les comparaisons aux données en vol sur les intervalles spectraux de mesures montrent de bons accords globaux. Cependant, pour le point de trajectoire le plus hors d'équilibre, l'approche multi-température semble ne pas être assez précise pour représenter correctement la population des niveaux électroniques. Il en résulte une surestimation d'un facteur 5 de la luminance à la paroi.

L'analyse des résultats a permis de plus de déterminer les contributions majoritaires à la luminance au point d'arrêt. Les résultats sur toute la gamme spectrale ont montré que la zone VUV du spectre contribue de 40 % à 90 % à la luminance à la paroi suivant le point de trajectoire. Ceci est notamment dû aux contributions optiquement épaisses des systèmes de N_2 (VUV), des raies atomiques et dans une moindre mesure de la recombinaison radiative des ions. Les autres contributions à la luminance proviennent de l'autre partie du spectre (de l'IR à l'UV), optiquement presque mince, et sont dues en grande partie aux raies atomiques (dans l'IR), aux systèmes $N_2(1+)$, $N_2(2+)$ et $N_2^+(1-)$ (dans le visible), à la recombinaison radiative et aux systèmes de NO (UV), ces derniers contribuant uniquement à la luminance dans les cas à haute pression. L'effet du déséquilibre thermochimique a également été étudié. Il a été montré qu'il joue un rôle important sur les recombinaisons radiatives ($N^+ + e^-$), ($O^+ + e^-$) et ($O + O$) entraînant des variations de la luminance totale pouvant atteindre

⁶Pour les continua, cette représentation a été partiellement adoptée compte tenu du manque de données disponibles dans la littérature sur les sections efficaces par niveau électronique.

50 %.

- Pour optimiser les calculs de transferts radiatifs et envisager ainsi des calculs dans des géométries multi-dimensionnelles et/ou pour étudier l'interaction écoulement/rayonnement, nous avons construit dans un deuxième temps, à partir des expressions en monochromatique des coefficients d'émission et d'absorption, un modèle approché de propriétés radiatives reposant sur une modélisation hybride : modèle statistique à bandes étroites (MSBE) pour les systèmes électroniques moléculaires optiquement non minces⁷, box model pour les systèmes électroniques moléculaires optiquement minces et les continua, et approche raie par raie (RPR) pour les raies atomiques. Les modèles de bandes ont été construits et paramétrés pour des bandes de 1000 cm^{-1} de largeur et en considérant une approche multi-température pour la rotation et la vibration dont les températures peuvent respectivement atteindre 50000 et 25000 K. Pour les niveaux électroniques, la formulation du modèle laisse la possibilité d'utiliser un peuplement Boltzmannien ou une description niveau par niveau.

L'utilisation du MSBE a nécessité une formulation adaptée de l'ETR pour tenir compte du déséquilibre thermique et des corrélations spectrales existant entre les processus d'émission, d'absorption et de transmission. Après la construction du MSBE, la précision du modèle a été évaluée par rapport à des calculs RPR sur des configurations de milieux uniformes et non uniformes. Les résultats ont montré d'excellents accords entre les deux types de calculs.

L'ensemble de la modélisation hybride (modèles de bandes et approches RPR) a été ensuite mis en œuvre sur le cas d'épreuve FIRE II pour calculer les luminances et les puissances sur la ligne d'arrêt pour quatre points de trajectoire. La comparaison des résultats avec ceux obtenus avec des calculs RPR est très satisfaisante avec notamment des écarts relatifs de moins de 2 % sur les luminances cumulées. Au niveau des temps de calcul, la méthode déterministe utilisée dans les deux cas pour résoudre l'ETR sur la ligne d'arrêt (30 cellules) donne un facteur 60 en faveur de la modélisation hybride. Ce facteur est d'autant plus grand que le nombre de cellules à traiter est important, car l'utilisation des modèles de bandes permet de s'affranchir des calculs à haute résolution des spectres moléculaires très coûteux en temps de calcul.

- Afin de réaliser des calculs de rayonnement en 3D, la dernière partie a été consacrée à l'implémentation du modèle hybride de propriétés radiatives dans le solveur radiatif ASTRE, basé sur une approche de Monte Carlo. Ce travail a nécessité la mise en place d'une méthodologie numérique adaptée à la fois aux systèmes traités en modèles de bandes et aux raies atomiques traitées en raie par raie.

L'implémentation a été validée sur une configuration plans tangents par rapport à une méthode de lancer de rayons. Les résultats obtenus sur les puissances et les luminances pour différents types de contributions (systèmes moléculaires optiquement épais, continua, raies atomiques...) et pour l'ensemble des processus ont permis de valider les procédures statistiques implémentées dans le code. Ce sont les raies atomiques qui requièrent le plus de tirs pour obtenir des calculs convergés. Ceci vient du fait que le choix des nombres d'onde affectés aux tirs s'appuie sur les densités de probabilité des profils des raies privilégiant ainsi les zones spectrales optiquement épaisses qui ne participent que partiellement au transfert.

⁷Le caractère optiquement non mince ou mince des systèmes a été déterminé en évaluant les épaisseurs optiques rencontrées sur le cas FIRE II pour les cas à haute pression et à basse température

Le solveur ASTRE a été mis en œuvre avec le modèle hybride sur le cas test FIRE II pour une configuration 3D. Des calculs sur un secteur angulaire de la couche de choc⁸ ont été réalisés pour des temps de calcul très raisonnables (< 30 min sur 64 processeurs pour une convergence inférieure au pourcent). La comparaison des calculs 3D à des calculs avec l'approximation plans tangents montrent des écarts de l'ordre de 10-15 % sur les niveaux de flux à la paroi.

Enfin, un calcul de démonstration a été réalisé pour montrer la faisabilité d'utiliser le code ASTRE avec le modèle hybride de propriétés radiatives pour déterminer les puissances volumiques sur toute la couche de choc (100000 cellules) et les flux pariétaux sur tout le bouclier avec des niveaux de précision et des temps de calcul acceptables.

Au terme de ces travaux, on peut lister un certain nombre de perspectives qui peuvent être regroupées en quatre thèmes : données spectroscopiques, modélisation cinétique de l'écoulement, interaction écoulement/rayonnement et optimisation des transferts radiatifs.

- Tout d'abord, au niveau de la base de données spectroscopiques des continua, certains mécanismes, dont la contribution est non négligeable dans les problèmes de rentrée, sont traités avec des données (sections efficaces disponibles dans la littérature) partielles ou peu représentatives des milieux hautes températures. C'est notamment le cas du photodétachement et de la photoionisation moléculaire. Des travaux devraient être envisagés pour étudier ces mécanismes afin de compléter les bases de données spectroscopiques.

Par ailleurs, la formulation des propriétés radiatives des continua établie par niveau électronique ne peut être que partiellement mise en œuvre compte tenu du fait que les données spectroscopiques relatives aux continua sont rarement disponibles par niveau électronique (elles sont généralement sommées sur les états bas et/ou hauts des transitions). Des travaux seraient nécessaires pour disposer de données plus détaillées.

Nos travaux ont mis en évidence l'importance de la zone spectrale du VUV dans les problèmes de rentrée atmosphérique terrestre. Cette zone spectrale a été relativement peu étudiée expérimentalement en émission. Des expériences permettraient de valider les données spectroscopiques utilisées actuellement.

- Concernant la modélisation cinétique des écoulements de rentrée, les outils CFD mis en œuvre pour générer les champs aérothermochimiques que nous avons utilisés sont basés sur une approche multi-température. Pour s'affranchir de ce modèle de peuplement, en particulier pour les niveaux électroniques, qui ne semble pas convenir pour le cas de chocs forts, il paraît important de disposer d'une cinétique de type électronique spécifique en ne tenant compte que des aspects collisionnels dans un premier temps. L'outil (type collisionnel-radiatif (CR) mais sans le rayonnement) pourrait être utilisé d'abord en post-traitement des calculs CFD avant d'être intégré en partie, ou en totalité si nécessaire, dans le code CFD.

Un autre aspect important à prendre en compte au niveau de la cinétique est la modélisation de la catalycité de la paroi. Ce point a été très peu abordé dans ce travail, mais

⁸À partir des champs aérothermochimiques 2D axisymétriques, la simulation des transferts radiatifs dans un seul secteur angulaire (obtenu par rotation du maillage 2D autour de l'axe d'axisymétrie) avec des conditions de symétrie, est représentatif de toute la couche de choc.

nous avons vu que l'absorption dans la couche limite, en particulier celle de la zone VUV du spectre, est importante. Or, cette absorption dépend en partie de la concentration de N_2 qui est très sensible à la catalycité de la paroi. Dans le cas où l'appareil de rentrée à une paroi ablative, il y a, en plus des problèmes de catalycité, celui de l'ablation qui peut modifier considérablement la composition du gaz au voisinage de la paroi.

De manière générale, outre la méthode de résolution de l'ETR, la précision des calculs de transferts radiatifs repose sur la connaissance des propriétés radiatives du milieu. Ces propriétés dépendent en grande partie de la composition chimique du milieu et du peuplement des niveaux d'énergie de chaque espèce. Le degré de confiance accordé aux schémas cinétiques mis en œuvre dans les problèmes rentrées est donc primordial pour prédire précisément la charge radiative reçue par le véhicule.

- Une première stratégie de couplage entre le rayonnement et l'écoulement peut être envisagée conformément au schéma de la figure IV.17 avec tout d'abord, un couplage de type (b) avec un modèle collisionnel-radiatif sur les niveaux électroniques. Les termes de peuplement par rayonnement pourraient être incorporés dans les équations de population à la place des facteurs d'échappement habituellement utilisés dans la littérature. Ceci nécessite néanmoins de mettre en place une procédure de calcul des termes de production $(dn_s^i/dt)_{rad}$. Par ailleurs, le couplage (a) peut être également envisagé en insérant simplement la puissance radiative au niveau de l'équation de l'énergie totale, comme fait généralement dans la littérature, ou en insérant (suivant le modèle multi-température) des termes sources de puissances radiatives relatifs aux différents réservoirs d'énergie dans les différentes équations de bilan d'énergie. Ceci nécessite au préalable de mettre en place une procédure de calcul, lors de la résolution de l'ETR, permettant de déterminer ces termes sources.

