N° d'ordre : 00000 Année : 2006

THÈSE

présentée en vue de
l'obtention du titre de

DOCTEUR

de

L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE
DE L'AÉRONAUTIQUE ET DE L'ESPACE

ÉCOLE DOCTORALE : TRANSFERTS, DYNAMIQUE DES FLUIDES, ÉNERGÉTIQUE ET PROCÉDÉS
Spécialité : Dynamique des fluides

par

Tristan SOUBRIE

Prise en compte de l'ionisation et du rayonnement dans la modélisation des écoulements de rentrée terrestre et martienne

Soutenue le 08 Novembre 2006 devant le jury :

MM.	Michel	Dudeck	Président - Rappporteur
	David	Zeitoun	Directeur de thèse
	Pierre	Charrier	Rapporteur
	Lionel	Marraffa	
	Olivier	Rouzaud	
	Claude	Marmignon	Membre invité
	Lionel	Tessé	Membre invité

Thèse préparée au sein de l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales

Je tiens à remercier l'ensemble des personnes qui m'ont aidé tout au long de ces trois années de thèse :

Tout d'abord l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales (ONERA) pour son accueil et son soutien financier ;

L'ensemble des membres du jury : son président, Michel Dudeck (Université Paris VI) qui, avec Pierre Charrier (Université Bordeaux 1), a également accepté d'assurer la charge de rapporteur, et Lionel Marraffa (ESA/ESTEC) qui a bien voulu faire le chemin depuis les Pays-Bas ;

Mes encadrants à l'ONERA : Olivier Rouzaud (Département Modèles pour l'Aérodynamique et l'Energétique DMAE) dont je ne cesserai de vanter les qualités d'encadrement, d'écoute et de soutien, et Lionel Tessé (Département Energétique Fondamentale et Appliquée DEFA) pour son aide sur les aspects rayonnement, ses relectures attentives et le partage de son bureau.

J'exprime ma vive gratitude à David Zeitoun (Polytech'Marseille) qui, malgré la distance, a dirigé mes travaux, m'a accordé sa confiance et accueilli dans ses locaux pour confronter mes travaux à ceux de Ghislain Tchuen : ce travail fut fructueux et riche en enseignements.

Je remercie de même Claude Marmignon (Département de Simulation Numérique des Ecoulements et Aéroacoustique DSNA de l'ONERA), que j'ai sollicité à de nombreuses reprises, pour ses avis éclairés notamment sur les aspects numériques, ainsi que Christophe Chalons pour m'avoir permis de collaborer à ses travaux sur le schéma de relaxation.

Un merci tout particulier à Jean Cousteix (directeur du DMAE) et Frédéric Thivet (alors chef de l'unité Couplage Aérothermique et Acoustique C2A) d'une part, et Francis Hirsinger (directeur du DEFA) et Daniel Gaffié (chef de l'unité Modèlisation de la Combustion Turbulente Multiphasique MCTM) d'autre part, qui se sont accordés sur mon transfert de Toulouse à Paris en cours de thèse : au-delà de l'intérêt scientifique, ils connaissent l'intérêt personnel que j'y ai trouvé.

J'exprime ma gratitude à Anouar Soufiani, Philippe Rivière et Marie-Yvonne Perrin (EM2C, Ecole Centrale Paris), Serguey Surzhikov (Institute of Problems of Mechanics, Russian Academy of Sciences), Rodolphe Turpault (Université de Nantes 2), Philippe Nagel et Florian Longueteau (stagiaires DMAE), Jean-Marc Charbonnier et Pierre Omaly (CNES), et Martin Spel et Walter Dieudonné de la société RTech pour leur aide précieuse et leur contribution significative à l'avancement de mes travaux.

Je n'oublie pas tous les membres du personnel ONERA, permanents, stagiaires, thésards que j'ai croisés et qui ont contribué à créer une ambiance de travail agréable. Parmi ces derniers, je mentionnerai particulièrement Marie et Djé le Djé, amis proches qui m'ont entre autres offert la Corse sur un plateau d'argent, Christian Pélissier et sa famille pour leur accueil si chaleureux et les sorties golfiques arrosées au Tariquet, les joueurs de carte - Alex, Cédric, Jean-Charles, Valérie, Ludo, Domi, Pierre-Edouard, les Olivier, Clément, Stéphane, Laurent -, l'équipe Aérothermodynamique de la Rentrée atmosphérique ARA - Jean-Claude, Jouke, Jean-Luc -, les membres du DEFA et particulièrement de l'équipe MCTM - Pascale, Véronique, Emmanuel, Angelo, Nicolas, Raphaëlle, Massimiliano, Dominique, Francis D. -, l'équipe CEDRE - Julien, Denis, Bernard, Marc, Gilles "King of Salsa & Sugar Game", François - et ceux qui gravitent autour - Julien, Sabri, Pascal "Caramel mou", Anthoine, Didier "Show man", Guillaume, Stéphanie -, et pour finir les sections golf de Toulouse et de Paris.

Enfin je remercie infiniment, pour son soutien constant, ma famille et en particulier Pauline qui, au cours de ces trois ans, fut tour à tour amie, fiancée, femme.

Table des matières

Notations, Constantes **9**

Introduction **17**

Première partie **25**

1 Physique des écoulements de rentrée **27**
1.1 Caractérisation et description des écoulements de rentrée 27
1.1.1 Caractérisation des écoulements 27
1.1.2 Processus physico-chimiques dans les couches de choc 29
1.1.3 Description microscopique des processus physico-chimiques de couche de choc 33
1.2 Modélisation des écoulements de rentrée 39
1.2.1 Hydrodynamique des couches de choc 40
1.2.2 Transfert radiatif 44
1.2.3 Couplage hydrodynamique/rayonnement 51
1.3 Etude bibliographique 52
1.3.1 Solveurs hydrodynamiques pour la simulation des écoulements hypersoniques ionisés 52
1.3.2 Plateformes de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement 62

2 Description de la modélisation et de la méthode numérique pour l'hydrodynamique **71**
2.1 Système d'équations pour les écoulements hypersoniques faiblement ionisés . . . 71
2.1.1 Hypothèses du modèle 71
2.1.2 Système d'équations de conservation 73
2.1.3 Signification des termes de chaque équation 75
2.2 Modélisations physico-chimiques 76
2.2.1 Cinétique chimique 76
2.2.2 Termes de transport 79
2.2.3 Relaxation 82
2.2.4 Les deux modélisations physico-chimiques utilisées 85
2.3 Méthode générale de résolution numérique 86
2.3.1 Traitement des flux convectifs non-visqueux 86
2.3.2 Extension au second ordre en espace 88
2.3.3 Traitement des flux dissipatifs 90
2.3.4 Discrétisation en temps 90

2.3.5 Conditions aux limites 91

3 Description des modélisations et méthodes de résolution des transferts radiatifs 93
3.1 Equation du transfert radiatif 93
3.1.1 Hypothèses adoptées 93
3.1.2 Equation du Transfert de Rayonnement 94
3.1.3 Expression du flux radiatif pariétal et de la puissance radiative volumique 94
3.2 Modèles de propriétés radiatives des gaz 95
3.2.1 Le Modèle Statistique à Bandes Etroites pour les mélanges de gaz CO/CO_2 95
3.2.2 Le code spectroscopique de type raie-par-raie PARADE 98
3.3 Méthodes numériques de résolution de l'équation du transfert radiatif 99
3.3.1 La méthode des plans tangents 100
3.3.2 La méthode de lancer de rayons 101
3.3.3 La méthode de Monte-Carlo dans le code ASTRE 105

Deuxième partie 109

4 Développement d'une plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement pour les écoulements de rentrée martienne 111
4.1 Développement de la plateforme de calcul 112
4.1.1 Choix des modèles 112
4.1.2 Adaptation du code ASTRE au modèle de propriétés radiatives MSBE . 114
4.1.3 Elaboration de la stratégie de couplage 116
4.2 Description du cas d'épreuve TC3 et de la méthode de calcul du champ hydrodynamique découplé 118
4.2.1 Description du cas d'épreuve TC3 119
4.2.2 Description des maillages de calcul 120
4.2.3 Description de la méthode de calcul du champ hydrodynamique découplé 121
4.2.4 Comparaison du champ hydrodynamique découplé avec d'autres résultats numériques 123
4.3 Paramétrisation et validation du code de transferts radiatifs 127
4.3.1 Etude de l'influence du nombre de chemins optiques 127
4.3.2 Choix de la méthode de Monte-Carlo 130
4.3.3 Validation de la méthode de calcul des transferts radiatifs 132
4.4 Prédiction du flux radiatif sur la paroi arrière-corps du cas d'épreuve TC3 . . . 133
4.4.1 Analyse du champ radiatif découplé 133
4.4.2 Couplage des champs hydrodynamique et radiatif 137
4.4.3 Comparaison avec d'autres résultats numériques 139
4.5 Test de la méthode pour la prédiction du flux radiatif sur le bouclier thermique du cas d'épreuve TC3 142

5 Validation de la modélisation hydrodynamique des écoulements faiblement ionisés associée à un schéma de Roe 149
5.1 Présentation du schéma de Roe 149
5.2 Traitement curatif du carbuncle par adaptation de maillage 152
5.3 Validation de la modélisation hydrodynamique par application à trois cas d'épreuve 155
5.3.1 Sphère de Lobb 156

5.3.2 Sonde RAM-C II . . . 158
5.3.3 Sonde FIRE II . . . 165
5.4 Vérification de la validité des hypothèses du modèle . . . 178

6 Développement et validation d'une plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement pour les écoulements de rentrée terrestre 185
6.1 Développement de la plateforme de calcul . . . 185
6.1.1 Choix des modèles . . . 186
6.1.2 Elaboration de la stratégie de couplage . . . 187
6.2 Choix du cas d'épreuve . . . 189
6.2.1 Description du cas d'épreuve . . . 189
6.2.2 Choix des points de vol . . . 190
6.2.3 Choix de la méthodologie de calcul pour chaque point de vol . . . 192
6.3 Paramétrisation des modèles . . . 193
6.3.1 Paramétrisation du modèle de propriétés radiatives des gaz et analyse des spectres d'émission . . . 193
6.3.2 Paramétrisation de la méthode de lancer de rayons . . . 197
6.4 Analyse de la modélisation . . . 199
6.4.1 Analyse de l'influence du modèle chimique sur la prédiction de l'échauffement de paroi . . . 199
6.4.2 Analyse de l'effet du couplage hydrodynamique/rayonnement . . . 200
6.4.3 Quantification de l'erreur engendrée par la méthode des plans tangents . 201
6.5 Validation de la plateforme de calcul par comparaison aux données en vol . . . 202

7 Développement d'un schéma de relaxation adapté aux écoulements faiblement ionisés 211
7.1 Identification d'un système relaxé compatible avec le système initial . . . 212
7.2 Construction d'une procédure numérique de résolution du système relaxé . . . 215
7.2.1 Notations . . . 215
7.2.2 Première étape : évolution en temps de la solution pour $\lambda = 0$ $(t^n \rightarrow t^{n+1-})$ 216
7.2.3 Seconde étape : projection de la solution sur l'état d'équilibre $\lambda = +\infty$ (relaxation) $(t^{n+1-} \rightarrow t^{n+1})$ . . . 217
7.3 Validation du schéma de relaxation par expériences numériques . . . 218
7.3.1 Validation sur des cas d'épreuves de type tube à choc . . . 218
7.3.2 Validation sur le cas d'épreuve RAM-C II . . . 222

Conclusion et perspectives 223

Annexes 227

A Calculs tube à choc en formulation non conservative 229
A.1 Contexte de l'étude : les systèmes hyperboliques . . . 229
A.2 Solution numérique des systèmes hyperboliques nonlinéaires . . . 229
A.3 Lois de conservation et relations non conservatives . . . 230
A.4 Résultats numériques sur des applications tube à choc . . . 231
A.5 Bilan de l'étude . . . 238

B Obtention de l'équation de conservation de l'entropie du gaz d'électrons 239

C Tableaux de données pour les modèles physico-chimiques 243

D Validation du code plan tangent sur une application de type mur plan 251

E Tableaux de résultat des calculs sur le cas d'épreuve FIRE II 253

Références bibliographiques 255

Notations, Constantes

A	: Matrice de Roe
$\mathcal{A}$	: Matrice liée aux phénomènes convectifs
$A,\ A_s$	: Particule chimique de l'espèce s
$[A_s]$	: Concentration en particules chimiques de l'espèce s
c	: Célérité du son
c_0	: Célérité de la lumière dans le vide
Cp_{eq}, Cv_{eq}	: Capacité calorifique à pression constante, resp. volume constant, de l'ensemble des modes d'énergie à l'équilibre thermique avec le mode de translation des espèces lourdes
$Cp_{mode,s}$	: Capacité calorifique à pression constante du mode (des modes) *mode* pour l'espèce s
$Cv_{mode,s}$	: Capacité calorifique à volume constant du mode (des modes) *mode* pour l'espèce s
d	: Diamètre d'une particule
$\mathcal{D}$	: Tenseur dissipatif
D_D	: Coefficient de diffusion du modèle à nombre de Lewis constant
$D_s,\ D_e$	: Coefficient de diffusion de l'espèce s, resp. des électrons
D_{sr}	: Coefficient de diffusion binaire
$e_s,\ e_e$	: Energie par unité de masse de l'espèce s, resp. des électrons
$e_{v,s}(T)$	: Energie de vibration par unité de masse à la température T
$e_{mode,s}$	: Energie du mode *mode* par unité de masse pour l'espèce s
E	: Energie totale
$E_{mode,s}$	: Energie du mode *mode* pour l'espèce s, $E_{mode,s} = \rho_s e_{mode,s}$
E^i	: $i^{ème}$ composante du champ électrique
$\mathbf{f}$	: Fonction de flux exact
F	: Flux numérique
h	: Enthalpie statique
$h^0_{f,s}$	: Enthalpie de formation de l'espèce s
H	: Enthalpie totale
$i,\ j$	: Niveau d'énergie
$\mathbf{I}_d$	: Matrice identité
I_λ	: Luminance monochromatique

I^0_λ : Luminance monochromatique du rayonnement d'équilibre

j_λ : Coefficient d'émission à la longueur d'onde λ

k_f : Constante de réaction directe

k_b : Constante de réaction inverse

K : Cellule de maillage

K_n : Nombre de Knudsen

l : Cosinus de l'angle de direction d'un rayon optique ; longueur d'une colonne ; libre parcours moyen