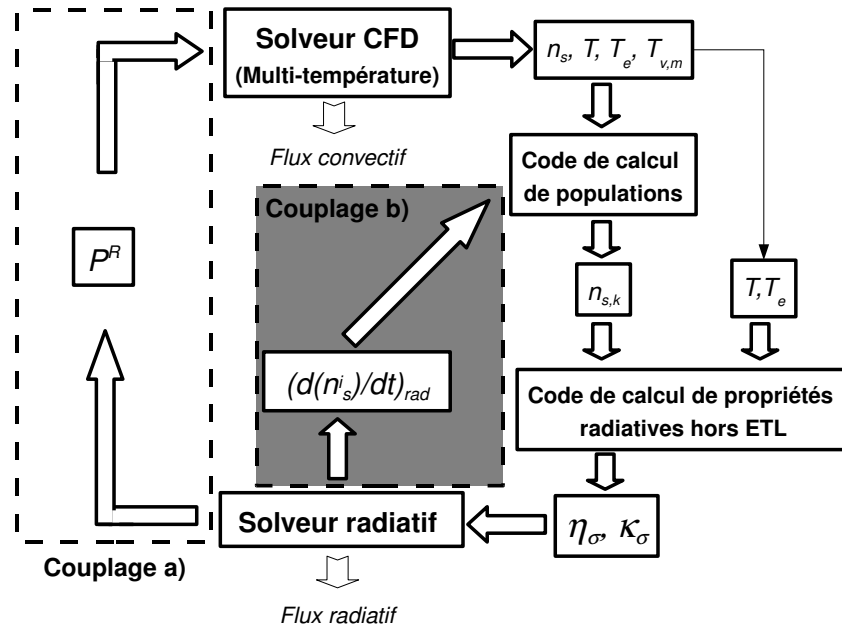


FIG. IV.17: Méthodologie de couplage envisagée avec un solveur CFD multi-température et un modèle CR.

La dernière perspective concerne l'optimisation du traitement des raies atomiques dans le code ASTRE. En effet, la procédure mise en place dans cette étude privilégie le tirage des

nombre d'onde dans les zones spectrales optiquement épaisses pour des tirs qui sont alors peu utiles en terme de transfert même s'ils coûtent peu cher en temps CPU (trajectoire des tirs très courte). Un travail consistant à utiliser un profil biaisé suivant l'épaisseur optique des cellules de départ a été effectué afin d'accélérer la convergence des calculs. Cette méthodologie n'a cependant pas donné de résultats probants en première analyse. Ceci mériterait d'être approfondi.

Annexe A

Fonctions de partition

Les fonctions de partition sont utilisées pour calculer les populations des états rovibroniques lorsque les modes de stockage d'énergie interne sont à l'équilibre. Dans cette situation, pour les atomes ou les ions, le peuplement des niveaux d'énergie est simplement caractérisé par une température électronique, et pour les molécules, le peuplement des niveaux est de plus caractérisé par une température de rotation et une température de vibration. Les fonctions de partition des particules dépendent de ces températures de peuplement.

Une partie des travaux antérieurs de Deron [152] et de Babou [119] effectués au laboratoire EM2C ont porté sur la détermination des fonctions de partition dans des conditions à l'ETL et hors ETL. On donne dans cette annexe, les expressions et hypothèses générales qui permettent d'obtenir les fonctions de partition des espèces contribuant aux transferts radiatifs dans les plasmas d'air (N_2 , O_2 , NO , N_2^+ , N , O , N^+ , O^+).

Le calcul des fonctions de partition fait intervenir des sommes sur l'ensemble des niveaux des particules. Le temps CPU relatif à ces calculs peuvent être importants lors de calculs massifs de propriétés radiatives pour des configurations multidimensionnelles avec des maillages importants. Pour déterminer plus rapidement ces fonctions de partition lors de calculs de rayonnement, on s'intéresse également dans cette annexe à la tabulation des fonctions de partition atomiques et des fonctions de partition par états électroniques des molécules utilisées notamment dans les relations III.129, III.135 et III.134.

A.1 Fonctions de partition atomiques

La fonction de partition d'un atome (ou d'un ion) s'écrit en fonction de la température électronique T_{el} , mais aussi des températures de translation T des lourds et T_e des électrons ainsi que de la composition des particules chargées $C_{\pm}$ selon l'expression suivante :

$$Q_{at}(T_{el}, T, T_e, C_{\pm}) = \sum_{i=1}^{n_lim} g_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_b T_{el}}\right), \quad (A.1)$$

où g_i est la dégénérescence du niveau d'énergie E_i . La dépendance en température T , T_e et composition $C_{\pm}$ intervient au travers du paramètre n_lim qui est le nombre limite de niveaux pris en compte dans le calcul de la fonction de partition. En effet, les séries de

Rydberg atomiques, aboutissant à différents niveaux d'énergie de l'ion, contiennent une infinité de niveaux qui entraîne la divergence de Q_{at} s'ils sont tous pris en compte dans la sommation sur les niveaux. Pour pallier ce problème, on tient compte de l'abaissement du potentiel lié aux interactions électrostatiques locales, ce qui permet de fixer un nombre limite de niveaux à prendre en compte. L'énergie limite E_{n_lim} que peut atteindre la particule avant de s'ioniser est alors de :

$$E_{n_lim} = E_{ioni} - API, \quad (A.2)$$

où E_{ioni} est l'énergie d'ionisation et API l'abaissement du potentiel qui dépend des températures de translation des particules et des densités des particules chargées.

Les énergies des niveaux électroniques d'une particule sont répertoriées dans les bases de données spectroscopiques TOPBASE [153] et NIST [81]. Cependant, ces bases ne sont pas complètes pour des énergies proches de la limite d'ionisation. Une complétion est alors réalisée suivant un modèle hydrogéoïde [154] tel que :

$$E_n = E_{ioni} - \frac{(\alpha + 1)^2}{n^2} E_{ioni}(H), \quad (A.3)$$

avec α le degré d'ionisation de l'espèce considérée et $E_{ioni}(H)$ l'énergie d'ionisation de l'hydrogène. Le nombre effectif limite de niveau n_{eff} se déduit des relations A.2 et A.3 :

$$n_{eff} = (\alpha + 1) \sqrt{\frac{E_{ioni}(H)}{API(\alpha)}}. \quad (A.4)$$

Pour une réaction d'ionisation $A(\alpha) \longrightarrow A(\alpha + 1) + e^-$, l'abaissement du potentiel peut s'écrire :

$$API(\alpha) = E(\alpha + 1) + E(1) - E(\alpha) \quad (A.5)$$

$$= -\frac{(\alpha + 1)e^2}{4\pi\epsilon_0\rho_D}, \quad (A.6)$$

où $E(\alpha)$ est l'énergie potentielle de la particule de degré d'ionisation α et ρ_D le rayon de Debye. Dans le cas où la translation des particules lourdes n'est pas en équilibre avec celle des électrons, cette longueur caractéristique est donnée par [155] :

$$\rho_D = \left[\frac{\epsilon_0 k_b}{e^2 \left(\sum_{i=1}^{N_{ion}} \frac{q_i^2 n_i}{T} + \frac{q_e^2 n_e}{T_e} \right)} \right]^{-1/2}, \quad (A.7)$$

où N_{ion} est le nombre d'espèces ionisées, n_i , n_e les densités de l'ion i et des électrons, et q_i , q_e leurs degrés d'ionisation. Les températures T et T_e sont respectivement celles qui caractérisent la translation des espèces lourdes et la translation des électrons. En considérant l'électroneutralité locale du milieu et le fait que les espèces, dans notre application, ne sont ionisées au plus qu'une seule fois, on obtient la relation simplifiée :

$$\rho_D = \left[\frac{\epsilon_0 k_b}{e^2 n_e} \left(\frac{T T_e}{T + T_e} \right) \right]^{-1/2}. \quad (A.8)$$

Ainsi, on obtient la dépendance :

$$n_{eff} = f(\rho_D(T, T_e, n_e)). \quad (A.9)$$

La paramétrisation d'une fonction de partition atomique donnée par la relation A.1 se simplifie alors par :

$$Q_{at}(T_{el}, T, T_e, C_{\pm}) = Q_{at}(T_{el}, \rho_D(T, T_e, n_e)). \quad (A.10)$$

Le nombre de niveau effectif limite n'étant pas entier par définition, une légère variation de température peut entraîner la prise en compte d'un niveau fortement dégénéré et créer des discontinuités des fonctions de partition. Pour éviter ce problème, une procédure de lissage a été mise en œuvre par Deron [152]. Pour simplifier la paramétrisation, nous avons tabulé

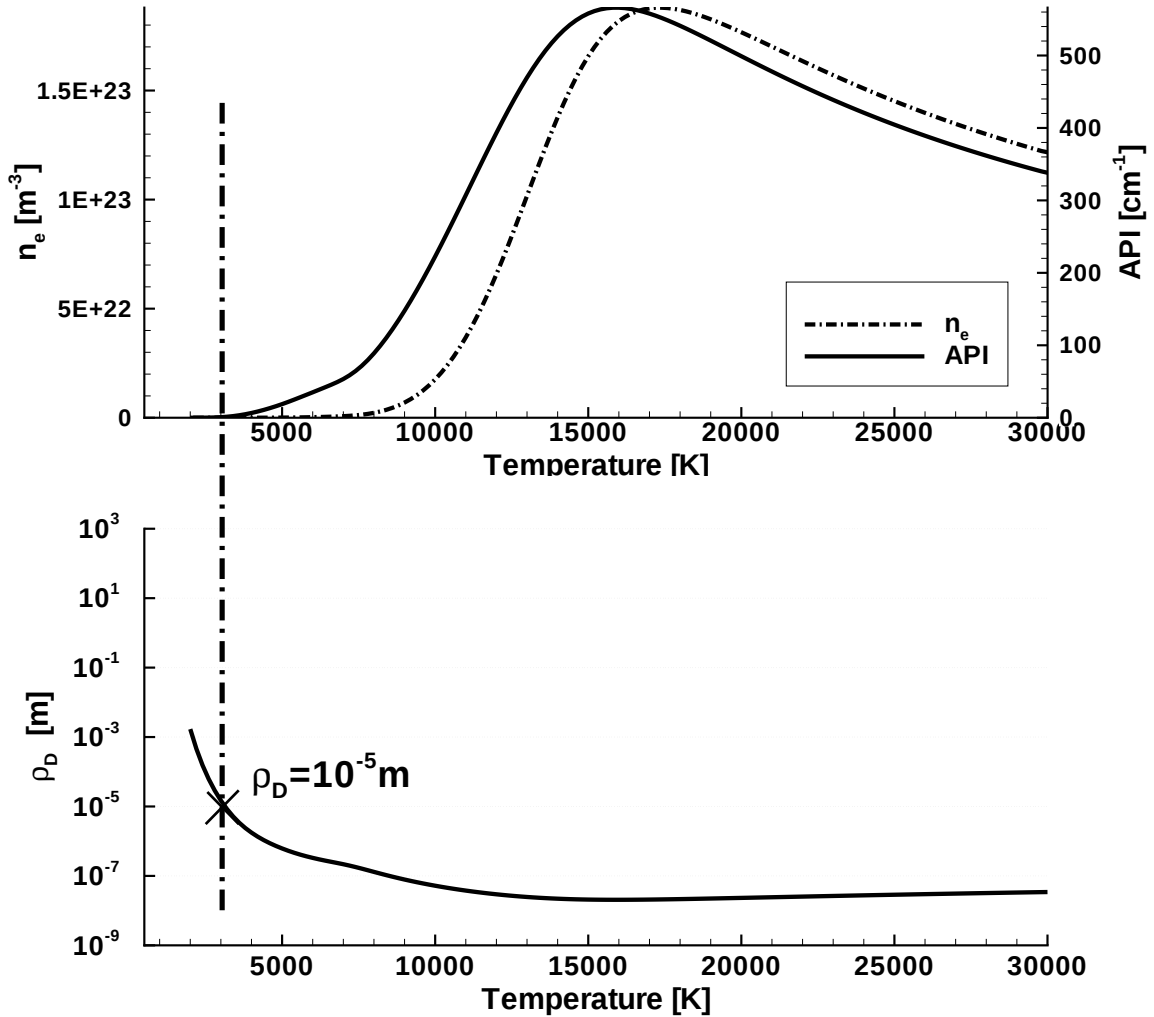


FIG. A.1: Évolution de la densité électronique, de l'abaissement du potentiel et du rayon de Debye d'un plasma d'air en fonction de la température à l'ETL sous 1 bar.

les fonctions de partition atomiques uniquement en fonction de T_{el} et de ρ_D . Nous avons étudié les évolutions du rayon de Debye pour définir l'intervalle à prendre à compte pour la tabulation. La figure A.1 du bas montre à titre d'exemple, l'évolution du rayon de Debye dans un plasma d'air à 1 bar à l'ETL en fonction de la température. La figure du haut

permet de faire la correspondance avec l'abaissement du potentiel et la densité électronique du plasma. Les rayons de Debye supérieurs à 10^{-5} m sont observés à des températures inférieures à 3000 K pour lesquelles le calcul des fonctions de partition atomiques est peu sensible à la valeur de l'abaissement du potentiel qui est l'ordre de 1 cm^{-1} . Ensuite, plus la température du plasma augmente et plus la densité électronique augmente par ionisation des particules ce qui fait baisser le rayon de Debye et donc augmenter l'abaissement du potentiel. Ce comportement est observé entre 3000 et 15000 K. Ensuite par effet de dilution, on observe une évolution contraire (la température monte et la densité électronique diminue ce qui entraîne une légère augmentation du rayon de Debye). Le rayon de Debye est alors minoré par 10^{-8} m pour toute la gamme de température étudiée. Des estimations du rayon de Debye dans des cas de rentrée ont été effectuées et ont montré que ce rayon restait supérieur à 10^{-9} m. L'intervalle de variation de ρ_D à prendre en compte pour déterminer l'abaissement de potentiel dans nos applications et donc les fonctions de partition atomiques est $[10^{-9}, 10^{-5} \text{ m}]$. Les fonctions de partition de N , O , N^+ et O^+ ont été tabulées sur cette intervalle du rayon de Debye avec un pas logarithmique et sur une grille de température T_{el} indiquée par la figure III.24 en prenant $T_{ve} = T_{el}$.

A.2 Fonctions de partition diatomiques

On s'intéresse dans cette section aux fonctions de partition des molécules diatomiques présentes dans les plasmas d'air de rentrée qui contribuent aux transferts radiatifs par émission et/ou absorption. L'énergie interne E_{nvJ} d'une molécule diatomique peut s'écrire :

$$E_{nvJ} = E_{el}(n) + E_{vib}(n, v) + E_{rot}(n, J) + E_{inter}(n, v, J), \quad (\text{A.11})$$

où n , v et J sont les nombres désignant respectivement l'état électronique, vibrationnel et rotationnel de la molécule, $E_{el}(n)$ est l'énergie électronique dépendant du nombre n , $E_{vib}(n, v)$ une partie de l'énergie vibrationnelle dépendant exclusivement de n et de v , $E_{rot}(n, J)$ une partie de l'énergie rotationnelle dépendant exclusivement de n et de J et $E_{inter}(n, v, J)$ l'énergie d'interaction entre la vibration et la rotation. On a négligé dans l'expression ci-dessus les effets de structure fine et de Λ doubling, ce qui est légitime dans le calcul des fonctions de partition à des températures pas trop basses. L'énergie rovibrationnelle est calculée à partir du développement de Dunham donnant pour un niveau électronique :

$$E_{vib}(n, v) + E_{rot}(n, J) + E_{inter}(n, v, J) = \sum_{lm} Y_{lm} \left(v + \frac{1}{2} \right)^l J^m (J+1)^m, \quad (\text{A.12})$$

où les coefficients Y_{lm} correspondent au signe près aux constantes spectroscopiques w_e , $w_e x_e$, $w_e y_e, \dots$, D_e , $B_e, \dots$, α_e , $\beta_e, \dots$ présentes dans les relations suivantes :

$$E_{el}(n) = T_e \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} E_{vib}(n, v) = & \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 \\ & + \omega_e z_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^4 + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$E_{rot}(n, J) = B_e (J(J+1)) - D_e (J(J+1))^2 + \dots \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} E_{inter}(n, v, J) = & -\alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right) J(J+1) + \gamma_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 J(J+1) + \dots \\ & -\beta_e \left(v + \frac{1}{2} \right) (J(J+1))^2 - g_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 (J(J+1))^2 \dots \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Si le milieu est caractérisé par une température électronique T_{el} , une température vibrationnelle T_v et une température rotationnelle T_r , la fonction de partition d'une molécule se calcule via la relation :

$$Q_{mol}(T_{el}, T_v, T_r) = \frac{1}{\sigma} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[g_n \exp \left(- \frac{hcE_{el}(n)}{k_b T_{el}} \right) \sum_{v=0}^{v_{max}} \left[\exp \left(- \frac{hc(E_{vib}(n, v) - \epsilon_0)}{k_b T_v} \right) \right. \right. \\ \left. \left. \times \sum_{J=0}^{J_{max}} (2J+1) \exp \left(- \frac{hc(E_{rot}(n, v, J) + E_{inter}(n, v, J))}{k_b T_r} \right) \right] \right], \quad (A.17)$$

où g_n est la dégénérescence de l'état électronique électronique n , ϵ_0 l'énergie du plus bas niveau rovibronique. σ vaut 1 pour les molécules hétéronucléaires et 2 pour les homonucléaires afin de tenir compte des poids statistiques liés au spin nucléaire en moyenne. La procédure de détermination des nombres maximums v_{max} et J_{max} est expliquée dans la référence [119]. Dans la relation A.17, l'énergie d'interaction vibration/rotation est associée au mode rotationnel de la molécule. Il a été montré dans la Réf.[119] qu'en associant cette énergie au mode vibrationnel, l'écart observé sur les fonctions de partition entre ces deux modélisations est négligeable. Babou [119] a mis en place une procédure de calcul des fonctions de partition à deux températures (T_{ve} une température d'équilibre des modes électroniques et vibrationnels, T_r une température de rotation) et a réalisé ensuite une tabulation des fonctions de partition de N_2 , O_2 , NO , N_2^+ et NO^+ à ces deux températures.

Dans notre application, la population des états électroniques des molécules peut être décrite à l'aide d'une troisième température T_{el} ou à l'aide d'un modèle collisionnel-radiatif. Il est donc nécessaire pour utiliser les relations III.129, III.135 et III.134 de réaliser une tabulation des fonctions de partition par état électronique de chaque espèce moléculaire en fonction des deux températures T_v et T_r . Si la répartition des niveaux électroniques est caractérisée par une température électronique T_{el} , la fonction de partition totale à trois température peut alors être déterminée en effectuant simplement la sommation de l'ensemble des fonctions de partition rovibrationnelles associées à chaque niveau électronique n affectées de leur poids respectif $\exp(-E_{el}(n)/k_b T_{el})$ (cf. relation II.15).

Pour le calcul des fonctions de partition totales, le nombre de niveaux pris en compte ainsi que toutes les données spectroscopiques nécessaires aux calculs des expressions A.13, A.14, A.15, A.16 sont dans la Réf. [104]. Babou *et al.* [104] ont montré par ailleurs que le nombre de niveaux pris en compte dans leurs calculs était suffisamment élevé pour estimer correctement (à 5% près) les fonctions de partition totales. Cependant, les états supérieurs des transitions électroniques des systèmes de N_2 (VUV) n'ont pas été pris en compte dans ces travaux. Les données spectroscopiques nécessaires pour calculer les fonctions de partition rovibrationnelles associées à ces états sont données dans le tableau A.1. Les données non disponibles pour D_e et β_e ont été estimées en utilisant les formules suivantes [156] :

$$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2} \quad (A.18)$$

$$\beta_e = D_e \left(\frac{8\omega_e x_e}{\omega_e} - \frac{5\alpha_e}{B_e} - \frac{\alpha_e^2 \omega_e}{24B_e^3} \right). \quad (A.19)$$

¹Aucune transition de NO^+ n'est prise en compte dans nos calculs de rayonnement. Cependant, il a été utile de tabuler la fonction de partition de cette espèce qui intervient dans le calcul de la photoionisation de NO . Ceci n'a pas été fait pour O_2^+ .

L'énergie de dissociation E_{diss} des états $c'_4{}^1\Sigma_u^+$, $c_3{}^1\Pi_u$, $o_3{}^1\Pi_u$, référencée par rapport au fond du puits de potentiel de l'état fondamental, a été calculée en utilisant la relation préconisée par Herzberg [156] :

$$E_{diss} = \frac{w_e^2}{4\omega_e x_e}. \quad (\text{A.20})$$

TAB. A.1: Coefficients de Dunham relatifs aux états électroniques de N_2 (VUV) pour le calcul des fonctions de partition.

	états électroniques N_2				
	$b^1\Pi_u$	$b'^1\Sigma_u^+$	$c'_4{}^1\Sigma_u^+$	$c_3{}^1\Pi_u$	$o_3{}^1\Pi_u$
Référence Y_{i0} et Y_{i1}	[157]	[157]	[157]	[157]	[157]
$v_{max}Y_{i0}$ et Y_{i1}	19	28	8	4	4
Y_{00}	6.531	0.289	0.727	3.898	4.236
$Y_{10} = \omega_e$	641.76	759.31	2166.7	2198.4	1966.5
$Y_{20} = -\omega_e x_e$	21.67	-3.4044	-13.345	-25.6	-10.88
$Y_{30} = \omega_e y_e$	-1.413	0.017768	-0.29393		
$Y_{40} = \omega_e z_e$	0.02286	-1.7768e-3			
$Y_{01} = B_e$	1.387	1.1591	1.9285	1.976	1.7305
$Y_{11} = -\alpha_e$	-0.01424	-0.01044	-0.0196	-0.038	-0.0275
$Y_{02} = -D_e$ [158]	29e-6				5.3e-6
$Y_{12} = -\beta_e$					
T_e [158]	101675	104498	104519	104476	105869
Référence E_{diss}	[159]	[159]	[158]	[158]	[158]
E_{diss}	16677.65	24185.09	87946.6	47196.4	88858.57
r_e [158]	1.284	1.4439	1.1080	1.1163	1.1784

Annexe B

Description succincte du code hydrodynamique CelHyo2D

On décrit brièvement dans cette annexe le code CelHyo2D [160, 24, 25, 55, 28, 10] développé par l'ONERA pour simuler des écoulements hypersoniques de rentrée atmosphérique. On s'intéresse en particulier au cas de la rentrée terrestre. On expose successivement et succinctement le système d'équations à résoudre et la modélisation physico-chimique de l'écoulement en ce qui concerne les modèles cinétiques, les modèles de relaxation, les principaux modèles de couplages chimie/vibration disponibles dans le code et les propriétés de transport. Pour plus de détails sur les schémas numériques et la modélisation physico-chimique, le lecteur est invité à consulter les références données précédemment.