Le : Nombre de Lewis

L_0 : Longueur de référence

M : Nombre de Mach ; masse molaire du mélange gazeux ; molécule

m : Masse d'une particule

$m_s,\ m_e$: Masse d'une particule de l'espèce s, resp. des électrons

$M_s,\ M_e$: Masse molaire de l'espèce s, resp. des électrons

n : Itération temporelle d'un calcul hydrodynamique

$\mathbf{n}$: Vecteur normal unitaire

N : Nombre de variables conservatives ; nombre de chemins optiques ; nombre de raies

n_I : Densité totale des espèces ionisées

$n_s,\ n_e$: Densité volumique de l'espèce s, resp. des électrons

$n_{\tilde{\nu}}$: Indice optique complexe d'un milieu au nombre d'onde $\tilde{\nu}$

N_{avog} : Nombre d'Avogadro

p : Pression du mélange gazeux

$p,\ q$: Niveau énergétique d'une particule

$p_s,\ p_e$: Pression partielle de l'espèce s, resp. du gaz d'électrons

Pr : Nombre de Prandtl

P^e, P^R_e : Puissance radiative émise

P^{ea}_{ij} : Fraction de la puissance émise dans la cellule i absorbée dans la cellule j

p^R : Pression radiative

P^R : Puissance radiative

$\mathbf{q}^R,\ q^R_j,\ q^R$: Flux radiatif, composante j du flux radiatif, flux radiatif surfacique

q_e : Charge de l'électron

q^C_j : Composante j du flux convectif

R : Constante universelle de gaz ; rayon de nez

$\mathbf{r}$: Vecteur position dans l'espace

R_e : Nombre de Reynolds

s : Espèce chimique ; abscisse curviligne

s_e : Entropie spécifique du gaz d'électrons libres

S : Surface

S_{e-t} : Echange d'énergie entre le mode de translation des particules lourdes et le mode de translation des électrons libres

S_s^{e-t} : Echange d'énergie entre le mode de translation de l'espèce lourde s et le mode de translation des électrons libres

S_{e-r} : Echange d'énergie entre le mode de rotation des molécules et le mode de translation des électrons libres

S_m^{e-r} : Echange d'énergie entre le mode de rotation de l'espèce moléculaire m et le mode de translation des électrons libres

S_{e-v} : Echange d'énergie entre le mode de vibration des molécules et le mode de translation des électrons libres

S_m^{e-v} : Echange d'énergie entre le mode de vibration de l'espèce moléculaire m et le mode de translation des électrons libres

S_m^{v-v} : Echange d'énergie entre le mode de vibration de l'espèce moléculaire m et le mode de vibration des autres espèces moléculaires

$S_{m,m'}^{v-v}$: Echange d'énergie entre les modes de vibration des espèces moléculaires m et m'

t : Temps

T : Température de Translation - Rotation des espèces lourdes

$T_{a,f}$, $T_{a,b}$: Température d'activation d'une réaction chimique dans le sens direct (f) ou indirect (b)

T_e : Température de translation des électrons libres

$T_{el,s}$: Température électronique de l'espèce lourde s

T_{e-el} : Température liée aux modes de translation des électrons et d'excitation électronique des espèces lourdes

T_v : Température de vibration pour l'ensemble des espèces moléculaires

$T_{v,m}$: Température de vibration de l'espèce moléculaire m

u : Vitesse axiale du mélange gazeux ; produit de la longueur d'une colonne gazeuse et de la pression partielle d'une espèce chimique

$\mathbf{u}$: Vecteur de variables conservatives ; vecteur directeur unitaire de propagation du rayonnement

u_j : Vitesse moyenne du mélange gazeux dans la direction j

v : Vitesse normale du mélange gazeux

v_1, v_2 : Vitesses normale et tangentielle à une facette de cellule de maillage

V : Volume ; vitesse

W : Largeur de raie

Z : Facteur de compressibilité

$\dot{w}_s$, $\dot{w}_e$: Taux de production par réaction chimique de l'espèce s, resp. des électrons

x_j : Coordonnée dans la direction j

x_s, x_e : Fraction molaire de l'espèce s, resp. des électrons

y_s, y_e : Fraction massique de l'espèce $s = \rho_s/\rho$, resp. des électrons

z : Altitude

α_λ : Absorptivité monochromatique isotrope

α'_λ : Absorptivité monochromatique directionnelle

γ_D : Demi-largeur à mi-hauteur du profil Doppler

γ : Coefficient polytropique des espèces lourdes

γ_e : Coefficient isentropique du gaz d'électrons =5/3

δ : Epaisseur de couche de choc ; espacement moyen entre deux raies consécutives ; allongement de cellule de maillage

Δ : Direction de propagation du rayonnement

δ_{ij} : Symbole de Krönecker

ϵ_λ : Emissivité monochromatique isotrope

ϵ'_λ : Emissivité monochromatique directionnelle

η : Abscisse selon la normale

η_e : Conductivité thermique des électrons libres

$\eta_{v,m}$: Conductivité thermique de vibration pour l'espèce moléculaire m

η_{eq} : Conductivité thermique des modes d'énergie à l'équilibre thermique avec le mode de translation des espèces lourdes

$\eta_{el,s}$: Conductivité thermique correspondant au mode électronique de l'espèce lourde s

θ : Angle d'élévation

θ_d : Température de dissociation d'une molécule

$\theta_{mode,s}$: Température caractéristique du mode *mode* pour l'espèce s

$\theta_{ei,s}$: Température caractéristique du niveau électronique (i) pour l'espèce s

θ_i : Température d'ionisation

κ_λ : Coefficient d'absorption à la longueur d'onde λ

λ : Longueur d'onde du rayonnement ; valeur propre

μ : Viscosité dynamique du mélange gazeux

μ_s : Viscosité dynamique d'un gaz pur s

ν : Fréquence du rayonnement

$\tilde{\nu}$: Nombre d'onde du rayonnement

ν^*_{es} : Fréquence de collision des électrons avec les particules lourdes de l'espèce s

ν'_s, ν''_s : Coefficient stœchiométrique pour l'espèce s, sens direct et inverse

ξ : Direction longitudinale

Ω : Angle solide ; espace des phases

Π : Variable de relaxation

ϕ : Angle d'azimut

Φ_{sr} : Terme défini dans le cadre des lois de mélange d'Armaly et Sutton [12, 13]

ρ : Masse volumique du mélange

ρ_s, ρ_e : Masse volumique de l'espèce s, resp. des électrons

σ : Section efficace de collision

τ_{e-v} : Temps de relaxation des échanges Electron-Vibration e-V

τ_m^{e-v} : Temps de relaxation des échanges Electron-Vibration e-V entre les électrons et l'espèce moléculaire m

τ_m^{v-t} : Temps de relaxation des échanges Vibration-Translation V-T pour l'espèce moléculaire m

$\tau_{m,s}^{v-t}$: Temps de relaxation des échanges Vibration-Translation V-T entre l'espèce moléculaire m et l'espèce lourde s

$\tau_{m,m'}^{v-v}$: Temps de relaxation des échanges Vibration-Vibration V-V entre les espèces moléculaires m et m'

$\check{\tau}_\lambda$: Epaisseur optique

τ_λ : Transmittivité monochromatique

ξ : Rayon de Debye

Indices et exposants :

a : absorbé

at : atome

b : sens indirect d'une réaction chimique (backward)

C : convectif

e : électron ; émis

el : excitation électronique

ETL : équilibre thermodynamique local

$exch$: échangé

f : sens direct d'une réaction chimique (forward)

i, j : indice géomètrique de cellule

I : ion

K : cellule de maillage

L : état gauche (Left) ; particule dans son niveau d'énergie bas (Low)

$mode$: mode d'énergie

mol : molécule

n : espèce neutre ; indice temporel ; rayon optique

p, q : niveau d'énergie

r : rotation ; espèce chimique quelconque

(r) : réaction chimique

R : radiatif ; état droit (Right)

s : espèce chimique quelconque ; abscisse curviligne

t : translation

v : vibration

w : paroi (wall)

λ : longueur d'onde du rayonnement

$\tilde{\nu}$: nombre d'onde du rayonnement

0 : condition limite ; paroi ; rayonnement d'équilibre

∞	: infini amont
$-$	: dirigé vers la paroi
$+$	: dirigé vers l'infini amont
$*$	: Particule excitée

Définitions et acronymes :

AFE	: Aeroassist Flight Experiment vehicle
ARM	: Absorption-based Reciprocal Method
ASD	: Atomic Spectral Database
ASTRE	: Approche Statistique des Transferts Radiatifs dans les Ecoulements
ASTV	: Advanced Space Transfer Vehicle
AUSM	: Advection Upwind Splitting Method
BSUV	: Bow Shock UltraViolet experiment
CEA/CESTA	: Commissariat à l'Énergie Atomique/Centre d'Études Scientifiques et Techniques d'Aquitaine
CFD	: Computational Fluid Dynamics
CFL	: nombre de Courant-Friedrich-Levy
CNES	: Centre National d'Etudes Spatiales
CPU	: Central Processing Unit
CVCV	: Coupled Vibration-Chemistry-Vibration model
CVD	: Couplage Vibration-Dissociation
DSMC	: Direct Simulation Monte-Carlo method
el	: mode d'excitation électronique
EM2C	: Laboratoire Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion
e/e-	: électron
ERM	: Emission-based Reciprocal Method
ESA	: European Space Agency
espèces lourdes	: espèces autres que les électrons
ESTEC	: European Space Research and Technology Centre
ETL	: Equilibre Thermodynamique Local
ETR	: Equation de Transfert Radiatif
FDS	: Flux Differential Splitting
FGE	: Fluid Gravity Engineering
FIRE	: Flight Investigation of the Reentry Environment

FM	: Forward Method
FVS	: Flux Vector Splitting
GEISA	: Gestion et Etude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques
GIANTS	: Gauss-Seidel Implicit Aerothermodynamics Navier-Stokes code with Thermochemical Surface conditions
GMRES	: Generalized Minimum RESiduals method
HERTA	: High Enthalpy Radiation Transport Algorithm
HITEMP	: HIgh-TEMPerature spectroscopic absorption parameters
HITRAN	: HIgh-resolution TRANsmission molecular absorption database
IPMech RAS, IPM	: Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences, Moscow
IR	: InfraRouge
IRS	: Institut für Raumfahrtsysteme Universität Stuttgart
IUSTI	: Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels
KAIST	: Korea Advanced Institute of Science and Technology
LAURA	: Langley Aerothermodynamic Upwind Relaxation Algorithm code
LMD/ARA	: Laboratoire de Météorologie Dynamique/Atmospheric Radiation Analysis group
LORAN	: Langley Optimized RAdiative Nonequilibrium code
MAB	: Laboratoire Mathématiques Appliquées Bordeaux
MSR/MSRO	: Mars Sample Return Orbiter
MUSCL	: Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws
NASA	: National Aeronautics and Space Administration
NASP	: NASA's National AeroSpace Plane
NBS	: National Bureau of Standards
NSRDS	: National Standard Reference Data Series
NEQAIR	: NonEQuilibrium AIR Radiation code
NiiMech	: Insitute of Mechanics of the Moscow State University
NOVAR	: Nonequilibrium Optimized VectorizAble Radiation process model
ONERA	: Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales
OREX	: Orbital Reentry EXperiment
ORM	: Optimized Reciprocal Method
PARADE	: PlasmA RAdiation DatabasE
QSS	: Quasi-Steady-State method
R	: mode de rotation des molécules

RAM	: Radio Attenuation Measurement
resp.	: Respectivement
RHT	: Radiative Heat Transfer
SESAM	: Signature d'Emission Spectrale pour l'Atmosphère Martienne
S/O	: Sans Objet
SSTO	: Single Stage To Orbit
T	: mode de translation
TC3	: Test Case 3
TINA	: Thermochemical Implicit Nonequilibrium Algorithm
TVD	: Total Variation Diminishing
URANUS	: Upwind Relaxation Algorithm for Nonequilibrium flows of the University of Stuttgart
UV	: UltraViolet
V	: mode de vibration des molécules
VKI	: Von Karman Institute for fluid dynamics

Constantes physiques :

Célérité de la lumière dans le vide	: c_0	$= 299792458\ m/s$
Constante de Planck	: h	$= 6,62621 \cdot 10^{-34}\ J.s$
Constante de Boltzmann	: k	$= 1,38054 \cdot 10^{-23}\ J/K$
Nombre d'Avogadro	: N_{avog}	$= 6,022521 \cdot 10^{23}$
Constante universelle de gaz	: R	$= 8,3143\ J/K/mol$
Masse de l'électron	: m_e	$= 9,108 \cdot 10^{-31}\ kg$
Charge de l'électron	: q_e	$= 1,602 \cdot 10^{-19}\ C$
Constante de Stefan	: σ	$= 5,670 \cdot 10^{-08}\ W/m^2/K^4$

Introduction

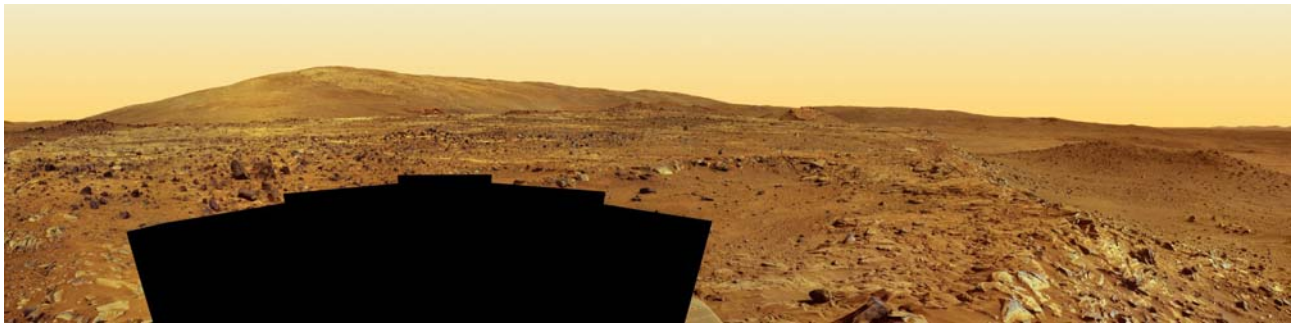


Fig. 1: Vue du sol martien prise par le rover américain Spirit (crédit : NASA)

Dans la foulée des missions Apollo et du débarquement des premiers hommes sur la Lune, de 1961 à 1975, Mars est désignée par les américains comme le prochain astre à conquérir. Le premier scénario de voyage vers la planète rouge (Mars Project) fut mis au point par Wernher von Braun, le père des fusées allemandes V2. Son scénario faisait intervenir un train de dix vaisseaux spatiaux assemblés en orbite terrestre, chacun pouvant transporter sept hommes. Après un voyage de neuf mois, cinquante astronautes atterrissaient sur la planète rouge pour y rester quinze mois, avant d'entreprendre le voyage de retour. Durée totale de la mission : trois ans.