B.1 Système d'équations

Le code CelHyo2D résout avec une approche en volumes finis les équations de Navier-Stokes s'appuyant sur les hypothèses (H) énoncées dans la section I.3.1 et en prenant en compte le déséquilibre thermique de la couche de choc par une approche multi-température : une température T pour caractériser la translation et la rotation des particules lourdes, deux températures T_{v,N_2}, T_{v,O_2} respectivement pour la vibration des molécules N_2 et O_2 et une température T_e pour décrire la translation des électrons libres. On notera que l'énergie d'excitation électronique des particules lourdes est négligée.

De plus, concernant le traitement du gaz d'électrons libres, l'approche de Coquel et Marmignon [24, 25, 55] est utilisée pour exprimer un système d'équations sous forme conservative, en remplaçant l'équation de bilan de l'énergie du gaz d'électrons libres par une équation portant sur une variable entropique (cf. relation I.29). Cette modélisation ne permet cependant pas de prendre en compte les phénomènes dissipatifs (conduction, diffusion) qui ont lieu au sein du gaz d'électrons. Ces derniers sont alors négligés.

En prenant les mêmes notations que celles du chapitre I, les équations résolues sont les suivantes [10] :

- Équation de bilan de la masse de chaque espèce s :

$$\partial_t \rho_s + \partial_{xj} (\rho_s u_0^j) = \partial_{xj} (\rho D_s \partial_{xj} y_s) + \dot{w}_s \quad (\text{B.1})$$

- Équation de conservation de quantité de mouvement totale :

$$\partial_t(\rho u_0^i) + \partial_{x^j}(\rho u_0^i u_0^j) + \partial_{x^j} p \delta_{ij} = \partial_{x^j} \left[\mu (\partial_{x^j} u_0^i + \partial_{x^i} u_0^j) - \frac{2}{3} \mu \partial_{x^k} u_0^k \delta_{ij} \right] \quad (\text{B.2})$$

- Équation de bilan de l'énergie de vibration de l'espèce m (m pouvant désigner N_2 ou O_2) :

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho_m e_{v,m}) + \partial_{x^j}(\rho_m e_{v,m} u_0^j) &= \partial_{x^j}(\lambda_{v,m} \partial_{x^j} T_{v,m}) + \partial_{x^j}(\rho e_{v,m} D_m \partial_{x^j} y_m) \\ &+ \Omega_m^{v-t} + \Omega_m^{v-v} + \Omega_m^{v-e} \\ &+ \dot{w}_m e_{v,m} - \dot{w}_m^+(e_{v,m}^d - e_{v,m}) + \dot{w}_m^-(e_{v,m}^r - e_{v,m}) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

où $\dot{w}_m = \dot{w}_m^+ + \dot{w}_m^-$ et $\Omega_m^{v-t}, \Omega_m^{v-v}, \Omega_m^{v-e}$ sont respectivement les termes de relaxation entre la vibration de l'espèce m et : (i) la translation des particules lourdes (échange VT), (ii) la vibration des autres espèces diatomiques (échange VV) et la translation des électrons libres (échange V-e).

- Équation de conservation de l'entropie du gaz d'électrons libres :

$$\partial_t(\rho s_e) + \partial_{x^j}(\rho s_e u_0^j) = \frac{\gamma_e - 1}{\gamma_e} \frac{\rho s_e}{p_e} (\Omega_e^{e-t} + \Omega_e^{e-v} + \Omega_e^{e-r}) \quad (\text{B.4})$$

où $\Omega_e^{e-t}, \Omega_e^{e-v}, \Omega_e^{e-r}$ sont respectivement les termes de relaxation entre la translation des électrons libres et : (i) la translation des particules lourdes (échange e-T), (ii) la vibration des espèces diatomiques (échange e-V) et la rotation des espèces diatomiques (échange e-R).

- Équation de bilan de l'énergie totale :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho E + \partial_{x^j}(\rho H u_0^j) &= \partial_{x^j} \left[\lambda_{eq} \partial_{x^j} T + \sum_m (\lambda_{v,m} \partial_{x^j} T_{v,m}) \right] \\ &+ \partial_{x^j} \left[u_0^i \mu (\partial_{x^j} u_0^i + \partial_{x^i} u_0^j) - \frac{2}{3} \mu u_0^i \partial_{x^k} u_0^k \delta_{ij} \right] \\ &+ \partial_{x^j} \left(\rho \sum_s h_s D_s \partial_{x^j} y_s \right) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

où λ_{eq} désigne la conductivité thermique des degrés de liberté à l'équilibre (translation, rotation et vibration des espèces moléculaires supposées à l'équilibre thermique vibrationnel) et $\lambda_{v,m}$ celle de la vibration de l'espèce m (N_2 ou O_2).

Le système d'équations présenté dans ce paragraphe ne prend pas en compte le rayonnement. Dans le cadre de la thèse de Soubrié [10], un couplage hydrodynamique/rayonnement a été réalisé en insérant sous forme de terme source la puissance radiative dans l'équation de bilan de l'énergie totale.

B.2 Modélisation physico-chimique

B.2.1 Cinétique chimique

B.2.1.1 Schéma réactionnel

Dans le cadre de la rentrée atmosphérique terrestre, les espèces prises en compte dans le code CelHyo2D sont N_2 , O_2 , NO , N , O , N_2^+ , O_2^+ , NO^+ , N^+ , O^+ et e^- . Plusieurs schémas réactionnels sont implémentés dans le solveur pour déterminer les taux de production $\dot{w}_s$ de chaque espèce. On peut citer les deux principaux qui sont le schéma de Park [68] et celui de Dunn et Kang [70].

Pour les réactions d'ionisation par impact d'électrons, les taux de réactions de Wilson [161] peuvent être également utilisés. Pour tenir compte du déséquilibre entre la translation des espèces lourdes et celle des électrons libres, les constantes de vitesses sont pilotées par une température égale à $T^s T_e^{1-s}$ où s est un paramètre « utilisateur » pouvant varier entre 0 et 0,5.

Concernant les taux des réactions de dissociation/recombinaison et d'échanges, des modèles de couplage sont implémentés pour tenir compte de l'influence de la vibration sur les constantes de vitesse. Ceci fait l'objet de la section B.2.2.1.

B.2.1.2 Catalycité à la paroi

La catalycité à la paroi peut être simulée de trois manières différentes :

- condition de non-catalycité : la paroi n'influe pas sur la composition chimique du gaz. Autrement dit le taux de production des espèces chimiques est nul à la surface. Cette condition minimise le flux convectif à la paroi.
- condition de paroi totalement catalytique : c'est le cas opposé au précédent. La surface joue le rôle de catalyseur en favorisant les réactions de recombinaison. La fraction massique des atomes à la paroi est alors nulle. Cette condition maximise le flux convectif.
- condition de paroi partiellement catalytique : les constantes de vitesse de recombinaison à la paroi dépendent de la température de paroi et d'un coefficient de recombinaison compris entre 0 (paroi non catalytique) et 1 (paroi catalytique).

B.2.2 Couplage chimie/vibration

B.2.2.1 Influence de la vibration sur la chimie

Suivant le type de réaction, trois types de couplage chimie/vibration sont généralement considérés dans la littérature : le couplage chimie/vibration pour les réactions de dissociation (CVD), le couplage pour les réactions de recombinaison (CVR) et le couplage pour les réactions d'échange (CVCE).

Dans une approche multi-température, ces trois types de couplages se résument à définir un paramètre :

$$Z(T, T_v) = \frac{k(T, T_v)}{k^\circ(T)}, \quad (\text{B.6})$$

qui est le rapport entre les constantes de vitesses de réaction dans le cas hors équilibre et à l'équilibre.

De nombreux modèles de couplages sont implémentés dans le solveur CelHyo2D pour déterminer les facteurs Z . L'ensemble de ces modèles sont décrits dans la thèse de William [28] avec les références associées.

Pour le cas du couplage CVD, les modèles de Park, de Teanor-Marrone (préférentiel et non préférentiel), de Losev, de Kuznetsov, etc. . . , sont implémentés. À titre illustratif, la figure B.1 montre l'évolution sur ligne d'arrêt des températures et des concentrations N_2 , O_2 et NO issus de calculs 1D¹ pour un cas de rentrée atmosphérique terrestre pour ces différents modèles de couplage CVD. Le cas de rentrée simulé correspond au point de trajectoire de la sonde RAM-C II [3] à 71 km (vitesse 7659 m/s, température et pression amont 216 K et 4.8 Pa). On peut voir sur ces figures la sensibilité des températures et des concentrations à ces différents modèles. Des écarts de température de l'ordre de 2000-3000 K sont observés dans la zone hors d'équilibre. Pour les concentrations, l'effet est en particulier visible pour O_2 .

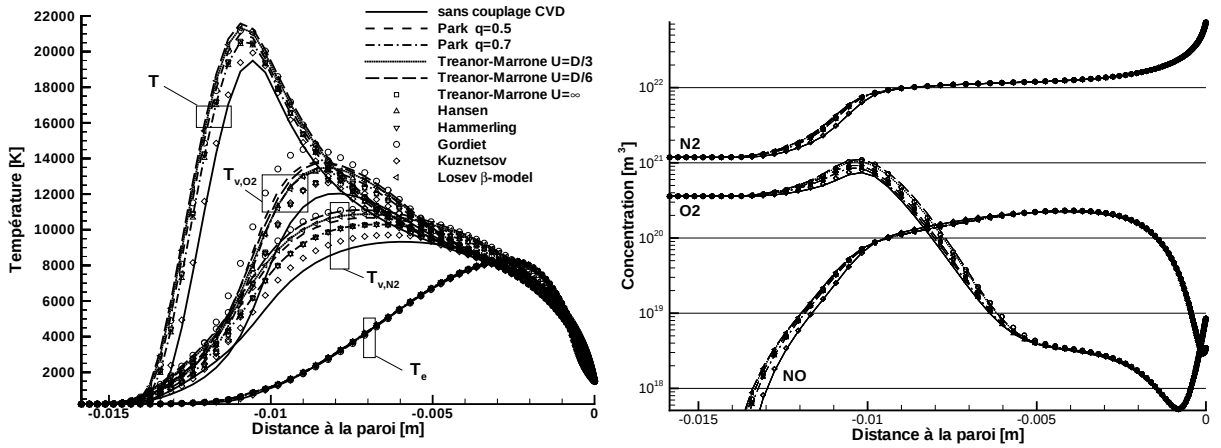


FIG. B.1: Évolution des températures (à gauche) et des concentrations (à droite) le long de la ligne d'arrêt de la sonde RAM-C II pour différents modèles de couplage CVD. Point de trajectoire à 71 km.

Le couplage CVR dans le code CelHyo2D se résume simplement à fixer un paramètre Z pour les réactions de recombinaison égal au paramètre Z pour la dissociation :

$$Z_{recomb}(T, T_v) = Z_{diss}(T, T_v). \quad (\text{B.7})$$

tel que :

$$\frac{k_f(T_v, T)}{k_r(T_v, T)} = \frac{Z_{diss}(T, T_v)k_f(T)}{Z_{recomb}(T, T_v)k_r(T)} = \frac{Z_{diss}(T, T_v)}{Z_{recomb}(T, T_v)}K_{eq}(T) = K_{eq}(T) \quad (\text{B.8})$$

¹Le solveur CelHyo2D dispose également d'un outil 1D appelé CASL [28] permettant de calculer les couches de choc de rentrée atmosphérique de manière à ce que les résultats obtenus sur la ligne d'arrêt soient similaires à ceux obtenus à partir d'une simulation en 2D.

où $K_{eq}(T)$, k_f , k_r désignent respectivement la constante d'équilibre à T et les constante de vitesse directe (dissociation) et inverse (recombinaison) de la réaction considérée.

Enfin, pour le couplage CVCE, le modèle de Macheret est disponible.

On notera que lorsqu'un type de couplage n'est pas pris en compte cela revient numériquement à prendre $Z=1$ pour les réactions en question.

B.2.2.2 Influence de la chimie sur la vibration

Le couplage entre la chimie et la vibration se caractérise par l'effet de l'excitation vibrationnelle sur les taux de réaction mais aussi par l'effet de la chimie sur l'énergie vibrationnelle créée ou perdue lors d'une réaction de dissociation/recombinaison ou même d'échange. On parle alors de couplage CVDV (couplage vibration/dissociation/vibration), CVRV (couplage vibration/recombinaison/vibration) et CVCEV (vibration/échange de charge/vibration). Ils sont représentés par les deux derniers termes du membres de droite de l'équation B.3.

Le couplage CVDV est traité dans CelHyo2D à partir de la relation I.57 rappelée ici [28] :

$$e_{v,m}^d(T, T_{v,m}) = -\frac{R}{k_b M_m} \frac{\partial \ln(Z(T, T_{v,m}))}{\partial (1/k_b T_{v,m})} + e_{v,m}(T_{v,m}) \quad (\text{B.9})$$

qui permet d'exprimer pour chaque modèle CVD, la valeur de l'énergie moyenne perdue par dissociation $e_{v,m}^d(T, T_{v,m})$. Si ce type de couplage n'est pas considéré, alors $e_{v,m}^d(T, T_{v,m}) = e_{v,m}(T_{v,m})$.

Le couplage CVRV peut être activé dans CelHyo2D² : cela se résume simplement à prendre $e_{v,m}^r(T, T_{v,m}) = e_{v,m}^d(T, T_{v,m})$. Dans le cas contraire, on utilise $e_{v,m}^r(T, T_{v,m}) = e_{v,m}^d(T, T)$.

Pour le cas de couplage CVCEV, la procédure utilisée est la même que pour le couplage CVDV dans le cas de la destruction de la molécule par réaction d'échange et le couplage CVRV dans le cas de la création de la molécule par réaction d'échange.

B.2.3 Modèle de relaxation

Dans les équations de bilan d'énergie de vibration et d'entropie du gaz d'électrons libres, des termes d'échanges entre les différents réservoirs d'énergie sont à prendre en compte pour modéliser la relaxation dans le gaz. Dans le code CelHyo2D, les échanges VT (vibration-translation des espèces lourdes), VV (vibration-vibration), e-T (translation électrons libres-translation des espèces lourdes), e-R (translation électrons libres-rotation) et e-V (translation électrons libres-vibration) sont pris en compte. On décrit brièvement dans les paragraphes suivants comment ces termes sont traités.

- Échanges VT :

²La prise en compte du couplage CVRV nécessite d'utiliser un modèle CVDV.

Les termes d'échanges s'écrivent sous la forme de Landau-Teller [162] :

$$\Omega_m^{v-t} = \rho_m \frac{e_{v,m}(T) - e_{v,m}(T_{v,m})}{\tau_m^{v-t}} \quad (\text{B.10})$$

où τ_m^{v-t} est le temps de relaxation de la molécule m pour les échanges VT. Pour un mélange de plusieurs constituants, ce temps se définit à partir des temps de relaxation pour chaque type de partenaire collisionnel s tel que :

$$\frac{1}{\tau_m^{v-t}} = \sum_{s=1}^{n_s} \frac{x_s}{\tau_{m,s}^{v-t}} \quad (\text{B.11})$$

Différents temps de relaxation $\tau_{m,s}^{v-t}$ sont implémentés dans CelHyo2D dont les plus couramment utilisés dans la littérature, ceux de Park [68] basés sur le formalisme proposé par Millikan et White [163].

- Échanges VV :

Pour les échanges VV, l'expression utilisée est celle préconisée par Thivet [13] et Stupochenko [164]. Leur modélisation repose également sur des temps de relaxation VV entre les différentes espèces moléculaires m . Ces temps peuvent être déterminés par CelHyo2D suivant plusieurs modèles dont celui de Losev [165], le plus complet actuellement dans la littérature et proposé sur un large domaine de température allant de 300 à 40000 K.

- Échanges e-T :

Le terme d'échange e-T s'écrit suivant le formalisme d'Appleton et Sutton [166, 22] :

$$\Omega_{e-t} = \sum_{s \neq e} S_s^{e-t} = 3kn_e M_e (T - T_e) \sum_{s \neq e} \frac{\nu_{es}^*}{M_s} \quad (\text{B.12})$$

Il est basé sur une fréquence de collision effective ν_{es}^* des électrons avec l'espèce s . Cette fréquence s'exprime en fonction d'une section efficace de collision dépendant de la température des électrons. Dans le code CelHyo2D, une distinction est faite lors du calcul de ces sections entre un partenaire collisionnel neutre (données tirées de [167]) ou un partenaire collisionnel ionique. La section efficace tient compte dans ce dernier cas de l'existence du champ électrique [19]).

- Échanges e-V :

Le terme d'échange e-V s'écrit comme la somme des termes d'échange (sous la forme de Landau-Teller [162]) relatifs à chaque espèce moléculaire :

$$S_{e-v} = \sum_m S_m^{e-v} = \rho_m \frac{e_{v,m}(T_e) - e_{v,m}(T_{v,m})}{\tau_m^{e-v}} \quad (\text{B.13})$$

où τ_m^{e-v} désigne le temps de relaxation de la molécule pour un échange e-V. Ces temps de relaxation sont calculés dans CelHyo2D à partir des expressions proposée par Bourdon [168] pour N_2 et par Park et Lee [169] pour O_2 et NO . Les échanges e-V pour les autres espèces moléculaires sont négligés.

- Échanges e-R :

Le terme d'échange e-R est déterminé à partir de la somme des termes d'échanges relatifs à chaque espèce moléculaire :

$$\Omega_{e-r} = \sum_m \Omega_m^{e-r} \quad (\text{B.14})$$

où la somme est faite sur les espèces N_2 , O_2 et NO . Les échanges e-R avec les autres espèces sont négligés.

Ω_m^{e-r} est calculé à partir des travaux de Koura [170] pour les espèces moléculaires non polarisées N_2 et O_2 et de Matsuzaki [171] pour l'espèce polarisée NO

B.2.4 Propriétés de transport

B.2.4.1 Viscosité

Dans le code CelHyo2D, la viscosité du mélange gazeux repose sur le modèle d'Armaly et Sutton [172] tel que :

$$\mu = \sum_s \frac{\mu_s}{1 + \sum_{r \neq s} \frac{x_r}{x_s} \Phi_{sr} \left(\frac{M_s}{M_s + M_r} \right) \left(\frac{5}{3A_{sr}^*} + \frac{M_r}{M_s} \right)} \quad (\text{B.15a})$$

$$\text{avec } \Phi_{sr} = \left(F_{sr} + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} B_{sr} \right)^2 / \sqrt{8 \left(1 + \frac{M_s}{M_r} \right)} \quad (\text{B.15b})$$

où A_{sr}^* , B_{sr} et F_{sr} sont des constantes dépendant du type d'interaction entre les espèces r et s (atome et son propre ion, molécule et électrons, etc). Le terme μ_s désigne la viscosité d'un gaz pur. Son expression repose sur la relation d'interpolation de Blöttner *et al.* [173] :

$$\mu_s = 0,1 \exp \left[(A_s^\mu \ln T + B_s^\mu) \ln T + C_s^\mu \right] \quad [kg.m^{-1}.s^{-1}] \quad (\text{B.16})$$

dans laquelle les coefficients A_s^μ , B_s^μ et C_s^μ dépendent de l'espèce considérée. Ils sont tirés des travaux de Gupta *et al.* [174] et sont valables pour des températures variant entre 1000K et 30000K. Pour les espèces chargées, les valeurs sont données à la pression du gaz d'électrons p_{em} définie par la relation :

$$p_{em} = 0,0975 (T_e/10^3)^4 \quad [atm] \quad (\text{B.17})$$

Pour toute valeur de p_e inférieure à p_{em} , la correction suivante doit être appliquée (p_e exprimée en atmosphères) :

$$\frac{\mu_s(p_e)}{\mu_s(p_{em})} = \frac{1}{\ln \Lambda(p_e)} = \frac{2}{\ln \left[2.09 \cdot 10^{-2} \left(\frac{T_e}{1000 p_e^{1/4}} \right)^4 + 1.52 \left(\frac{T_e}{1000 p_e^{1/4}} \right)^{8/3} \right]} \quad (\text{B.18})$$

La viscosité des électrons libres est négligée dans l'équation de conservation de l'entropie des électrons libres mais leur contribution est prise en compte dans le calcul de la viscosité du mélange.

B.2.4.2 Conductivité thermique

Deux modèles sont disponibles dans CelHyo2D pour calculer les conductivités thermiques λ_{eq} et $\lambda_{v,m}$ des espèces lourdes (la conductivité thermique des électrons est par ailleurs négligée).

- Le premier modèle considère pour l'ensemble des modes d'énergie à l'équilibre thermique et définit la conductivité thermique λ_{eq} à l'aide du nombre de Prandtl Pr qui est supposé constant dans l'écoulement³ :

$$\lambda_{eq} = \mu C_{peq} / Pr \quad (B.19)$$

Le terme C_{peq} désigne la capacité calorifique à pression constante pour les modes d'énergie correspondants à l'équilibre tel que :

$$C_{peq} = C_{veq} + \frac{R}{M} \quad (B.20a)$$

$$C_{veq} = \sum_s y_s C_{v_{t,s}} + \sum_m y_m C_{v_{r,m}} + \sum_{m, T_{v,m}=T} y_m C_{v_{v,m}} \quad (B.20b)$$

où M désigne la masse molaire du mélange, définie par $M = \sum_s x_s M_s$

Pour les espèces moléculaires m en déséquilibre thermique vibrationnel, le modèle de Monchick *et al.* [175] donne les conductivités $\lambda_{v,m}$ pour le mode vibrationnel.

- Dans le second modèle, CelHyo2D évalue la conductivité thermique associée à chaque mode d'énergie. La conductivité thermique de translation $\lambda_{t,s}$ d'une espèce neutre s dans le mélange gazeux est calculée par la formule de Wilke [176] tandis que la conductivité thermique de rotation $\lambda_{r,m}$ et de vibration d'une espèce moléculaire m dans le mélange gazeux est déterminée selon le modèle de Monchick *et al.* [175].