Depuis, les projets de vol habité vers Mars n'ont pas manqué, du moins sur papier car aucun n'a vu le jour. Après le succès de la conquête lunaire, le budget accordé au domaine spatial a sévèrement diminué. La situation politique avait changé, la guerre froide touchait à sa fin. Une mission humaine vers Mars posait aussi de nombreux problèmes techniques. Enfin, avec l'explosion de Challenger en 1986 et les affres de la gestion de la station spatiale américaine, l'idée d'un vol habité vers Mars allait être mis en sommeil.

Cependant, la planète Mars n'échauffe pas seulement les esprits conquérants, elle suscite également des interrogations. En particulier, une question excite la curiosité de la communauté scientifique internationale : y a-t-il eu de la vie sur Mars ? Pour répondre à cette question, les observations depuis la Terre ne sont pas suffisantes. Il est donc nécessaire de préparer des missions d'exploration du sol martien.

Lancés par les américains, les deux atterrisseurs Viking se posèrent sur Mars en 1976 pour en photographier le sol et l'analyser grâce à une panoplie de fours et de capteurs, afin de détecter une éventuelle forme de vie. Les modules d'atterrissage utilisèrent un godet (figure 2) pour creuser une tranchée peu profonde dans laquelle des échantillons de sol furent collectés. Ensuite, les échantillons durent subir trois expériences différentes pour déterminer si le sol contenait des organismes vivants. Dans l'une des expériences, des nutriments et de l'eau furent apportés à l'échantillon pour voir si des formes de vie simples pourraient consommer le nutriment et

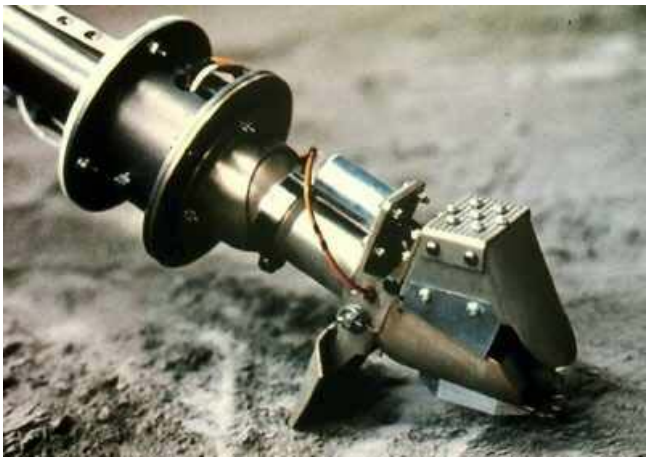


Fig. 2: Godet des véhicules Viking (crédit : NASA)

être ensuite détectées par leurs produits dérivés. Les expériences ne furent pas concluantes car les scientifiques n'avaient aucune certitude quant à l'origine des résultats, à savoir s'ils étaient causés par d'autres processus chimiques survenant dans l'échantillon. Les atterrisseurs creusèrent des tranchées et examinèrent de nombreux échantillons, mais on ne put détecter avec certitude la présence d'une vie. Par conséquent, avec les sondes Viking, la question restait en suspens...

En 1984, une équipe américaine de chasseurs de météorites découvrit la Météorite ALH84001 dans la région d'Alan Hills, en Antarctique. En 1996, la NASA annonça que sur cette météorite, venue de Mars et tombée sur Terre il y a 13000 ans, ils auraient découvert des traces de vie bactériologique. En effet, grossie 30 000 fois, la surface de la météorite s'est révélée couverte de petit bâtonnets semblables à des bactéries de 20 à 100 nanomètres de long (figure 3). Est-ce la preuve que la vie a existé un jour sur Mars ? Pour certains scientifiques, la réponse est oui. Pour d'autres, ce ne seraient que des artefacts publiés par la NASA pour gagner des crédits du Sénat...

En tout cas, il n'en fallait pas plus pour relancer l'intérêt porté à la planète rouge.

Les missions américaines sont les plus florissantes. Ainsi, au cours de l'année 2004, les sondes 2001 Mars Odyssey et Mars Global Surveyor gravitaient autour de la planète rouge,

Fig. 3: Zoom sur la météorite ALH84001 (crédit : NASA)

Fig. 4: Rover Spirit
(crédit : NASA)

Fig. 5: Mars Sample Return Orbiter (MSRO)
(crédit : CNES/ESA/Arianespace)

prenant cliché sur cliché et confirmant entre autres la présence de très grandes quantités de glace d'eau à faible profondeur sous la surface martienne, tandis que les rovers d'exploration Spirit (figure 4) et Opportunity - successeurs du démonstrateur Sojourner de la mission Pathfinder - sillonnaient le sol à la recherche de preuves sur l'écoulement passé de l'eau. Depuis, d'autres missions américaines sont en route ou à l'étude : Mars Reconnaissance Orbiter (lancée en 2005), Phoenix Lander (lancement prévu en 2007) ou encore Smart Lander (lancement prévu en 2009).

Côté européen, la première mission vers la planète rouge, Mars Express, fut lancée le 2 juin 2003 depuis le cosmodrome de Baïkonour au Kazakhstan et arriva sur Mars la nuit du réveillon de Noël de la même année. Son principal objectif était la recherche de réserves souterraines d'eau. La sonde étudia également l'atmosphère, dans laquelle elle découvrit la présence de méthane, et photographia la surface de Mars. L'atterrisseur britannique Beagle 2 qu'elle transportait et qui devait se poser à la surface pour y chercher des traces de vie fut malheureusement perdu.

Pour la communauté internationale, l'objectif suivant est le retour sur Terre d'échantillons de sol martien. Etant donné le budget nécessaire à la réalisation d'un tel projet, l'Agence Spatiale Européenne (ESA) et son homologue américain (NASA) ont décidé de collaborer. La mission, baptisée Mars Sample Return (MSR), consiste à envoyer une sonde sur le sol martien afin d'en prélever des échantillons. Ensuite, un engin doit rapporter sur Terre ces échantillons. Cet engin est le Mars Sample Return Orbitor (MSRO) présenté sur la figure 5, et la France, dans le cadre du programme Mars Premier piloté par le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES), est responsable de son développement.

La mission MSR comporte deux rentrées atmosphériques : une première dans l'atmosphère martienne - pour y capturer en vol le conteneur d'échantillons martiens - et une seconde dans l'atmosphère terrestre, à très grande vitesse (de l'ordre de $12km/s$). Les phases de rentrée sont des phases critiques car l'échauffement des parois est très important. Pour éviter tout risque d'endommagement de la charge utile ou même la perte de la mission, le véhicule de rentrée est protégé à l'aide de systèmes de protection thermique. Ces systèmes sont dimensionnés en fonction des flux de chaleur pariétaux. Par conséquent, la préparation de la mission passe par la prédiction des flux de chaleur.

On dispose de deux moyens de prédiction : l'expérimentation, au sol ou en vol, et la simu-

lation numérique. Pour des raisons évidentes de coûts, on privilégie dans un premier temps la simulation numérique aux expérimentations à grande échelle. Cela impose de bien connaître et comprendre les mécanismes qui participent à l'échauffement des parois d'un corps de rentrée.

L'échauffement peut avoir deux origines : une origine convective et une origine radiative. Si la première est connue et étudiée depuis le début de la conquête spatiale, la seconde a souvent été traitée de manière très approchée dans la préparation des missions. Un tel traitement pourrait s'avérer insuffisant dans le cadre des missions d'exploration planétaire, d'autant plus qu'un surdimensionnement préventif des systèmes de proctection thermique entraine un surcôut de la mission ou limite la masse utile embarquée.

En ce qui concerne la rentrée dans l'atmosphère martienne, les premières études réalisées dans le cadre du programme Mars Premier montreraient que le rayonnement de gaz est important dans l'écoulement de sillage. Ainsi, une protection thermique dimensionnée uniquement à partir du flux convectif serait insuffisante et pourrait compromettre la mission. Quant à la rentrée dans l'atmosphère terrestre, les essais en vol FIRE II [29] menés dans les années 60 par les américains ont montré que les processus radiatifs participent jusqu'à 40% à l'échauffement lorsque la vitesse de rentrée est de l'ordre de $11km/s$. D'autre part, à de telles vitesses, le gaz s'ionise, ce qui modifie les processus convectifs et radiatifs.

Ainsi, afin d'être capable d'estimer le flux de chaleur pariétal sur un véhicule comme le MSRO, il est nécessaire de prendre en compte l'ionisation et le rayonnement du gaz dans la modélisation. C'est à ces deux points que nous allons nous intéresser particulièrement.

La modélisation de l'hydrodynamique des écoulements hypersoniques ionisés est un problème complexe. Les milieux sont chimiquement réactifs et les modes d'énergie des particules ne sont pas équilibrés thermiquement. En particulier, on ne peut pas définir une température unique pour calculer les énergies de translation des électrons et des particules de gaz à cause de leur différence de masse et donc de mobilité. On parle alors de déséquilibre thermique.

On doit principalement à Lee [116] l'écriture, en 1984, des équations de conservation régissant la dynamique des écoulements hypersoniques ionisés en déséquilibre thermochimique. Ces équations font apparaître les termes représentatifs des différents phénomènes physico-chimiques qui interviennent dans les écoulements de rentrée. Chacun de ces termes requiert un travail de modélisation - dont on cite ci-dessous quelques-une des principales contributions. Il s'agit de :

- la cinétique chimique (Wilson [210], Dunn et Kang [62], Park [148, 150, 152])
- le frottement visqueux (Wilke [208], Sutton et Shermann [182], Blöttner *et al.* [20], Armaly et Sutton [12])
- la conduction thermique (Armaly et Sutton [13], Gupta *et al.* [79])
- la diffusion (Yos *et al.* [213], Lee [116])
- le déséquilibre thermique (Park [146], Gnoffo *et al.* [67])
- ou encore la relaxation énergétique (Millikan et White [132], Appleton et Bray [11]).

Ces travaux de modélisation ont permis d'élaborer, à la fin des années 80 et au début des années 90, les premiers solveurs hydrodynamiques incluant les phénomènes d'ionisation (Candler [25], Gnoffo *et al.* [66], Jonas *et al.* [101]).

Cependant, en 1993, Coquel et Marmignon [50], de l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales (ONERA), ont pointé du doigt un problème au niveau de la méthode de résolution numérique adoptée jusqu'alors. Ce problème est lié à la modélisation mathématique : l'équation de bilan d'énergie des électrons contient un terme non conservatif, compliquant la résolution numérique du système. Pour contourner la difficulté, Candler [25] avait choisi en 1988 de traiter le terme non conservatif comme un terme source. Pour Coquel et Marmignon [50], ce traitement "est non seulement faux mathématiquement mais est à l'origine d'instabilités

numériques". Ces derniers ont alors proposé de réécrire le système en remplaçant l'équation de conservation de l'énergie des électrons par une équation d'entropie qui, elle, est écrite sous forme conservative. Ce traitement impose d'introduire des hypothèses supplémentaires. Notamment, il ne permet pas de prendre en compte la conduction thermique au sein du gaz d'électrons. Coquel et Marmignon [53, 124, 54] ont appliqué la méthode à un cas d'épreuve référencé pour lequel ils ont obtenu des résultats encourageants, comparables à ceux de la littérature et aux mesures en vol. Cependant, les applications sont limitées à des écoulements contenant une seule espèce ionisée et pour des vitesses modérées (de l'ordre de $7,5km/s$).

Concernant la modélisation du rayonnement agissant dans les écoulements de rentrée, les premiers travaux datent des années 60-70 (Howe et Viegas [94], Anderson [8], Olstad [141]). Ces travaux américains donnent des estimations de la contribution radiative à l'échauffement de la paroi. Ils mettent aussi en évidence les interactions entre le fluide et le rayonnement : le rayonnement dépend des propriétés thermodynamiques en chaque point de l'écoulement tandis que l'énergie en chacun de ces points évolue par suite des processus radiatifs. Ces interactions doivent être modélisées afin de prédire correctement l'échauffement pariétal.

Les premières plateformes de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement sont développées aux Etats-Unis dans les années 90 (Hartung [88], Hartung et Hassan [89], Greendyke *et al.* [75], Olynick *et al.* [142]) puis en Europe (Kay and Gogel [105], Kanne *et al.* [103]) et au Japon (Sakai et Sawada [163]). A notre connaissance, les applications sont exclusivement tournées vers la rentrée terrestre (essai en vol FIRE II, retour de la mission Rosetta (NASA/ESA) d'exploration de la comète Nucleus, retour de mission martienne ou d'orbite géosynchrone).

En 2003, dans le cadre de la préparation des missions d'exploration de la planète Mars, l'ESA et le CNES ont mis en place un groupe de travail international dont l'objectif est l'étude du rayonnement de couche de choc. Y participent notamment les universités de Bari, Stuttgart, Moscou et Bordeaux, les laboratoires IUSTI à Marseille, EM2C à Paris, IPM à Moscou, VKI à Rhode Saint Genèse, KAIST en Corée, ESTEC aux Pays-Bas, le Laboratoire Aérothermodynamique d'Orléans, l'ONERA à Toulouse ou encore la société britannique FGE. L'attention s'est d'abord portée sur le rayonnement dans le sillage d'un corps de rentrée martienne. Sur la base du véhicule MSRO, Charbonnier *et al.* [38] ont défini un cas d'épreuve baptisé TC3.

Dans le contexte de ce groupe de travail, l'ONERA a commandé au laboratoire EM2C le développement d'un modèle de propriétés radiatives pour les mélanges gazeux de type CO/CO_2, rencontrés dans l'atmosphère martienne. Il s'agit d'un Modèle Statistique à Bandes Etroites MSBE [158], livré à l'ONERA dans le courant de l'année 2003.

D'autre part, l'ESA a mis à disposition des partenaires européens la base de données spectroscopique PARADE [172] (PlasmA RAdiation DatabasE). Le code PARADE calcule les propriétés radiatives des espèces de l'air entre autres.

Par ailleurs, l'ONERA disposait du solveur de transferts radiatifs ASTRE (Approche Statistique des Transferts Radiatifs dans les Ecoulements), développé par Tessé [193] dans le contexte de la combustion dans les foyers aéronautiques. Ce code n'était toutefois pas adapté aux modèles de propriétés radiatives du type du MSBE ou du code PARADE.