Le code CelHyo2D calcule alors la conductivité thermique λ_{eq} via la relation :

$$\lambda_{eq} = \sum_{s \neq e} \lambda_{t,s} + \sum_m \lambda_{r,m} + \sum_{m, T_{v,m}=T} \lambda_{v,m} \quad (B.21)$$

B.2.4.3 Diffusion

Deux modèles sont également disponibles dans CelHyo2D pour calculer le coefficient de diffusion D_s de chaque espèce s hormis pour les électrons pour lesquels la diffusivité est négligée.

- Dans le premier modèle, le coefficient de diffusion est supposé identique pour toutes les espèces neutres. Son expression repose sur un nombre de Lewis Le constant⁴ dans l'écoulement tel que :

$$(D_s)_{s=n} = D_D = \lambda_{eq} Le / (\rho C_{peq}), \quad \forall n \text{ espèce neutre} \quad (B.22)$$

³Pour l'air, la valeur du nombre de Prandtl varie dans la littérature entre 0,7 et 0,75. Les calculs sont généralement fait avec la valeur de 0,72.

⁴Les variations du nombre de Lewis avec la température sont assez mal connues [28] et une valeur comprise entre 1,0 et 1,4 est en général utilisée pour l'air à l'équilibre. Dans les calculs présentés dans le chapitre IV une valeur de 1.2 a été utilisée).

Les ions et les électrons sont liés par le champ électrique induit. Dans un gaz partiellement ionisé sans courant électrique, cet effet est modélisé par le principe de diffusion ambipolaire [15] :

$$(D_s)_{s=ion} = 2D_D \quad (\text{B.23})$$

- Dans le second modèle, le coefficient de diffusion suit la loi de Gubernatis [177] :

$$(D_s)_{s=n} = \frac{1 - x_s}{\sum_{r \neq s, r \neq e} \frac{x_r}{\mathcal{D}_{sr}}}, \quad \forall n \text{ espèce neutre} \quad (\text{B.24})$$

Les coefficients de diffusion binaire $\mathcal{D}_{sr}$ suivent la loi d'interpolation en température et en pression extrait des travaux de Gupta *et al.* [174] dont le domaine de validité s'étend jusqu'à $30000K$.

Bibliographie

- [1] Chanetz B., Pot T., Le Sant Y., and Leplat M. Study of the mars sample return orbiter in the hypersonic wind tunnel R5Ch. In *Proceedings of the 2nd symposium international - AAAF - Véhicules et systèmes de rentrée atmosphérique, Arcachon (France)*. Office national d'études et de recherches aérospatiales, Châtillon, France, 2001.
- [2] Extrait de l'adresse : http://fr.wikipedia.org/wiki/Crew_Space_Transportation_System.
- [3] E.S. Cross and Jones W.L. Electrostatic probe measurements of plasma parameters for two reentry flight experiments at 25000 feet per second. Technical Report NASA TN D-6617, 1973.
- [4] D. L. Cauchon. Radiative heating results from the Fire 2 flight experiment at a reentry velocity of 11.4 kilometers per second. Technical Report NASA TM X-1402, 1972.
- [5] D. B. Lee and W. D. Goodrich. The aerothermodynamic environment of the Apollo command module during superorbital entry. Technical Report NASA TN D-6792, 1972.
- [6] G. Tchuén. *Modélisation et simulation numérique des écoulements à haute enthalpie : Influence du déséquilibre électronique*. Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille I, 2003.
- [7] D.R. Olynick, W. D. Henline, F. Moffett, C. L. Hartung, and G. V. Candler. Comparisons of coupled radiative Navier-Stokes flow solutions with the project Fire II flight data. *AIAA Paper 1994-1955*, 1994.
- [8] C. Park. Stagnation-point radiation for Apollo 4. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 18, 2004.
- [9] V.A. Gorelov, A. Kireev, S. Shilenkov, and Surzhikov S. Prediction of nonequilibrium ionization and emission at superorbital flight in air. *AIAA Paper 2004-2380*, 2004.
- [10] T. Soubrié. *Prise en compte de l'ionisation et du rayonnement dans la modélisation des écoulements de rentrée terrestre et martienne*. Thèse de doctorat, École Doctorale de l'École Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2006.
- [11] J.D. Anderson, Jr. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw-Hill, 1989.
- [12] C. Park. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. Wiley, New-York, 1990.

- [13] F. Thivet. *Modélisation et calcul d'écoulements hypersoniques en déséquilibre chimique et thermodynamique*. Thèse de doctorat, École Doctorale de Centrale Paris, 1992.
- [14] G.S.R. Sarma. Physico-chemical modelling in hypersonic flow simulation. *Progress in Aerospace Sciences*, 36 :281–349, 2000.
- [15] J. H. Lee. Basic governing equations for the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles. *AIAA Paper 1984-1729*, 1984.
- [16] Y. B. Zel'dovich and Y. P. Raizer. *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. Academic Press, 1966.
- [17] B. Graille, T.E Magin, and M. Massot. Kinetic theory of plasmas : Translational energy. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, Accepté pour publication*, 19, 2009.
- [18] S. Surzhikov, I. Sharikov, M. Capitelli, and G. Colonna. Kinetic models of non-equilibrium radiation for strong air shock waves. *AIAA Paper 2006-586*, 2006.
- [19] G. Candler. *The Computation of Weakly Ionized Hypersonic Flows in Thermo-Chemical Nonequilibrium*. Phd thesis, Stanford University, 1988.
- [20] P.A. Gnoffo, R.N. Gupta, and J.L. Shinn. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium. Technical Report NASA-TP-2867, 1989.
- [21] L. C. Hartung. *Nonequilibrium Radiative Heating Prediction Method for Aeroassist Flowfields with Coupling to Flowfield Solvers*. Phd thesis, North Carolina State University, 1991.
- [22] G.W. Sutton and A. Sherman. *Engineering Magnetohydrodynamics*. McGraw-Hill Series In Mechanical Engineering, 1965.
- [23] M. Mitchner and C. H. Kruger. *Partially Ionized Gases*. John Wiley and Sons, 1973.
- [24] F. Marmignon, C. et Coquel. Simulation numérique d'écoulements faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique. Technical Report ONERA Report RSF. no 6/1929AY, 1993.
- [25] C. Coquel, F. et Marmignon. Simulation numérique d'écoulements en déséquilibre thermochimique et faiblement ionisés. Technical Report ONERA Report RTS. no 12/1929AY, 1995.
- [26] M. Panesi, T. Magin, A. Bourdon, A. Bultel, and O. Chazot. Collisional radiative modeling in flow simulations. *Lecture Series on Non-equilibrium Gas Dynamics, from Physical Models to Hypersonic Flights*, (RTO-AVT-VKI), 2008.
- [27] C. O. Johnston. *Nonequilibrium shock-layer radiative heating for Earth and Titan entry*. Phd thesis, Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University, 2006.

- [28] J. William. Étude des processus physico-chimiques dans les écoulements détendus à hautes enthalpie : Application à la soufflerie à arc F4. Technical Report Note technique NT-2000-5, ONERA, 2000.
- [29] M. Capitelli, C.M. Ferreira, B.F. Gordiets, and A.I. Osipov. *Plasma Kinetics in Atmospheric Gases*. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics , Vol. 31, 2000.
- [30] C. Park. Rotational relaxation of N₂ behind a strong shock wave. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 18, 2004.
- [31] T. Gökçen. Computation of nonequilibrium radiating shock layers. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9, 1995.
- [32] G. Colonna, M. Tuttafesta, M. Capitelli, and D. Giordano. NO formation in one-dimensional nozzle air flow with state-to-state nonequilibrium vibrational kinetics : The influence of $O_2(v)+N=NO+O$ reaction. *AIAA Paper 1999-3685*, 1999.
- [33] M. Capitelli, G. Colonna, C. Gorse, and F. Esposito. State to state non-equilibrium vibrational kinetics : Phenomenological and molecular dynamics aspects. *AIAA Paper 1999-3568*, 1999.
- [34] G. Colonna, I. Armenise, D. Bruno, and M. Capitelli. Reduction of state-to-state kinetics to macroscopic models in hypersonic flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 20(3), 2006.
- [35] E. V. Kustova and A. Chikhaoui. Kinetic modelling of radiative reacting gas flow under strong nonequilibrium conditions. *Chemical Physics*, 255(1) :59 – 71, 2000.
- [36] E. V. Kustova, A. Aliat, and A. Chikhaoui. Vibration-electronic and chemical kinetics of non-equilibrium radiative diatomic gas flows. *Chemical Physics Letters*, 344(5-6) :638 – 646, 2001.
- [37] E. V. Kustova, E. A. Nagnibeda, T. Yu. Alexandrova, and A. Chikhaoui. On the non-equilibrium kinetics and heat transfer in nozzle flows. *Chemical Physics*, 276(2) :139 – 154, 2002.
- [38] I.V. Adamovich, S.O. Macheret, J.W. Rich, and C.E. Treanor. Vibrational-Relaxation and dissociation behind shock-waves Part 1 : Kinetic rate models. *AIAA Journal*, 33(6) :1064–1069, 1995.
- [39] I.V. Adamovich, S.O. Macheret, J.W. Rich, and C.E. Treanor. Vibrational-relaxation and dissociation behind shock-waves Part 2 : Master equation modeling. *AIAA Journal*, 33(6) :1070–1075, 1995.
- [40] I.V. Adamovich, S.O. Macheret, J.W. Rich, and C.E. Treanor. Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 12(1) :57–65, 1998.
- [41] S.O. Macheret and I.V. Adamovich. Semiclassical modeling of state-specific dissociation rates in diatomic gases. *Journal of Chemical Physics*, 113(17) :7351–7361, 2000.

- [42] D. Rapp and T. Kassal. Theory of vibrational energy transfer between simple molecules in nonreactive collisions. *Chemical Reviews*, 69(1) :61–102, 1969.
- [43] E. H. Kerner. Note on the forced and damped oscillation in quantum mechanics. *Canadian Journal of Physics*, 36(3) :371–377, 1958.
- [44] C. E. Treanor. Vibrational energy transfer in high energy collisions. *Journal of Chemical Physics*, 43(2) :532–536, 1965.
- [45] A. Zelechow, D. Rapp, and T. E. Sharp. Vibrational–vibrational–translational energy transfer between two diatomic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 49(1) :286–299, 1968.
- [46] A Lagana, E Garcia, and L Ciccarelli. Deactivation of vibrationally excited nitrogen molecules by collision with nitrogen-atoms. *Journal of Physical Chemistry*, 91(2) :312–314, 1987.
- [47] E. Josyula and W. F. Bailey. The physics of vibration-dissociation coupling in hypersonic flows. *AIAA Paper 2001-2733*, 2001.
- [48] E. Josyula and W. F. Bailey. Vibration-dissociation coupling using master equations in nonequilibrium hypersonic blunt-body flow. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 15, 2001.
- [49] E. Josyula and W. F. Bailey. Vibrational population enhancement in nonequilibrium hypersonic nozzle flows. *AIAA Paper 2003-3778*, 2003.
- [50] S. M. Chauveau, J. D. Kelley, C. O. Laux, and C. H. Kruger. Vibrationally specific collisional-radiative model for nonequilibrium air plasmas. *AIAA Paper 2002-2229*, 2002.
- [51] S. M. Chauveau, J. D. Kelley, C. O. Laux, and C. H. Kruger. Vibrationally specific collisional-radiative modelling of nonequilibrium effects in air plasmas. *AIAA Paper 2003-137*, 2003.
- [52] L. Pierrot, L. Yu, R. J. Gessman, C. O. Laux, and C. H. Kruger. Collisional-radiative modeling of nonequilibrium effects in nitrogen plasmas. *AIAA Paper 1999-3478*, 1999.
- [53] A. Orsini, P. Rini, V. Taviani, D. Fletcher, E. V. Kustova, and E. A. Nagnibeda. State-to-state simulation of nonequilibrium nitrogen stagnation-line flows : Fluid dynamics and vibrational kinetics. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 22(3) :390–398, 2008.
- [54] L. Walpot. *Development and application of a hypersonic flow solver*. Phd thesis, Delft University, 2002.
- [55] F. Marmignon, C. et Coquel. Simulation numérique d’écoulements en déséquilibre thermochimique et faiblement ionisés. Technical Report ONERA Report TRS. no 14/1929AY, 1997.
- [56] O. Knab, T.H. Gogel, H.-H. Frühauf, and E.W. Messerschmid. CVCV-model validation by means of radiative heating calculations. *AIAA Paper 1995-0623*, 1995.

- [57] M. P. Netterfield. Validation of a Navier-Stokes code for thermochemical non-equilibrium flows. *AIAA Paper 1992-2878*, 1992.
- [58] R. D. Kay and T. Gogel. Coupled radiation computations for the comet nucleus sample return mission. *AIAA Paper 1994-2091*, 1994.
- [59] A. Broc. *Prise en compte du rayonnement dans les écoulements hyperenthalpiques*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 1998.
- [60] A. Aliat. *Modélisation d'un écoulement hypersonique de CO en déséquilibre physico-chimique et radiatif derrière une onde de choc*. Thèse de doctorat, Université de Provence, 2002.
- [61] V.A. Gorelov, L. A. Kildushova, and A. Kireev. Ionization particularities behind intensive shock waves in air at velocities of 8-15 km/s. *AIAA Paper 1994-2051*, 1994.
- [62] A. Bultel, BG. Cheron, A. Bourdon, O. Motapon, and IF Schneider. Collisional-radiative model in air for Earth re-entry problems. *Physic of Plasmas*, 13(4), 2006.
- [63] C. Park. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air. *AIAA Paper 1987-1547*, 1987.
- [64] S. Sharma. Assessment of nonequilibrium radiation computation methods for hypersonic flows. Technical Report NASA TM-103994, 1993.
- [65] W. C. Gardiner. *Combustion Chemistry*. Springer-Verlag, 1984.
- [66] J. L. Shinn, J. N. Moss, and A. L. Simmonds. Viscous shock layer heating analysis for the shuttle winward plane finite recombination rates. *AIAA Paper 1982-0842*, 1982.
- [67] O. P. Shatalov. Recommended data on rate constants of physical and chemical processes in N-O atoms system. *Moscow State University - Russia, Institut of Mechanics AVOGADRO Center*.
- [68] C. Park. Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions, I : Earth entries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 7(3), 1993.
- [69] C Park, RL Jaffe, and H Partridge. Chemical-kinetic parameters of hyperbolic Earth entry. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 15(1) :76–90, 2001.
- [70] M. G. Dunn and S. W. Kang. Theoretical and experimental studies of re-entry plasmas. Technical Report NASA CR-2232, 1973.
- [71] P. Hammerling, J. D. Teare, and B. Kivel. Theory of radiation from luminous shock waves in nitrogen. *Physics of Fluids*, 2(4) :422–426, 1959.
- [72] P.V. Marrone and C.E. Treanor. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels. *Physics of Fluids*, 6(9), 1963.
- [73] O. P. Shatalov and S. A. Losev. Modeling of diatomic molecules dissociation under quasistationary conditions. *AIAA Paper 1997-2579*, 1997.
- [74] S. O. Macheret and J. W. Rich. Nonequilibrium dissociation rates behind strong shock-waves - classical-model. *Chemical Physics*, 174(1) :25–43, 1993.

- [75] N. M Kuznetsov. Kinetics of molecules dissociation in molecular gas. *Sov. Journal of Theory*, 7(11), 1971.
- [76] R. A. Allen, P. H. Rose, and J. C. Camm. Nonequilibrium and equilibrium radiation at super-satellite re-entry velocity. Technical Report AVCO Research Report 156, 1962.
- [77] J.T. Howe and J.R. Viegas. Solutions of the ionized radiating shock layer, including reabsorption and foreign species effects, and stagnation region heat transfer. NASA TR R-159, 1963.
- [78] H. Hoshizaki and L. E. Lasher. Convective and radiative heat transfer to an ablating body. *AIAA Journal*, 6(8) :1441–1449, 1968.
- [79] R. Goulard. Premiminary estimates of radiative transfer effects on detached shock layers. *AIAA Journal*, 2(3) :494–502, 1964.
- [80] Jr Anderson, J.D. An engineering survey of radiating shock layers. *AIAA Journal*, 7(9) :1665–75, 1969.
- [81] NIST. Cette base peut être consultée à l'adresse : http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd.
- [82] E. E. Whiting, C. Park, Y. Liu, J. O. Arnold, and J. A. Paterson. NEQAIR96 nonequilibrium and equilibrium radiative transport and spectra program : User's manual. Technical Report NASA RP 1389, 1996.
- [83] A. J. Smith, A. Wood, J. Dubois, M. Fertig, B. Pfeffer, and L. Marraffa. Plasma radiation database parade V2.2 final report issue 3 ESTEC contract 11148/94/NL/FG. Technical Report TR28/96 Issue 3, 2006.
- [84] C.O. Laux. Radiation and nonequilibrium collisional-radiative models. *Lecture Series on Physico-Chemical Modeling of High Enthalpy and Plasma Flows*, (VKI), 2002.
- [85] M. Lino da Silva and M. Dudeck. Arrays of radiative transition probabilities for CO₂-N₂ plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 102 :348–386, 2006.
- [86] S. Chauveau, M. Y. Perrin, Ph. Rivière, and A. Soufiani. Contributions of diatomic molecular electronic systems to heated air radiation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 72(4) :503 – 530, 2002.
- [87] S. Chauveau, C. Deron, M.-Y. Perrin, Ph. Rivière, and A. Soufiani. Radiative transfer in LTE air plasmas for temperatures up to 15,000 K. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 77(2) :113 – 130, 2003.
- [88] Y. Babou, Ph. Rivière, Perrin M.-Y., and A. Soufiani. Spectroscopic data for the prediction of radiative transfer in CO₂-N₂ plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(1-2) :89 – 108, 2009.
- [89] M.-Y. Perrin, Ph. Rivière, and A. Soufiani. Radiation database for Earth and Mars entries. *Lecture Series on Non-equilibrium Gas Dynamics, from Physical Models to Hypersonic Flights*, (RTO-AVT-VKI), 2008.

- [90] T. E. Magin, L. Caillault, A. Bourdon, and C. O. Laux. Nonequilibrium radiative heat flux modeling for the Huygens entry probe. *Journal of Geophysical Research-Planets*, 111(E7), 2006.
- [91] C. Park. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles. *AIAA Paper 1984-1730*, 1984.
- [92] S. T. Surzhikov. Electronic excitation in air and carbon dioxide gas. *Lecture Series on Non-equilibrium Gas Dynamics, from Physical Models to Hypersonic Flights*, (RTO-AVT-VKI), 2008.
- [93] T. Holstein. Imprisonment of resonance radiation in gases. *Physical Review*, 72(12) :1212–1233, 1947.
- [94] S. Surzhikov. Computing system for solving radiative gasdynamic problems of entry and reentry space vehicles. *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP533, Lisbon, Portugal*, 2003.
- [95] O. Rouzaud, L. Tessé, T. Soubrié, A. Soufiani, Ph. Rivière, , and D. Zeitoun. Influence of radiative heating on a Martian orbiter. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 22 :10–19, 2008.
- [96] Ph. Rivière, M.-Y. Perrin, and A. Soufiani. Line-by-line and statistical narrow-band calculations of radiative transfer in some atmospheric entry problems. In *Proceedings of the first international workshop on radiation of high temperature gases in atmospheric entry, Lisbon*, pages 189–196. ESA SP-533, 2003.
- [97] S. Surzhikov. Random models of atomic lines for calculation of radiation transfer in laser supported- and shock waves. *AIAA Paper 1997-2367*, 1997.
- [98] Y. Babou, Ph. Rivière, M.-Y. Perrin, and A. Soufiani. Prediction of radiative flux distribution over the front shield of a vehicle entering martian atmosphere - Contribution to TC3. In *Proceedings of the second international workshop on radiation of high temperature gases in atmospheric entry, Rome, Italy*. ESA SP-629, 2006.
- [99] J. Taine and J.-P. Petit. *Transferts thermiques - Introduction aux sciences des transferts*. Dunod, 3ème édition, 2003.
- [100] T. H. Gogel, M. Dupuis, and E. W. Messerschmid. Radiation transport calculation in high enthalpy environments for two-dimensional axisymmetric geometries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 8 :744–750, 1994.
- [101] S. Chauveau. *Constitution de bases de données spectroscopiques relatives à un plasma d'air. Application au calcul de transfert radiatif*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2001.
- [102] C.O. Johnston, B.R. Hollis, and K. Sutton. Spectrum modeling for air shock-layer radiation at Lunar-return conditions. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 45(5), 2008.
- [103] TOPBASE. Cette base peut être consultée à l'adresse : <http://cdsarc.u-strbg.fr>.