L'ONERA disposait également, suite aux travaux de Coquel et Marmignon [53, 124, 54] évoqués précédemment, de l'outil de calcul hydrodynamique CELHyO2D adapté aux écoulements de rentrée, dans lequel le traitement mathématique et numérique est particulièrement intéressant mais la représentation physique incomplète (une seule espèce ionisée, application pour des vitesses d'écoulement inférieures à $8km/s$).

Sur la base des outils dont disposait l'ONERA, le travail de thèse a consisté à développer des méthodologies de calcul pour la simulation des écoulements de rentrée en atmosphère terrestre et martienne prenant en compte d'une part l'ionisation du gaz s'il y a lieu, et d'autre part le rayonnement du gaz et ses interactions avec le fluide.

Dans un premier temps, on s'est placé dans le cadre des rentrées martiennes caractéristiques de la mission Mars Sample Return. L'objectif était de vérifier si la contribution radiative à l'échauffement pariétal était négligeable ou non devant la contribution convective. Pour cela, on a développé une plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement adaptée à ce type d'écoulement. La première étape a consisté à adapter les différents modules de la plateforme. Dans ce contexte d'étude, le milieu est non-ionisé et à l'équilibre thermique ; par conséquent le solveur hydrodynamique CELHyO2D n'a pas nécessité d'adaptation. On a proposé d'implémenter le modèle MSBE dans le solveur ASTRE. Le cas d'épreuve choisi correspond au cas TC3 [38] évoqué plus haut. On a vérifié la validité des résultats en les comparant aux résultats obtenus par les différents participants au groupe de travail piloté par l'ESA. Les résultats de cette étude ont été présentés lors de trois congrès : *The 4^{th} International Symposium on Radiative Transfer, 20-25 juin 2004, Istanbul (Turquie)*, *The 2^{nd} International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, 30 sept.-1 oct. 2004, Porquerolles (France)* et *The 4^{th} International Symposium on Atmospheric Reentry Vehicles and Systems, 21-23 mars 2005, Arcachon (France)*.

Dans un second temps, on s'est intéressé aux écoulements de rentrée terrestre. Tout d'abord, on s'est focalisé sur la partie hydrodynamique, sans tenir compte des effets radiatifs. L'objectif a été d'étendre l'approche proposée par Coquel et Marmigon [53, 54, 124] aux écoulements contenant plusieurs espèces ionisées et pour des vitesses caractéristiques d'un retour de mission martienne ($V \simeq 12km/s$). L'approche numérique est basée sur un schéma de type Roe. La méthode a été validée sur différents cas d'épreuve pour lesquels on disposait de données expérimentales et de résultats numériques. Cette étude est rapportée dans deux communications à congrès (*ECCOMAS 2004, 24-28 juillet 2004, Jyväskylä (Finlande)* et *ICCFD3, 12-16 juillet 2004, Toronto (Canada)*).

Ensuite, le travail a consisté à développer une plateforme de calcul couplé pour des écoulements de rentrée terrestre à grande vitesse. Comme pour le cas martien, on a choisi, adapté et/ou implémenté les différents modules de la plateforme avant de valider la méthode sur le cas d'épreuve FIRE II pour lequel on disposait de données expérimentales [55, 30, 29] et d'autres résultats numériques. Les résultats ainsi obtenus ont été présentés lors de deux congrès : *The 44^{th} AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA 2006-1188, 9-12 janvier 2006, Reno (Nevada, USA)* et *The 13^{th} International Heat Transfer Conference IHTC-13, 13-18 Août 2006, Sydney (Australie)*.

Enfin, le choix fait par Coquel et Marmigon [53, 124, 54] d'utiliser un schéma numérique de type Roe présente certains inconvénients. Le schéma de Roe est un schéma complexe et connu pour être numériquement instable lorsque la vitesse de l'écoulement est élevée. On s'est donc trouvé confronté à des difficultés de mise en œuvre (apparition de carbuncle entre autres). Ainsi, on a eu l'idée de développer un autre schéma numérique, plus simple et plus robuste que le schéma de Roe. Le schéma de relaxation [33, 34] a semblé être un bon candidat. Ce schéma, simple de mise en œuvre, est de plus particulièrement adapté aux écoulements multi-pression. Or les écoulements ionisés en déséquilibre thermique font apparaître deux pressions : la pression des espèces lourdes et la pression des électrons. En revanche, le schéma de relaxation n'est

pas adapté aux mélanges gazeux. L'objectif a donc été d'adapter ce schéma numérique aux écoulements multi-espèces ionisés en déséquilibre thermochimique, et de le valider. Ce travail a été présenté lors du *36^{th} AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA 2005-0603, 12-15 janvier 2005, Reno (Nevada, USA).*

Les chapitres 4 à 7 du mémoire exposent chacun des quatre points évoqués ci-dessus. Ils sont précédés de trois chapitres qui se veulent descriptifs.

Dans le chapitre 1, on décrit la physique des écoulements de rentrée et on présente une étude bibliographique sur les deux aspects spécifiques à ce travail de thèse : la prise en compte de l'ionisation d'une part et du rayonnement d'autre part dans la modélisation des écoulements de rentrée.

Dans les deux chapitres suivants (chapitres 2 et 3), on décrit les méthodes et modèles utilisés au cours de cette étude, sans avoir fait l'objet de développements spécifiques de la part de l'auteur. Le chapitre 2 est dédié à la modélisation hydrodynamique (solveur CELHyO2D) et le chapitre 3 à la modélisation radiative (modèle de propriétés radiatives MSBE, code spectroscopique PARADE, solveur de transferts radiatifs ASTRE entre autres).

A la fin du mémoire, une conclusion reprend les principaux résultats de la thèse et présente des perspectives pour des études futures.

Première partie

Chapitre 1

Physique des écoulements de rentrée

L'objectif du chapitre est, dans un premier temps, de caractériser et de décrire les écoulements de rentrée atmosphérique et les phénomènes physico-chimiques mis en jeu dans ces écoulements. Dans un deuxième temps, on présente les différentes modélisations et les méthodes de résolution existantes pour ce type de problème. Dans un troisième temps, on présente les résultats d'une recherche bibliographique portant sur les deux points de notre étude : la prise en compte de l'ionisation d'une part et du rayonnement d'autre part dans la simulation numérique des écoulements de rentrée.

1.1 Caractérisation et description des écoulements de rentrée

1.1.1 Caractérisation des écoulements

Au cours d'une phase de rentrée, un véhicule rencontre différents régimes d'écoulement, de l'hypersonique au subsonique, du régime laminaire au régime turbulent, du milieu raréfié au milieu continu (figure 1.1). Un écoulement se définit par le régime de vitesse, le comportement dynamique et le régime d'écoulement.

- Le *régime de vitesse* se caractérise par le *nombre de Mach* M défini localement par :

$$M = u/c \tag{1.1}$$

où u est la vitesse locale de l'élément fluide (dans le référentiel lié à l'obstacle) et c est la vitesse locale du son. Le nombre de Mach est le rapport de l'énergie cinétique d'une particule à son énergie interne. On distingue quatre régimes de vitesse :

- Le régime subsonique, $0 < M < 0,8$: les lignes de courant du fluide épousent les contours de l'obstacle.
- Le régime transsonique, $0,8 < M < 1,2$: il s'agit d'un régime transitoire pour lequel l'écoulement présente localement, sur l'obstacle, des poches où le fluide atteint ou dépasse la vitesse locale du son.
- Le régime supersonique, $1,2 < M < 7$: un choc apparaît au nez de l'obstacle, au travers duquel des propriétés du fluide subissent une discontinuité (variation brutale sur une distance de l'ordre du libre parcours moyen des molécules).

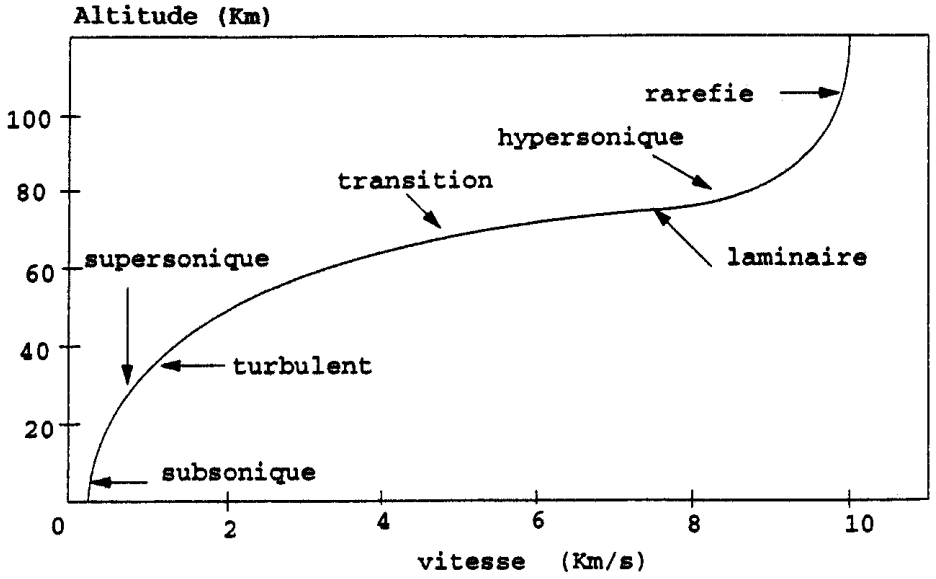


Fig. 1.1: Régimes rencontrés lors d'une phase de rentrée dans l'atmosphère terrestre [190]

- Le régime hypersonique, $M > 7$: des phénomènes physico-chimiques - relaxation vibrationnelle, dissociation moléculaire, ionisation, rayonnement... - modifient l'écoulement de façon sensible.

• Le *comportement dynamique* se caractérise par le *nombre de Reynolds* R_e défini par :

$$R_e = \rho u L_0 / \mu \tag{1.2}$$

où ρ est la densité du fluide, u sa vitesse, μ sa viscosité et L_0 une longueur caractéristique de l'obstacle. Le nombre de Reynolds est le rapport des forces d'inertie aux forces de frottement. On distingue trois régimes de comportement dynamique des particules :

- Le régime laminaire, $R_e < 10^5$, pour lequel les filets fluides glissent les uns sur les autres.
- Le régime transitoire, qui marque le début d'un désordre.
- Le régime turbulent, à des nombres de Reynolds beaucoup plus grands, pour lequel apparaissent des phénomènes non linéaires, tridimensionnels, à caractère aléatoire, non périodique et irrégulier dans l'espace et le temps. La turbulence favorise les transferts de chaleur, de masse et de quantité de mouvement.

• Le *régime d'écoulement* se caractérise par le *nombre de Knudsen* K_n défini par :

$$K_n = l / L_0 \tag{1.3}$$

où L_0 est une longueur caractéristique de l'obstacle et l est le libre parcours moyen. Le libre parcours moyen représente statistiquement la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions. Son expression dépend du modèle d'interaction moléculaire. Dans le modèle des sphères rigides, il peut se définir par la relation [201] :

$$l = \frac{m}{\sqrt{2}\pi d^2 \rho} \tag{1.4}$$

où m est la masse d'une particule et d son diamètre. La variable ρ désigne la masse volumique du fluide. Pour une longueur de référence L_0 de $1m$ et dans le cadre d'une rentrée en atmosphère terrestre, on distingue trois régimes :

- Le régime raréfié, $K_n \geq 0,1$: ce régime se rencontre pour des altitudes élevées, supérieures à $100km$, où la pression et la densité de fluide sont très faibles. Il est alors nécessaire d'adopter une approche microscopique pour décrire l'évolution du fluide (équations de Boltzmann).
- Le régime transitoire, $10^{-3} < K_n < 0,1$, pour une altitude comprise entre $80km$ et $100km$.
- Le régime continu, $K_n \leq 10^{-3}$: ce régime se rencontre pour des altitudes inférieures à 80km, où la pression et la densité sont suffisamment élevées pour que les diverses grandeurs macroscopiques qui caractérisent le fluide soient parfaitement définies. La description de l'écoulement s'obtient par la résolution des équations de Navier-Stokes.

Désormais, et dans toute la suite du mémoire, on se place dans le cadre du régime hypersonique, laminaire et continu. Ce contexte d'étude correspond à la phase initiale du freinage aérodynamique dans les hautes couches de l'atmosphère, lorsque le milieu devient suffisamment dense pour freiner le corps de rentrée (figure 1.1). Dans ces conditions, l'hypothèse de régime continu est vérifiée. Pour des informations relatives au traitement des problèmes de rentrée en milieu raréfié, le lecteur pourra se référer aux travaux de Bird [17, 18, 187].

1.1.2 Processus physico-chimiques dans les couches de choc

Lorsqu'un corps de rentrée de forme émoussée (sonde, navette, capsule...) pénètre à grande vitesse dans une atmosphère planétaire, un choc fort et détaché se forme en amont du corps (figure 1.2). On appelle *couche de choc* la zone d'écoulement située entre le choc et la paroi du corps. L'étude des couches de choc a fait l'objet de plusieurs ouvrages de référence [182, 214, 201, 9, 149]. En s'appuyant sur ces ouvrages, on décrit ci-dessous les phénomènes physico-chimiques prenant place dans les couches de choc.

A la traversée du choc, le fluide se trouve brusquement comprimé et ralenti, sur une distance de l'ordre du libre parcours moyen. Une part importante de l'énergie cinétique est convertie en énergie interne. Par conséquent, la température du gaz croît brutalement derrière le choc. Dans le cas de la rentrée de la capsule Apollo par exemple ($M = 36$), la température atteint environ $11000K$ (figure 1.3). La couche de choc est le siège d'intenses processus physico-chimiques, appelés effets haute-température ou effets de gaz réel [9] : l'élévation de température renforce

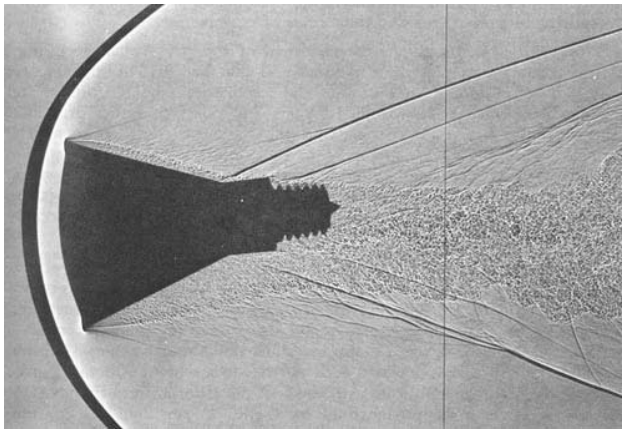


Fig. 1.2: Visualisation de l'écoulement autour d'un corps émoussé (Projet Mercury, NASA 1957)

l'agitation moléculaire. Les collisions entre les particules de gaz sont plus nombreuses et plus violentes, suffisamment pour exciter le mode de vibration des molécules, entraîner leur dissociation et même l'ionisation du gaz. La description microscopique de ces *processus collisionnels* est donnée au paragraphe 1.1.3.1.