- [104] Y. Babou, Ph. Rivière, M.-Y. Perrin, and A. Soufiani. High-temperature and none-equilibrium partition function and thermodynamic data of diatomic molecules. *International Journal of Thermophysics*, 2007.
- [105] Ph. Rivière. Systematic semi-classical calculations of Stark broadening parameters of NI, OI, NII, OII multiplets for modelling the radiative transfer in atmospheric air mixture plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73(1) :91–110, 2002.
- [106] A.Y. Chang, M.D. Di Rosa, and R.K. Hanson. Temperature dependence of collision broadening and shift in the NO $A \leftarrow X$ (0,0) band in the presence of argon and nitrogen. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 47 :375–390, 1992.
- [107] P.K. Falcone, R.K. Hanson, and C.H. Kruger. Tunable diode laser measurements of the band strength and collision halfwidths of nitric oxide. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 29(3) :205–221, 1983.
- [108] R.G. Breene. Spectral line broadening in air molecule systems. *Applied Optics*, 6 :141–147, 1967.
- [109] D. Mihalas and Weibel-Mihalas B. *Foundations of Radiation Hydrodynamics*. Dover Publications, INC, Mineloa, 1999.
- [110] D. R. Churchill, B. H. Armstrong, R. R. Johnston, and K. G. Muller. Absorption coefficients of heated air : A tabulation to 24000 K. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 6 :371–442, 1966.
- [111] A.Kh. Mnatsakanyan. Photodissociation and photoionization of diatomic molecules at high temperatures. *Teplofizika Vysokikh Temperatur*, 6(2) :236–241, 1967.
- [112] H.A. Kramers. . *Philosophical Mag*, 46() :836, 1923.
- [113] J.R. Stallcop and K.W. Billman. Analytical formulae for the inverse bremsstrahlung absorption coefficient. *Plasma Physics*, 16() :1187–1189, 1974.
- [114] R.C. Mjolsness and H.M. Ruppel. Contribution of inverse neutral bremsstrahlung to the absorption coefficient of heated air. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 7() :423–427, 1967.
- [115] D.L. Cauchon. Radiative heating results from the FIRE II flight experiment at a reentry velocity of 11.4km/s. Technical Report TM X-1402, NASA, July 1967.
- [116] D.L. Cauchon, C.W. McKee, and E.S. Cornette. Spectral measurements of gas-cap radiation during project FIRE flight experiments at reentry velocities near 11.4 kilometers per second. Technical Report TM X-1389, NASA, October 1967.
- [117] E.S. Cornette. Forebody temperatures and calorimeter heating rates measured during project FIRE II reentry at 11.35 kilometers per second. Technical Report TM X-1305, NASA, November 1966.

- [118] F. Mazoué. Fire II radiation heat flux computation, Test Case 6 - ESA/ESTEC AOES. Technical report, Proceedings of the second international workshop on radiation of high temperature gases in atmospheric entry, 2006.
- [119] Y. Babou. *Transferts radiatifs dans les plasmas de mélanges CO₂-N₂ : Base de données spectroscopiques, étude expérimentale et application aux rentrées atmosphériques*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2007.
- [120] Schack. *Z. Tech. Physik*, 5(266), 1924.
- [121] H. C. Hottel. *Trans. Am. Inst. Chem. Engrs*, 19(173), 1927.
- [122] W. M. Elsasser. Heat transfer by infrared radiation in the atmosphere. *Harvard Meteorological Series No. 6*, Cambridge, Mass. : Harvard University Press, 1943.
- [123] H. Mayer. *Method of Opacity Calculations, LA-647*, Los Alamos, 1947.
- [124] R. M. Goody. A statistical model for water-vapour absorption. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 78(165), 1952.
- [125] H.C. Hottel and A.F. Sarofim. *Radiative transfer*. McGraw-Hill, N.Y., 1967.
- [126] M.K. Denison and B.W. Webb. The spectral line-based Weighted-Sum-of-Gray-Gases model in nonisothermal nonhomogeneous media. *Journal of Heat Transfer*, 117 :359–365, 1995.
- [127] Ph. Riviere, A. Soufiani, M. Y. Perrin, H. Riad, and A. Gleizes. Air mixture radiative property modelling in the temperature range 10,000-40,000 K. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 56(1) :29–45, Jul 1996.
- [128] R.M. Goody and Y.L. Yung. *Atmospheric Radiation*. Oxford Univ. Press, New York, NY, 1989.
- [129] R. Levi Di Leon and J. Taine. A fictive gas-method for accurate computations of low-resolution IR gas transmissivities : Application to the 4.3 μm CO₂ band . *Rev. Phys. Appl.*, 21 :825–831, 1988.
- [130] L. Pierrot. *Développement, étude critique et validation de modèles de propriétés radiatives infrarouges de CO₂ et H₂O à haute température. Application au calcul des transferts dans des chambres aéronautiques et à la télédétection*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 1997.
- [131] J. Taine and A. Soufiani. Gas IR radiative properties : From spectroscopic data to approximate models. *Adv heat transfer*, 33 :295–414, 1999.
- [132] P.B. Taylor and P.J. Foster. The total emissivities of luminous and non-luminous flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 17(12) :1591–1605, 1974.
- [133] A. Coppalle and P. Vervisch. The total emissivities of high-temperature flames. *Combustion and flame*, 43(1-3) :101–108, 1983.
- [134] Ch. Deron, Ph. Rivière, M.-Y. Perrin, and A. Soufiani. Modelling radiative properties of LTE air atmospheric plasmas. In *Proceedings of the 15th International Conference on Gas Discharges and their Applications, Toulouse*, pages 145–148, 2004.

- [135] S.J. Young. Nonisothermal band model theory. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 18 :1–28, 1977.
- [136] A. Soufiani, F. André, and J. Taine. A fictitious-gas based statistical narrow-band model for IR long-range sensing of H₂O at high temperature. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73(2-5) :339 – 347, 2002.
- [137] C.B. Ludwig, W. Malkmus, J.E. Reardon, and J.A.L. Thomson. Handbook of infrared radiation from combustion gases. Technical Report NASA SP-3080, Washington DC, 1973.
- [138] W. Malkmus. Random Lorentz band model with exponential-tailed S⁻¹ line intensity distribution function. *J. Opt. Soc. Am.*, 57 :323–329, 1967.
- [139] S.B. Fels. Simple strategies for inclusion of Voigt effects in infrared cooling rate calculations. *Appl. Opt.*, 18 :2634–2637, 1979.
- [140] X. Zhu. An improved Voigt line approximation for the calculations of equivalent width and transmission. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 39 :421–427, 1988.
- [141] A. Soufiani and J. Taine. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-K model for H₂O and CO₂. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 40(4) :987–991, Mar 1997.
- [142] Ph. Rivière, S. Langlois, A. Soufiani, and J. Taine. An approximate data base of H₂O infrared lines for higt temperature applications at low resolution. Statistical narrow-band model parameters. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 53(2) :221–234, Feb 1995.
- [143] Ph. Rivière, A. Soufiani, and J. Taine. Correlated-k fictitious gas model for H₂O infrared radiation in the Voigt regime. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 53(3) :335–346, 1995.
- [144] D. Crisp, S.B. Fels, and M.D. Schwarzkopf. Approximate methods for finding CO₂ 15 μ m band transmission in planetary atmospheres. *J. Geophys. Research*, 91 :11851–11866, 1986.
- [145] S.J. Young. Band model formulation for inhomogeneous optical paths. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 15 :483–501, 1975.
- [146] L. Tessé. *Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo*. Thèse de doctorat, École Centrale de Paris, 2001.
- [147] M. F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, 2nd édition, 2003.
- [148] R. Siegel and Howell J. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Taylor & Francis, 4th édition, 2002.
- [149] L. Tessé, F. Dupoirieux, B. Zamuner, and J. Taine. Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward Monte Carlo methods and a correlated-k approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45 :2797–2814, 2002.

- [150] L. Tessé, F. Dupoirieux, and J. Taine. Monte Carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 :555–572, 2004.
- [151] F. Dupoirieux, L. Tessé, A. Avila, and J. Taine. An optimized reciprocity Monte Carlo method for the calculation of radiative transfer in media of various optical thicknesses. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49 :1310–1319, 2006.
- [152] C. Deron. *Rayonnement thermique des plasmas d'air et d'argon : Modélisation des propriétés radiatives et étude expérimentale*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2003.
- [153] The Opacity Project Team. *The Opacity Project Volume 1*. Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1995.
- [154] P. Fauchais. Problems of partition functions of monoatomic and diatomic molecules in plasma. *Revue Internationale des Hautes Températures et des Réfractaires*, 6(3) :5–16, 1969.
- [155] J.-L. Delcroix. *Physique des plasmas*, volume 1-2. CNRS Édition, 1994.
- [156] G. Herzberg. *Molecular spectra and molecular structure. Spectra of diatomic molecules*. D. Van Nostrand Reinhold Company, INC New-York, 1950.
- [157] D. Stahel, M. Leoni, and K. Dressler. Nonadiabatic representations of the $^1\Sigma_u^+$ and $^1\Pi_u$ states of the N_2 molecule. *Journal of Chemical Physics*, 79(6) :2541–2558, 1983.
- [158] K.P. Huber and G. Herzberg. *Molecular spectra and molecular structure. Constants of diatomic molecules*. D. Van Nostrand Reinhold Company, INC New-York, 1979.
- [159] A. Lofthus and P.H. Krupenie. The spectrum of molecular nitrogen. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 6 :113–307, 1977.
- [160] C. Flament. *Écoulements de fluide visqueux en déséquilibre chimique et vibrationnel : Modélisation, applications internes et externes*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 1990.
- [161] J. Wilson. Ionization rate of air behind high-speed shock waves. *The Physics of Fluids*, 9(10) :1913–1921, October 1966.
- [162] L. Landau and E. Teller. Theory of sound dispersion. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 10, 1936.
- [163] R.C. Millikan and D.R. White. Systematics of vibrational relaxation. *Journal of Chemical Physics*, 39(12) :3209–3213, 1963.
- [164] Y.V. Stupochenko, S.A. Losev, and A.I. Osipov. *Relaxation in Shock Waves*. Springer-Verlag, 1967.
- [165] S.A. Losev, P.V. Kozlov, L.A. Kuznetsova, V.N. Makarov, Yu ;V. Romanenko, S.T. Surzhikov, and G.N. Zalugin. Radiation in mixture $CO_2 - N_2 - Ar$ in shock waves : Experiment and modelling. In *Proc. of Third European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles*, November 1998.

- [166] J.P. Appleton and K.N.C. Bray. The conservation equations for a non-equilibrium plasma. *Journal of Fluid Mechanics*, 20(4) :659–672, 1964.
- [167] R. Matsuzaki and N. Hirabayashi. Study of chemical reaction models for high enthalpy flow of air. Technical Report NAL TR-982, 1988.
- [168] A. Bourdon. Electron-vibration energy exchange models in nitrogen plasma flows. *Physical Review E*, 55(4), 1997.
- [169] C. Park and S.-H. Lee. Validation of multi-temperature nozzle flow code NOZNT. Technical report, 1993.
- [170] K. Koura. Electron and vibrational energy conservation equations for Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles. *AIAA Journal*, 25(1), January 1987.
- [171] R. Matsuzaki. Effect of free electron and rotational coupling on electron temperature in ionized nonequilibrium flow of air. Technical report, 1988.
- [172] B.F. Armaly and K. Sutton. Viscosity of multicomponent partially ionized gas mixtures. Technical report, 1980.
- [173] F.G. Blöttner, M. Johnson, and M. Ellis. Chemically reacting viscous flow program for multicomponent gas mixtures. Technical Report Sc-RR-70-754, Sandia Laboratories, 1971.
- [174] N. Gupta, J.M. Yos, R.A. Thompson, and K.P. Lee. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000K. Technical Report RP-1232, NASA, 1990.
- [175] L. Monchick, K.S. Yun, and E.A. Mason. Formal kinetic theory of transport phenomena in polyatomic gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 39(3) :654–669, 1963.
- [176] C.R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 18(4), 1950.
- [177] P. Gubernatis. *Ecoulements hypersoniques dissipatifs : Modèles physiques et numériques, application aux ondes de choc et aux tuyères bidimensionnelles*. Thèse de doctorat, Université de Provence, 1989.