Si l'excitation vibrationnelle et les réactions chimiques se font très rapidement en comparaison du temps que met un élément fluide pour se déplacer dans l'écoulement, la couche de choc est en *équilibre vibrationnel et chimique*. Dans le cas contraire, la couche de choc est en *déséquilibre*. Ce point est également détaillé au paragraphe 1.1.3.1.

A la paroi du corps de rentrée, un transfert chaleur s'opère du gaz chaud vers la paroi froide. Ce transfert est appelé *transfert convectif*. Il est maximal au point d'arrêt* car l'intensité de l'onde de choc est maximale au niveau de la ligne d'arrêt. Le taux de transfert convectif dépend de la nature de la paroi et de la géométrie du corps. Ainsi, au point d'arrêt, le flux convectif est, en première approximation, lié au rayon de nez R par la relation [9] :

$$q^C_{\text{arrêt}} = 1,83 \times 10^{-8}\, \rho_\infty^{1/2} u_\infty^3 R^{-1/2} \left(1 - \frac{h_w}{h_0}\right) \tag{1.5}$$

où les termes ρ_∞ et u_∞ désignent la densité et la vitesse du fluide à l'infini amont, h_w l'enthalpie à la paroi et h_0 l'enthalpie totale, grandeur conservée sur une ligne de courant. Le flux convectif est donc inversement proportionnel à la racine carré du rayon de nez. De plus, les effets de catalycité liés à la nature du matériau constituant la paroi (mélange silice, carbone, résine phénolique, acier, titane, beryllium...) entraînent une recombinaison plus ou moins complète

*Le point d'arrêt est le lieu géométrique caractérisé par une absence totale de mouvement. La ligne d'arrêt est la ligne de partage des filets d'air. Dans un écoulement autour d'un corps axisymétrique à incidence nulle, le point d'arrêt correspond au point de la paroi situé sur l'axe de symétrie. La ligne d'arrêt est alors la ligne de courant confondue avec l'axe de symétrie.

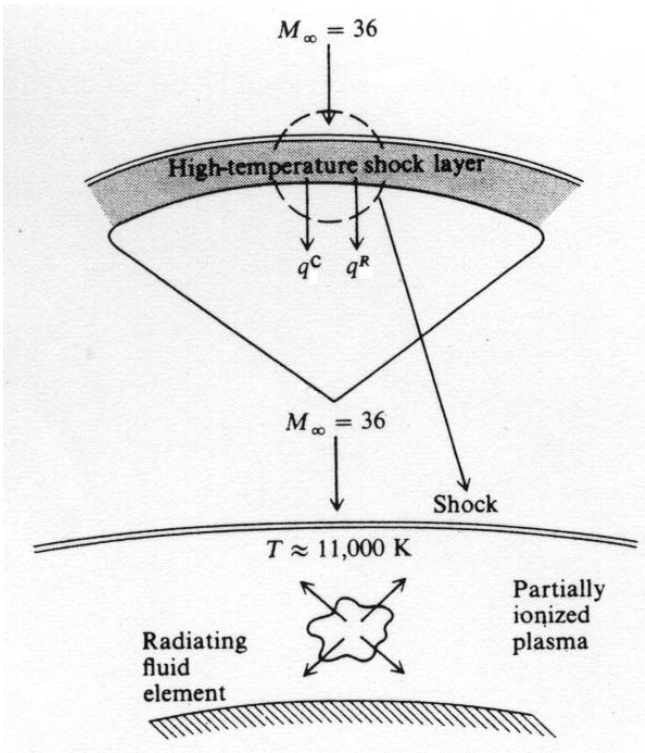


Fig. 1.3: Schéma de la couche de choc, Anderson [9]

des atomes ; ces réactions chimiques étant exothermiques, elles participent à l'échauffement de la paroi. Par ailleurs, l'utilisation de matériaux ablatifs permet de diminuer le taux de transfert convectif. En effet, un matériau ablatif est un matériau qui se sublime par pyrolyse. Le gaz émis par pyrolyse bloque les transferts de chaleur du gaz chaud vers la paroi.

Un autre phénomène peut modifier la structure de la couche de choc : il s'agit du *rayonnement thermique*. En effet, si la température dans la couche de choc est suffisamment élevée - pour l'air par exemple, le seuil de température se situe autour de $10000K$ [9] - le gaz rayonne. Dans ce cas, un élément de fluide perd de l'énergie par émission radiative (figure 1.3). Mais il peut aussi en emmagasiner par absorption du rayonnement émis depuis un autre élément de fluide ou depuis la paroi. Une description microscopique des *processus radiatifs* est donnée au paragraphe 1.1.3.2.

Le rayonnement de la couche de choc a principalement deux effets [9]. En premier lieu, l'écoulement devient *non-adiabatique*, c'est-à-dire que l'enthalpie totale ne se conserve plus le long d'une ligne de courant. Le phénomène est illustré sur la figure 1.4. Cette figure représente les profils d'enthalpie statique[†] le long de la ligne d'arrêt, pour un écoulement d'air à l'équilibre thermodynamique et chimique local et à une vitesse de $15,2km/s$. Le symbole δ désigne l'épaisseur de la couche de choc. La courbe supérieure est le profil sans rayonnement, la courbe inférieure correspond à une couche de choc émissive mais non-absorbante, et la courbe intermédiaire à une couche de choc émissive et absorbante. La non-adiabaticité de l'écoulement est clairement apparente sur cette figure : la perte d'énergie par émission radiative engendre

[†]Enthalpie totale et enthalpie statique sont liées par la relation : $H = h + 0,5\rho(u^2 + v^2)$. L'enthalpie totale est constante le long de la ligne d'arrêt. Dans le cadre des hypothèses de la figure 1.4 et hors effet radiatif, l'enthalpie statique est constante derrière l'onde de choc et hors de la couche limite.

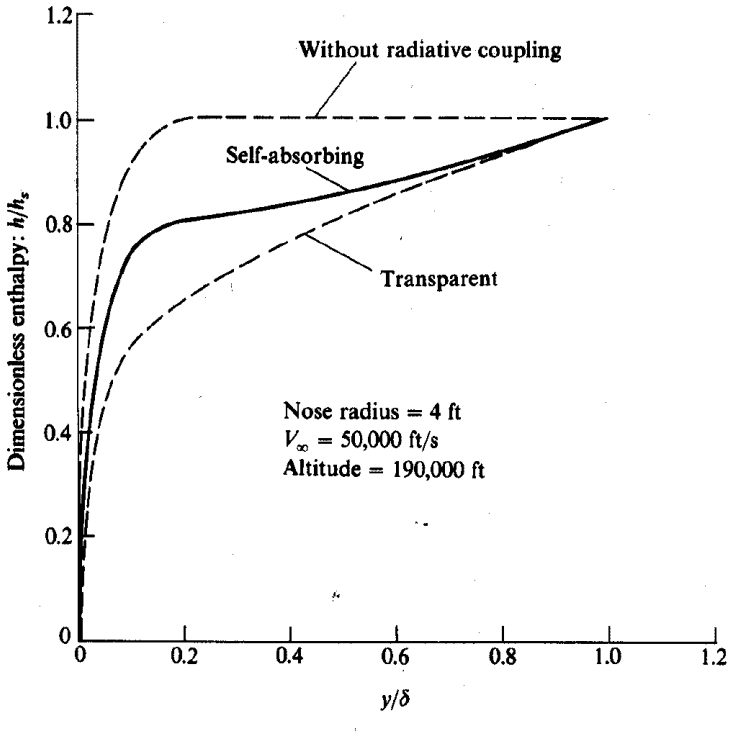


Fig. 1.4: Effets du couplage radiatif sur la couche de choc d'un écoulement d'air, le long de la ligne d'arrêt [9] (l'abscisse $y = 0$ correspond à la paroi, l'indice s fait référence au choc)

le refroidissement du gaz, et donc la diminution du niveau d'enthalpie dans l'écoulement. Cet effet est appelé effet de "radiation cooling". Il est d'autant plus marqué que le milieu absorbe peu. En effet, si le milieu est auto-absorbant, il récupère par absorption une partie de l'énergie cédée par émission. Par conséquent, le niveau d'enthalpie d'un milieu auto-absorbant est plus élevé que celui d'un milieu transparent.

Le second effet du rayonnement concerne l'échauffement de la paroi. En effet, le refroidissement de la couche de choc diminue le taux de transfert convectif. Cependant, à la composante convective s'ajoute une autre *composante de flux de chaleur, d'origine radiative*. A faible vitesse, la composante radiative est négligeable devant son homologue convective. En revanche, lorsque la vitesse de rentrée croît, cette tendance s'inverse et le flux radiatif devient prédominant (figure 1.5). On comprend ce phénomène en explicitant brièvement les deux termes du flux de chaleur. Le flux convectif est typiquement relié à la température et à la conductivité thermique η du milieu par la loi de Fourier : $q^C = -\eta \partial_x T$. Le flux radiatif, quant à lui, évolue typiquement en fonction de la puissance quatrième de la température [135] : $q^R \propto T^4$. Comme la température dans la couche de choc augmente avec la vitesse de l'écoulement, on comprend qu'au delà d'une certaine vitesse, les transferts radiatifs puissent devenir prépondérants devant les transferts convectifs. D'après la figure 1.5, pour un écoulement d'air, la vitesse critique est de l'ordre de $10 km/s$.

Dans l'hypothèse d'un gaz non-absorbant, le flux radiatif au point d'arrêt peut être estimé par la relation [9] :

$$q^R_{\text{arrêt}} = \frac{P_e^R \delta}{2} \tag{1.6}$$

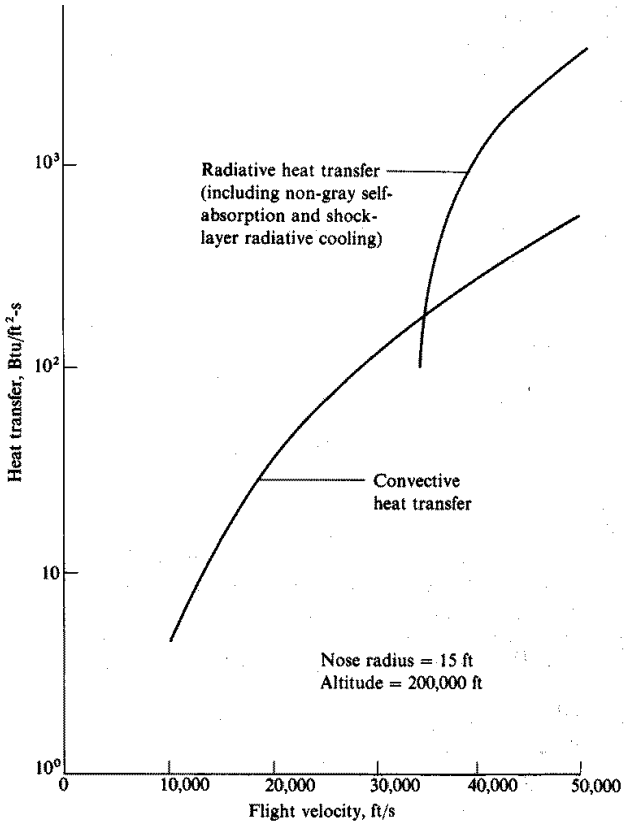


Fig. 1.5: Comparaison des flux de chaleur convectif et radiatif au point d'arrêt pour un écoulement d'air, Anderson [9]

où P_e^R désigne la puissance totale émise par le gaz dans toutes les directions par unité de volume. Par ailleurs, la distance δ peut être estimée par :

$$\delta = \frac{R}{\rho_{\text{choc}}/\rho_\infty} \tag{1.7}$$

où ρ_{choc} désigne la masse volumique du gaz juste derrière l'onde de choc et R le rayon de nez. La combinaison de ces deux relations conduit à l'expression :

$$q^R_{\text{arrêt}} = \frac{P_e^R}{2} R \frac{\rho_\infty}{\rho_{\text{choc}}} \tag{1.8}$$

Le flux radiatif d'une couche de choc émissive non-absorbante est donc directement proportionnel au rayon de nez. Au contraire, l'échauffement convectif est inversement proportionnel à la racine carrée du rayon de nez. On en déduit que la conception d'un véhicule de rentrée, pour une mission où le rayonnement joue un rôle non négligeable, passe par un compromis sur le dimensionnement du rayon de nez : pour réduire le flux convectif, choisir un grand rayon de nez, pour réduire le flux radiatif, choisir un petit rayon de nez.

1.1.3 Description microscopique des processus physico-chimiques de couche de choc

1.1.3.1 Processus collisionnels

Lorsqu'on élève la température d'un gaz, l'agitation moléculaire augmente. Les échanges énergétiques au cours des collisions entre les particules de gaz donnent naissance à différents phénomènes physico-chimiques.

Tout d'abord, les molécules sont *excitées vibrationnellement*. Considérons par exemple une molécule d'oxygène O_2. L'énergie de la molécule se répartit sur différents modes correspondant à ses degrés de liberté : translation, rotation, vibration, excitation électronique. En effet, la molécule peut se déplacer dans l'espace, elle possède donc une énergie de translation. Elle peut tourner autour des trois axes orthogonaux définissant un repère dans l'espace, elle possède donc une énergie de rotation. Les deux atomes d'oxygène O qui la constituent peuvent vibrer autour d'une position d'équilibre au sein de la molécule. La molécule possède donc une énergie de vibration. Enfin, les électrons sont en mouvement autour du noyau de chaque atome d'oxygène. Par conséquent, la molécule possède une énergie électronique. Chacune de ces énergies est quantifiée, c'est-à-dire qu'elle ne peut prendre que certaines valeurs discrètes, comme schématisé sur la figure 1.6.

L'excitation vibrationnelle de la molécule correspond à la croissance, suite aux collisions, de son énergie de vibration. Celle-ci passe d'un niveau i à un niveau supérieur $j > i$. La molécule O_2 doit subir un grand nombre de collisions pour être ainsi excitée vibrationnellement. Le nombre de collisions conduisant à l'excitation vibrationnelle varie selon l'espèce chimique. Il dépend également de l'énergie cinétique mise en jeu lors des collisions, et donc de la température du milieu. Dans l'air, composé majoritairement de molécules d'azote N_2 et d'oxygène O_2, l'excitation vibrationnelle devient importante pour des températures supérieures à $800K$ [9].

Lorsqu'on élève encore la température du gaz, des *réactions chimiques* peuvent se produire. Reprenons l'exemple de la molécule O_2. A température élevée, les collisions sont plus nombreuses et plus violentes, à tel point que la molécule se dissocie pour former des atomes d'oxygène O. Typiquement, 200000 collisions sont nécessaires pour que la molécule O_2 se dissocie [9]. Pour l'air à une pression de $1atm$, la dissociation du dioxygène débute autour de $2000K$. Elle est totale

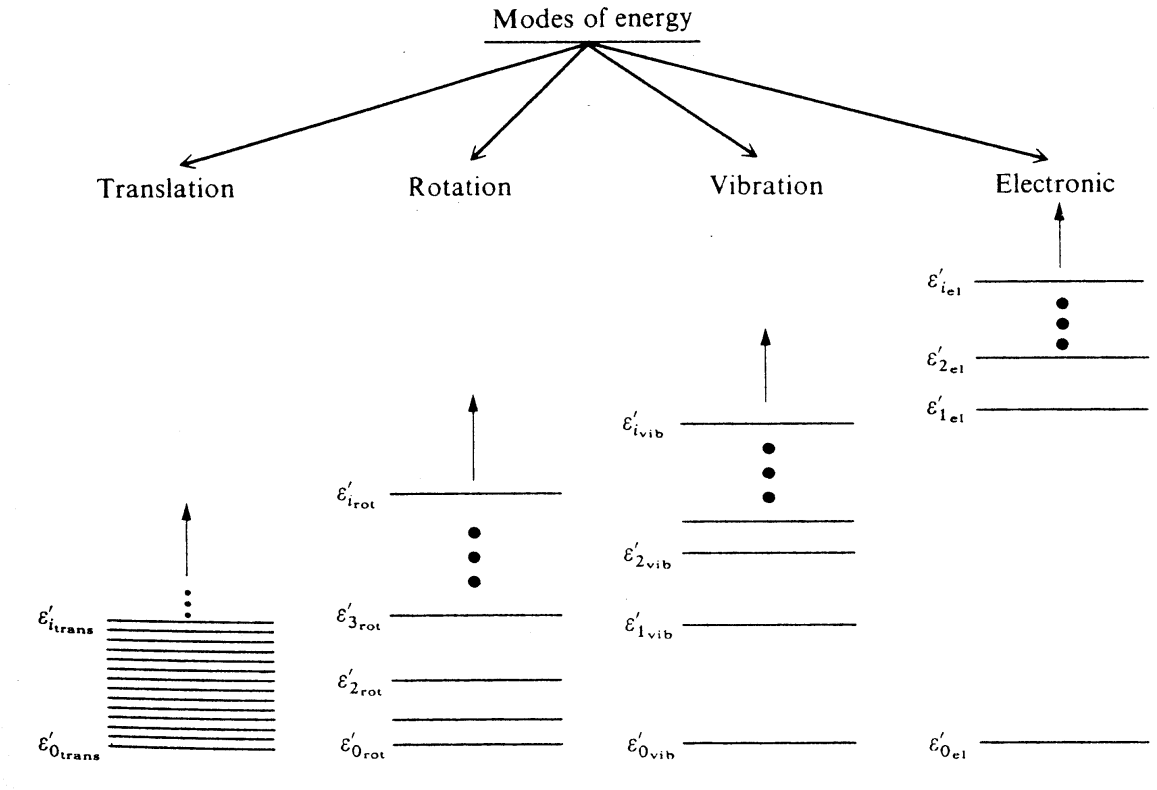


Fig. 1.6: Schématisation des niveaux d'énergie sur les différents modes d'énergie d'une molécule [9]

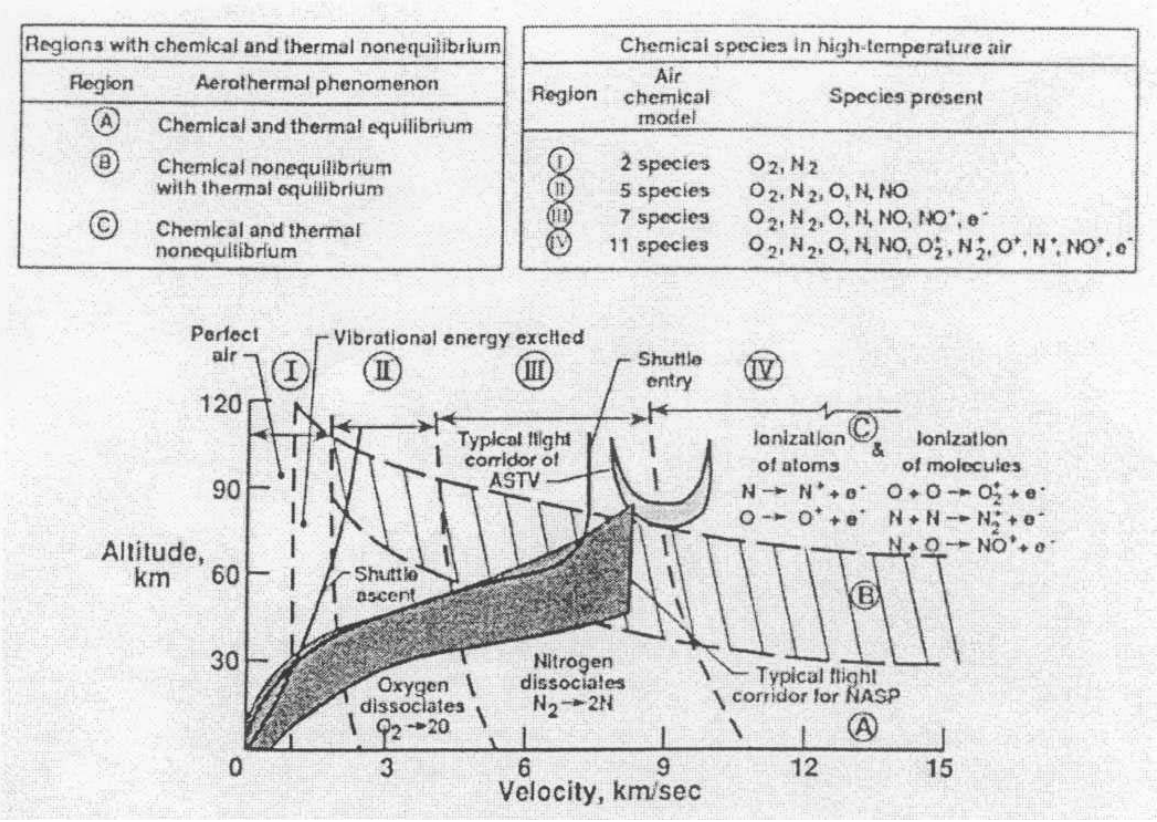


Fig. 1.7: Caractérisation thermochimique d'un écoulement d'air autour d'une sphère de $30,5cm$ de rayon [83, 190]

pour une température de $4000K$. A cette température, la dissociation du diazote commence. Elle est totale lorsque la température atteint $9000K$. Au-delà de $9000K$, l'énergie collisionnelle peut être suffisante pour qu'un électron du cortège électronique d'une particule lourde soit arraché. Il se forme alors un ion. Le gaz devient partiellement ionisé.

L'occurence des processus collisionnels, exprimée ci-dessus en fonction de la température, peut également s'exprimer en terme de régime de vitesse et d'altitude. Ainsi, dans le cas d'une rentrée terrestre, la figure 1.7 montre que l'excitation vibrationnelle des molécules devient importante pour des vitesses de l'ordre de $2km/s$ (zone I). Les molécules d'oxygène se dissocient lorsque la vitesse atteint environ $3km/s$ (zone II), les molécules d'azote pour des vitesses de l'ordre de $6km/s$ (zone III). L'ionisation de l'air débute lorsque la vitesse dépasse environ $6km/s$ (zone IV).

A l'équilibre, la répartition de l'énergie d'une particule sur ses différents modes d'énergie est déterminée par les conditions de pression et de température. Un tel équilibre règne en amont du choc. A la traversée de l'onde de choc, la température et la pression du milieu s'élèvent brusquement. Derrière le choc, la particule tend à évoluer vers la nouvelle condition d'équilibre. Ce processus nécessite des collisions, et donc du temps. Or, dans l'intervalle de temps nécessaire pour qu'un nombre suffisant de collisions se produise, la particule s'est déplacée d'une certaine distance vers l'aval. Par conséquent, dans la région immédiatement en aval du choc, le milieu n'est pas dans les conditions d'équilibre, il est *hors équilibre*.

On définit le temps de relaxation chimique comme le temps nécessaire pour atteindre l'état d'équilibre chimique. Si ce temps est supérieur au temps caractéristique de l'écoulement, lié au mouvement des particules, il existe une région derrière le choc dans laquelle le milieu est en *déséquilibre chimique*.

De manière similaire, à chaque mode d'énergie on peut associer un temps caractéristique relatif au nombre de collisions nécessaire pour atteindre l'équilibre. Il suffit de quelques collisions pour que l'énergie de translation d'une particule atteigne la valeur de l'équilibre. Le temps caractéristique associé à ce mode est donc très court, de l'ordre de $10^{-9}s$ [24]. Une dizaine de collisions est nécessaire pour atteindre l'équilibre du mode rotationnel, environ 20000 pour le mode vibrationnel [201]. Le temps de relaxation du mode de vibration est donc nettement plus grand que celui des modes de translation et de rotation. Il peut donc exister une région de *déséquilibre vibrationnel* derrière le choc, tandis que les modes de translation et de rotation sont considérés à l'équilibre.

Dans les conditions de déséquilibre vibrationnel, on ne peut plus décrire l'énergie du mode de vibration d'une part et l'énergie des modes de translation et de rotation d'autre part, à l'aide d'une température unique. Le milieu est en *déséquilibre thermique*. De même, du fait de leur faible masse, les électrons libres sont beaucoup plus mobiles que les particules lourdes. Par conséquent, on ne peut pas décrire l'énergie du mode de translation des électrons et celle du mode de translation des particules lourdes à l'aide d'une même température. Le mode d'excitation électronique des particules lourdes peut également être en déséquilibre thermique par rapport au mode de translation.

La figure 1.7 présente les régimes de vitesse/altitude, dans le cadre d'une rentrée terrestre, pour lesquels la couche de choc est hors équilibre. Au début de la rentrée, la couche de choc est en déséquilibre thermochimique (zone C). Au cours de la descente, lorsque l'atmosphère se densifie et que l'engin est freiné, l'équilibre thermique s'installe en premier (zone B), puis l'équilibre chimique (zone A).

1.1.3.2 Processus radiatifs

Tout système physique se compose de deux sous-systèmes en interaction permanente : un système matériel et un champ de rayonnement [185]. Le *système matériel* est constitué de particules lourdes (atomes, molécules, ions) et d'électrons. Le *champ de rayonnement* électromagnétique résulte de la distribution dans l'espace des photons, caractérisés chacun par une fréquence, une quantité de mouvement et un état de spin.

De l'énergie est échangée en permanence entre le système matériel et le champ de rayonnement par différents processus :

- l'*émission* spontanée de rayonnement est une conversion d'énergie matérielle (énergie de rotation, vibration, d'excitation électronique...) en une énergie radiative (photons).
- l'*absorption* de rayonnement consiste en une conversion d'énergie radiative en énergie matérielle.
- l'*émission induite* résulte de la résonance entre un photon excitateur et une molécule et conduit à la production d'un photon identique à l'excitateur.

Certains processus comme la diffusion ou encore les réflexions, conduisent à des changements de direction d'un rayonnement incident mais ne modifient pas le bilan énergétique local du système matériel [185].

On appelle *transition radiative* l'interaction entre une particule du système matériel et un photon. On peut classer les transitions radiatives suivant les mécanismes qui en sont à l'origine. On distingue [214, 185] :

- *le mécanisme lié - lié* : l'état quantique d'une particule lourde A est décrit par les états associés à ses modes d'énergie. A un état quantique donné, on peut associer une énergie. Le mécanisme lié - lié correspond à la transition entre deux états quantiques p et q associés à des niveaux d'énergie distincts :

$$A(p) \rightleftharpoons A(q) + h\nu \quad (p > q)$$

Dans le sens direct de la réaction, la particule $A(p)$ se désexcite et la transition s'accompagne de l'émission d'un photon. Dans le sens inverse de la réaction, la particule $A(q)$ est excitée par un photon et ce dernier est absorbé au cours de la transition. L'énergie du photon est égale à la différence entre l'énergie initiale et l'énergie finale de la particule :

$$e_{photon} = h\nu = |e_A(p) - e_A(q)| \tag{1.9}$$

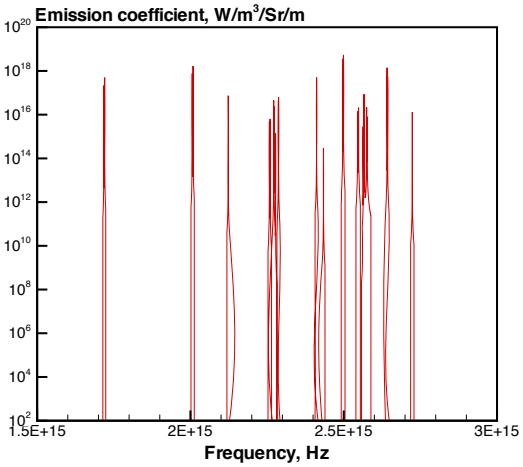
Le spectre associé à la transition constitue une raie d'absorption ou d'émission représentée en théorie par un Dirac à la fréquence ν. Cependant, différents phénomènes concourent à l'élargissement des raies : effet de largeur naturelle, effet de collisions (ou élargissement Lorentz), effet Doppler. Une raie est alors décrite par sa fréquence centrale, sa forme (profil de Lorentz, Gauss ou Voigt) et son intensité, calculée à partir des coefficients d'Einstein [214, 185].

- *Si la particule A est un atome,* la transition s'effectue d'un niveau électronique à un autre. A titre d'exemple, la figure 1.8(a) présente le spectre d'émission de l'atome d'azote obtenu pour une température de $11000K$ et une densité de $10^{22}m^{-3}$. Ces conditions thermodynamiques sont typiques de celles rencontrées sur la ligne d'arrêt du véhicule FIRE II [142], dont la vitesse de rentrée dans l'atmosphère terrestre est de l'ordre de $11km/s$.
- *Si la particule A est une molécule,* la transition d'un niveau électronique à un autre peut s'accompagner d'une modification de son état quantique rotationnel et/ou vibrationnel. Ceci conduit à un ensemble de raies, avec d'éventuels effets de couplages

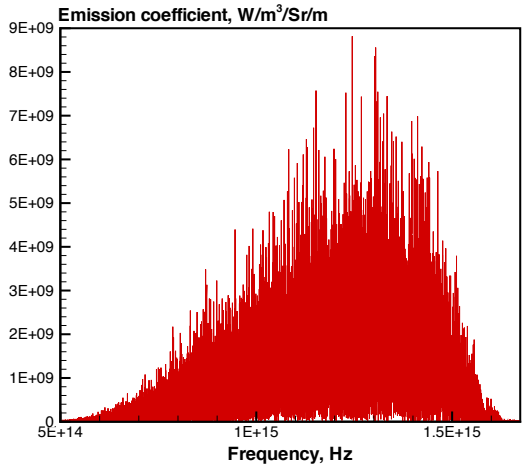
(distorsion centrifuge, effet de type Coriolis,... [185]). L'ensemble des raies associées à une transition entre deux niveaux de vibration déterminés constitue une bande. L'ensemble des transitions entre deux niveaux électroniques déterminés constitue un système moléculaire. La figure 1.8(b) présente par exemple le spectre d'émission du système de Schumann-Runge de la molécule O_2, obtenu pour une température de $11000K$ et une densité de $10^{17}m^{-3}$.

- *le continuum* : Le continuum est causé par des transitions mettant en jeu des électrons libres. On peut le diviser en mécanisme libre - libre et mécanisme lié - libre :

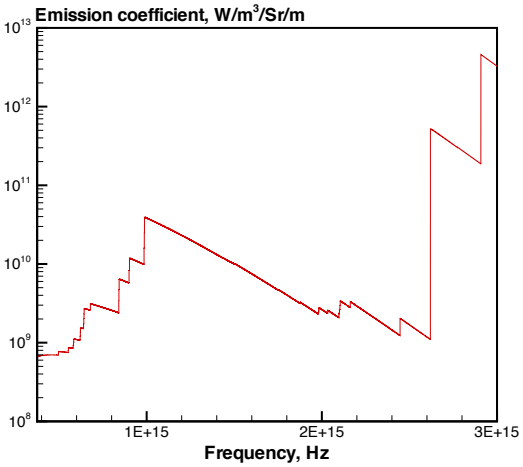
  - *le mécanisme libre - libre* : ce mécanisme résulte de l'interaction entre un électron libre et une particule lourde. Il se traduit par le freinage ou l'accélération de l'électron.



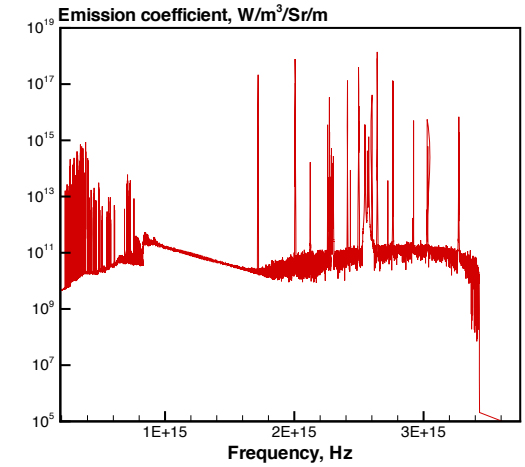
(a) **Spectre atomique de l'azote** N, $T = 11000K$, $n_N = 10^{22}m^{-3}$



(b) **Spectre moléculaire du système de Schumann-Runge de la molécule** O_2, $T = 11000K$, $n_{O_2} = 10^{17}m^{-3}$



(c) **Spectre d'émission associé au continuum pour un gaz** N, N^+, e^-, $T = 11000K$, $n_N = 10^{22}m^{-3}$, $n_{N^+} = n_{e^-} = 10^{21}m^{-3}$



(d) **Spectre d'émission typique de rentrées terrestres à une vitesse de** $11km/s$

Fig. 1.8: Spectres d'émission

L'écart d'énergie cinétique correspond à l'énergie échangée avec le champ radiatif :

$$h\nu = \frac{1}{2} m_e |u_{e_f}^2 - u_{e_i}^2| \tag{1.10}$$

où u_e désigne la vitesse de l'électron, avant (indice i) et après (indice f) la transition, et m_e la masse de l'électron. La vitesse de l'électron pouvant varier de 0 à l'infini, les transitions ne sont pas quantiques et la fréquence du photon peut prendre n'importe quelle valeur. Le spectre associé aux transitions libre - libre est donc continu. Le rayonnement résultant de ce mécanisme est appelé Bremsstrahlung [214].

- *le mécanisme lié - libre* : on regroupe sous cette dénomination les processus de photoionisation, photodétachement, photodissociation, photoionisation dissociative et leurs inverses. PAr exemple, le processus inverse à la photoionisation correspond au réattachement radiatif, où un électron, libre à l'origine, est rattaché à la population d'électrons liés d'une molécule. Une molécule d'une nouvelle espèce, dans un état d'énergie p, est produite. Un exemple de processus de réattachement radiatif est donné par :

$$A^+ + e^- \rightarrow A(p) + h\nu$$

Pour cette réaction, la conservation de l'énergie s'écrit :

$$h\nu = E_{ionisation,p} + \frac{1}{2} m_e u_e^2 \tag{1.11}$$

Le terme $E_{ionisation,p}$ désigne l'énergie d'ionisation de la molécule A depuis le niveau quantique p.
La vitesse de l'électron u_e pouvant varier de 0 à l'infini, le rayonnement associé aux transitions lié - libre est continu. Par ailleurs, le spectre a une structure en dents de scie. Cette caractéristique est illustrée sur la figure 1.8(c). Sur cette figure, on a tracé le spectre d'émission associé au continuum pour un gaz contenant les espèces N, N^+ et e^- dans les conditions thermodynamiques suivantes : $T = 11000K$, $n_N = 10^{22} m^{-3}$, $n_{N^+} = n_{e^-} = 10^{21} m^{-3}$. Le spectre est bien continu et on constate qu'à certaines fréquences, le niveau d'émission chute brusquement. Ces décrochements interviennent aux fréquences où un niveau électronique supérieur $q > p$ est atteint, tel que l'énergie d'ionisation depuis le niveau q est inférieure à l'énergie d'ionisation depuis le niveau p : $E_{ionisation,q} < E_{ionisation,p}$.
La réaction de photodissociation et la réaction inverse de recombinaison radiative s'écrivent :

$$AB + h\nu \rightleftharpoons A + B$$

Dans ce cas, l'énergie du photon correspond à l'énergie nécessaire pour briser la liaison entre les molécules A et B. La réaction de photoionisation dissociative diffère de la précédente par le fait que les produits de la dissociation de la molécule AB sont de la forme $A + B^+ + e^-$. Enfin, la réaction de photodétachement s'écrit :

$$A^- + h\nu \rightarrow A + e^-$$

Les spectres d'émission et d'absorption d'un gaz contiennent l'ensemble de ces transitions. Sur la figure 1.8(d), on présente un spectre d'émission typique du rayonnement de couche de choc dans un écoulement de rentrée terrestre à une vitesse de l'ordre de $11km/s$. On distingue principalement les raies atomiques des atomes N et O, le rayonnement moléculaire des espèces N_2 - fréquences comprises entre $1,7 \cdot 10^{15} Hz$ et $3,2 \cdot 10^{15} Hz$ - et N_2^+ - fréquences comprises entre $0,45 \cdot 10^{15} Hz$ et $1,35 \cdot 10^{15} Hz$ - et le continuum.

1.2 Modélisation des écoulements de rentrée

On s'intéresse à la modélisation des phénomènes se produisant dans une couche de choc ionisée et rayonnante en déséquilibre thermochimique. Pour être exhaustive, la modélisation doit prendre en compte l'ensemble des processus collisionnels et radiatifs.

L'approche la plus précise est l'*approche niveau-par-niveau*. Elle consiste à dériver les équations régissant la densité d'occupation de chaque niveau d'énergie pour chaque espèce chimique présente dans l'écoulement. Les taux de peuplement et de dépeuplement des niveaux s'obtiennent à l'aide d'un modèle collisionnel-radiatif [149, 113, 5, 6]. L'énergie du mélange est directement calculée à partir des densités d'occupation des niveaux et de leur énergie quantique, sans recourir à la notion de température.

L'approche niveau-par-niveau est très complexe et très coûteuse. En effet, le nombre de niveaux d'énergie est très grand pour chaque espèce chimique. Pour l'atome d'oxygène par exemple, la base de donnée ASD du NIST [140] répertorie plus de 400 niveaux d'énergie, conduisant à près de 6000 transitions radiatives. Pour la molécule de dioxygène, les degrés de liberté supplémentaires (rotation, vibration) conduisent à un nombre de niveaux quantiques et de transitions encore plus élevé. Modéliser les taux de peuplement et de dépeuplement des niveaux dus à chaque processus physico-chimique est donc extrêmement complexe.

Aliat [5, 6] par exemple utilise une approche niveau-par-niveau pour étudier l'écoulement d'un gaz de monoxyde de carbone derrière une onde de choc. Le cadre d'étude est limité à une configuration monodimensionnelle sans effet de paroi (configuration de type tube à choc). L'utilisation rigoureuse d'une telle approche n'est, à ce jour, pas envisageable pour traiter les problèmes de couche de choc.

L'approche couramment utilisée (voir par exemple les références [147, 88, 178]) consiste à séparer la modélisation des processus collisionnels de celle des processus radiatifs.

La dynamique du gaz en déséquilibre thermochimique est traitée à l'aide des équations de Navier-Stokes multi-espèce et d'un *modèle multitempérature* (§ 1.2.1). L'énergie du gaz est calculée en supposant que le peuplement des modes d'énergie des particules suit des distributions de Boltzmann aux températures définies dans le modèle multitempérature.

Le champ de rayonnement est calculé à l'aide d'un *modèle radiatif* composé, selon la terminologie proposée par Surzhikov [177], d'un modèle de propriétés radiatives et d'une méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif (§ 1.2.2).

Les interactions entre le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement sont modélisées à l'aide d'une méthode de couplage (§ 1.2.3).

Une *approche hybride* entre l'approche niveau-par-niveau et l'approche multitempérature est également possible. On peut citer l'approche proposée par Broc [23], qui consiste à résoudre les équations régissant le peuplement de quelques niveaux électroniques, en choisissant les niveaux les plus peuplés et les plus émissifs. Le peuplement des autres niveaux et des autres modes d'énergie est calculé par une approche multitempérature. L'énergie du gaz est également calculée par une approche multitempérature. Cependant, cette modélisation reste coûteuse en temps de calcul et n'est utilisée qu'en configuration monodimensionnelle.

1.2.1 Hydrodynamique des couches de choc

1.2.1.1 Modélisation du déséquilibre par une approche multitempérature

L'approche la plus répandue pour modéliser le déséquilibre de la couche de choc est l'approche multitempérature combinée à un modèle de cinétique chimique [116, 147, 66].

L'*approche multitempérature* permet la représentation du déséquilibre thermique. Elle consiste à supposer que pour chaque mode d'énergie, le peuplement des niveaux suit une distribution de Boltzmann à une température caractéristique du mode considéré. Ce postulat se base sur l'hypothèse que le transfert collisionnel d'énergie au sein d'un mode d'énergie est très rapide en comparaison des transferts vers les autres modes [172]. La distribution statistique en énergie microscopique $\varepsilon_{mode,s}$ sur le mode *mode* d'une particule de l'espèce s est supposée suivre une loi de Boltzmann de la forme :

$$f(\varepsilon_{mode,s}) = \exp\left(\frac{\varepsilon_{mode,s}}{kT_{mode,s}}\right) \tag{1.12}$$

où $T_{mode,s}$ désigne la température associée au mode considéré. Ainsi, pour une espèce moléculaire m, on définit les températures de translation $T_{t,m}$, de rotation $T_{r,m}$, de vibration $T_{v,m}$ et d'excitation électronique $T_{el,m}$. Une espèce atomique s ne possède que les deux modes de translation et d'excitation électronique, pour lesquels on définit les températures $T_{t,s}$ et $T_{el,s}$. Pour un électron libre, on définit la température de translation T_e. L'approche multitempérature ne permet pas de représenter les conditions de très fort déséquilibre, car dans ce cas le peuplement des niveaux s'éloigne fortement de l'hypothèse d'une distribution de Boltzmann.

Dans la pratique, on simplifie le modèle pour réduire le nombre de températures, et donc d'inconnues du problème. Par exemple, on a coutume de considérer une seule température T pour les modes de translation et de rotation de l'ensemble des espèces lourdes, car un très petit nombre de collisions est suffisant pour équilibrer ces deux modes. Les modes de translation et de rotation des espèces lourdes constituent un réservoir énergétique thermalisé à la température T.

Les modèles les plus répandus sont le modèle deux-température (T,T_{v-el-e}) de Park [147] et le modèle trois-température (T,T_v,T_{el-e}) de Gnoffo *et al.* [66]. Dans le premier modèle, Park [147] fait l'hypothèse que les modes de vibration des molécules, d'excitation électronique des espèces lourdes et de translation des électrons sont à l'équilibre. Dans le second modèle, Gnoffo *et al.* [66] distinguent deux réservoirs liés respectivement au mode de vibration des espèces moléculaires, et aux modes d'excitation électronique des espèces lourdes et de translation des électrons. D'autres modèles sont décrits dans l'étude bibliographique présentée au paragraphe 1.3.1.

Le *modèle de cinétique chimique* permet la représentation du déséquilibre chimique. Il consiste à lister les réactions chimiques prépondérantes prenant place dans l'écoulement et à établir les taux de production/destruction des espèces chimiques à l'issue des réactions. Ces taux sont fonction notamment des températures. Les modèles de cinétique chimique terrestre les plus utilisés sont les modèles de Dunn-Kang [62] et de Park [146, 148, 150]. Pour la cinétique chimique en atmosphère martienne, on peut citer les travaux de Park *et al.* [152].

1.2.1.2 Système d'équations de Navier-Stokes

Dans l'hypothèse de régime continu, la description de l'écoulement s'obtient par la résolution des *équations de Navier-Stokes*, écrites à partir du principe de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

Considérons un mélange gazeux composé de différentes espèces chimiques s. Soit $n_s(\mathbf{x}, t)$ la densité de particules de l'espèce s en un point $\mathbf{x}$ de l'espace à l'instant t. Si l'on exprime par $< \phi_s >$ la valeur d'une propriéte conservative moyennée sur un petit élément de volume macroscopique, la loi de conservation de cette valeur s'écrit [11] :

$$\underbrace{\partial_t n_s < \phi_s >}_{variation\ temporelle} + \underbrace{\partial_{x_j} n_s < \phi_s u_{js} >}_{convection} = \underbrace{S(< \phi_s >)}_{terme\ source} \tag{1.13}$$

La variable u_{js} désigne la composante, dans la direction x_j, de la vitesse à laquelle est transportée la grandeur $< \phi_s >$. Le terme source représente les variations de $< \phi_s >$ causées par des champs de forces extérieures comme la gravité ou un champ électromagnétique, ainsi que les variations dues aux interactions de toutes les particules contenues dans le mélange gazeux avec les particules de type s contenues dans le petit élément de volume. Ce terme inclut les interactions entre les particules de type s.

Dans le cadre de la résolution des couches de choc en déséquilibre thermochimique, le système d'équations se compose des équations de bilan de masse de chaque espèce chimique, des équations bilan de quantité de mouvement et des équations bilan d'énergie pour chaque réservoir énergétique correspondant à chacune des températures du modèle multitempérature [116, 66]. Le système d'équations, qualifié de convecto-diffusif, s'écrit sous la forme générale :

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = \partial_x \left(\mathcal{D}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}\right) \tag{1.14}$$

Le vecteur $\mathbf{u}$ désigne l'ensemble des variables conservatives (masses volumiques des espèces, quantités de mouvement, énergies massiques). La matrice $\mathcal{A}(\mathbf{u})$ est liée aux phénomènes convectifs et le tenseur $\mathcal{D}(\mathbf{u})$ aux phénomènes dissipatifs. Ce dernier contient un certain nombre de termes à modéliser : les termes de production/destruction chimique, déterminés à l'aide de modèles de cinétique chimique [210, 62, 96, 146, 148, 150, 152, 71, 72], les termes de transport (tenseur de viscosité [208, 182, 20, 12, 116, 79], conduction thermique [208, 213, 136, 13, 116, 79], diffusion [213, 116, 77, 79]), les termes d'échange énergétique entre les différents réservoirs d'énergie [19, 132, 131, 11, 116, 147, 128, 25, 44, 22] et les termes de couplage entre la cinétique chimique et les modes énergétiques [125, 96, 147, 149, 108].

1.2.1.3 Déséquilibre thermique des électrons

Dans ce paragraphe, on s'intéresse particulièrement à la représentation du déséquilibre thermique du gaz d'électrons libres dans l'approche multitempérature.

L'énergie échangée au cours d'une collision entre un électron et une particule lourde s est très faible car elle est proportionnelle au rapport de masse m_e/m_s [11]. Par conséquent, le nombre de collisions nécessaires pour que les modes de translation des particules lourdes et des électrons s'équilibrent est très grand. De ce fait, la température de translation du gaz d'électrons T_e est distincte de la température T.

En 1964, Appleton et Bray [11] ont les premiers dérivé une équation de bilan d'énergie du gaz d'électrons libres. L'équation inclut les termes d'échange énergétique e-T (électron-translation des espèces lourdes) et le travail du champ électrique induit par la séparation de charge. Le champ électrique s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{E}_i = -\frac{1}{n_e q_e}\frac{\partial p_e}{\partial x_i} \tag{1.15}$$

où n_e, q_e et p_e représentent respectivement le nombre de densité, la charge et la pression des électrons. Le travail du champ électrique s'écrit sous la forme $u_{e,i}\frac{\partial p_e}{\partial x_i}$. Les termes dissipatifs, notamment le terme de conduction thermique, sont négligés.

En 1984, Lee [116] a complété l'équation en ajoutant les termes de conduction thermique et de diffusion, le terme de perte d'énergie dû aux réactions d'ionisation ou de dissociation par impact d'électrons, ainsi que le terme d'échange énergétique e-V entre les électrons et les modes vibrationnels des molécules.

En 1993, Coquel et Marmignon [50] dérivent une relation de fermeture sur le champ électrique plus complète que celle proposée par Appleton et Bray [11] :

$$n_e q_e \mathcal{E}_i = -\partial_{x_i} p_e + y_e \partial_{x_i}(p + p_e) \tag{1.16}$$

où y_e désigne la fraction massique d'électrons et p la pression des espèces lourdes. Le bilan d'énergie des électrons s'écrit alors :

$$\underbrace{\partial_t \rho e_e}_{1} + \underbrace{\partial_{x_j}[(\rho e_e + p_e)u_j]}_{2} - \underbrace{u_j \partial_{x_j} p_e}_{3} = \underbrace{\partial_{x_j}(\eta_e \partial_{x_j} T_e)}_{4} + \underbrace{\partial_{x_j}(\rho h_e D_e \partial_{x_j} y_e)}_{5} + \underbrace{S_{e-t,v,r,el}}_{6} + \underbrace{\dot{w}_e e_e}_{7} \tag{1.17}$$

Les sept termes contenus dans cette équation représentent :

(1)	Taux de variation temporelle de l'énergie du gaz d'électrons par unité de volume
(2)	Flux d'enthalpie du gaz d'électrons convectée à la vitesse du mélange u_j
(3)	Travail du champ électrique
(4)	Conduction de l'énergie du gaz d'électrons due au gradient de température
(5)	Diffusion de l'enthalpie du gaz d'électrons due aux gradients de concentration
(6)	Echange d'énergie entre les espèces lourdes et les électrons par collisions élastiques (échanges avec le mode de translation) et inélastiques (échanges avec les modes d'énergie interne)
(7)	Energie du gaz d'électrons perdue ou gagnée lors de réactions chimiques

L'équation (1.17) est une des équations du système convecto-diffusif (1.14). La résolution de ce système passe par la résolution du système convectif nonlinéaire qui en est extrait. Ce dernier s'écrit :

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = 0 \tag{1.18}$$

La matrice $\mathcal{A}$ est supposée diagonalisable à valeurs propres réelles pour tout $\mathbf{u}$ dans l'espace des phases. Cette propriété fait que le système nonlinéaire (1.18) est hyperbolique. Ce type de système n'admet pas de solution globalement définie en temps puisque sa nonlinéarité peut engendrer des discontinuités. Ces mêmes nonlinéarités font que les discontinuités ne peuvent pas être arbitraires. Elles doivent satisfaire un ensemble de relations liant leur vitesse de propagation à leurs états gauche et droit, appelées relations de saut.

La connaissance des relations de saut est cruciale pour la résolution du système (1.18) puisqu'elles permettent de le fermer. Leur caractérisation dépend étroitement de la propriété qu'a la matrice $\mathcal{A}$ de coïncider ou non avec la matrice jacobienne d'une certaine fonction flux $\mathbf{f}$. Le système (1.18) est conservatif lorsque la fonction flux $\mathbf{f}$ existe (il se met alors sous la forme $\partial_t \mathbf{u} + \nabla.\mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0$), et non conservatif dans le cas contraire.

Pour un système conservatif, les relations de saut sont indépendantes de la nature du tenseur de dissipation $\mathcal{D}$ sous-jacent et sont appelées conditions de Rankine-Hugoniot. Pour un système non conservatif, elles dépendent entièrement du tenseur dissipatif et sont en général inconnues.

Dans le système convectif, l'équation liée à l'énergie des électrons s'écrit :

$$\partial_t \rho e_e + \partial_{x_j}[(\rho e_e + p_e)u_j] - u_j \partial_{x_j} p_e = 0 \tag{1.19}$$

Dans cette équation, le travail du champ électrique est écrit sous forme non conservative. En vertu de ce qui a été dit plus haut, les relations de saut sont donc inconnues et le problème

mal posé. Ajoutons que le terme non conservatif doit être reconnu comme partie intégrante de l'opérateur convectif et non pas considéré comme un terme source, contrairement aux études menées précédemment sur le sujet [25, 66, 101]. Assimiler ce type de produit non conservatif à un terme source est non seulement faux mathématiquement mais à l'origine d'instabilités numériques lorsqu'ils sont pris en compte à la traversée du choc.

Par conséquent, Coquel et Marmignon [50] ont recherché un moyen d'accéder aux relations de saut fermant le système convectif non conservatif (1.18). L'idée a été d'associer à ce système un système conservatif compatible, c'est-à-dire un système qui possèderait les trois caractéristiques suivantes : 1) le système associé s'écrit sous forme conservative, 2) il possède les mêmes solutions régulières que le système initial, 3) les solutions ondes de choc sont compatibles avec les phénomènes dissipatifs considérés. La méthode conduit bien à la connaissance explicite des relations de saut du système (1.18) puisque celles-ci coïncident avec les conditions de Rankine-Hugoniot d'un système conservatif compatible.

Les deux étapes de la démarche ont donc consisté à rechercher toutes les lois de conservation satisfaites par les solutions régulières du système convectif, puis à sélectionner les grandeurs transportées assurant la compatibilité avec les phénomènes dissipatifs sous-jacents.

Malheureusement, l'absence de proportionnalité entre les phénomènes dissipatifs propres aux électrons et aux espèces lourdes laisse penser qu'il n'existe pas de loi de transport non triviale solution du problème. En particulier, Coquel et Marmignon [50] pensent qu'il n'existe pas de système de lois de conservation compatible avec la prise en compte des phénomènes dissipatifs propres au gaz d'électrons. Par conséquent, les auteurs ont proposé de les négliger. Dans le cadre de cette hypothèse, l'entropie spécifique s_e associée au gaz d'électrons répond à la question et la loi de conservation associée s'écrit simplement :

$$\partial_t \rho s_e + \partial_{x_j} \rho s_e u_j = 0 \tag{1.20}$$

Cette loi, écrite sous forme conservative, remplace l'équation (1.19) dans le système convectif (1.18).

Coquel et Marmignon [50, 53] ont proposé successivement plusieurs lois entropiques s_e. Ils ont finalement adopté une grandeur qui présente l'intérêt d'être conservée même en présence de termes source chimiques. Cette grandeur s'écrit :

$$s_e = g\left(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\right) \tag{1.21}$$

où g est une fonction strictement croissante et γ_e le coefficient isentropique du gaz d'électrons.

Enfin, Coquel et Marmignon [53, 54, 124] ont résolu le système de lois de conservation équivalent pour calculer l'écoulement autour de la sonde RAM-C II [56, 166]. Ils ont utilisé un modèle chimique ne contenant qu'une seule espèce ionisée, soit l'ion NO^+.

Une étude complémentaire [50] a montré qu'il est préférable de résoudre un système conservatif équivalent plutôt que le système convectif non conservatif fermé par la donnée de ses relations de saut. Cette étude a porté sur un système de lois académique, non physique, dans lequel la viscosité du fluide est supposée nulle et la conductivité thermique des électrons égale à celle des particules lourdes. Ce choix a permis d'écrire un système conservatif et trois systèmes non conservatifs équivalents. Sur des cas d'épreuve de type tube à choc, Coquel et Marmignon [50] ont montré que l'emploi d'une formulation non conservative peut conduire à des erreurs dans la prédiction des amplitudes et des vitesses de propagation des discontinuités. La figure 1.9 illustre de manière très parlante ce propos, mettant en évidence les écarts entre la

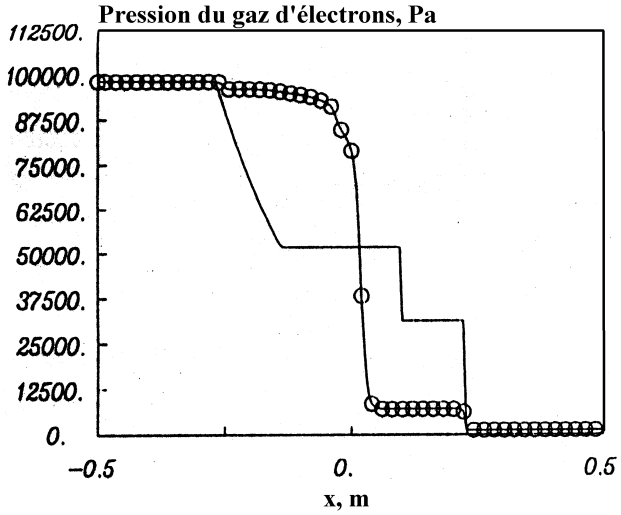


Fig. 1.9: Distribution de pression du gaz d'électrons (Coquel et Marmignon [50] ; cas test C, ∘ : formulation non conservative en p_e, schéma de Collela Glaz, 2^{nd} ordre ; − : solution exacte)

distribution de pression prédite par une formulation non conservative et la solution exacte. Les conclusions de cette étude de Coquel et Marmignon [50] étant la justification de l'ensemble de leur démarche - et cette étude n'étant pas publiée ailleurs que dans un rapport ONERA - on en reprend les analyses et les principaux résultats dans l'annexe A.

1.2.2 Transfert radiatif

1.2.2.1 Généralités sur les transferts radiatifs dans les milieux gazeux

On rappelle que tout système physique se compose de deux sous-systèmes en interaction permanente : le système matériel et le champ de rayonnement [185]. Vis-à-vis du rayonnement, on distingue trois catégories de systèmes matériels : les milieux transparents, les corps opaques, et le cas général des milieux semi-transparents.

- Un *milieu transparent* n'interagit pas avec le champ de rayonnement. Il n'émet, n'absorbe, ne réfléchit ni ne diffuse aucun rayonnement. Tout rayonnement incident est intégralement transmis quelles que soient sa direction et sa fréquence.
- Un *corps opaque* ne transmet aucune fraction de rayonnement incident. Tout rayonnement incident est soit totalement absorbé soit totalement réfléchi ou, le plus souvent, partiellement absorbé et réfléchi. Un corps opaque qui absorbe la totalité du rayonnement incident est appelé *corps noir*.
  Un corps opaque absorbant est susceptible d'émettre du rayonnement. Le bilan de flux surfacique d'énergie radiative s'écrit, en tout point de sa frontière, comme la différence entre le flux émis et le flux absorbé.
- Un *milieu semi-transparent* est susceptible d'émettre, d'absorber, de diffuser, de réfléchir et/ou de transmettre du rayonnement.

Dans la réalité, aucun système physique n'est strictement transparent ou opaque, il s'agit de cas limites idéaux.

Pour caractériser le rayonnement, on peut utiliser l'une des trois variables spectrales suivantes : la *longueur d'onde* λ, la *fréquence* ν et le *nombre d'onde* $\tilde{\nu}$. La longueur d'onde est

homogène à une longueur, la fréquence à l'inverse d'un temps, et le nombre d'onde à l'inverse d'une longueur. Les relations qui lient ces trois grandeurs sont les suivantes :

$$\nu = \tilde{\nu} c_0 = \frac{c_0}{n_{\tilde{\nu}}(\mathbf{r}, \mathbf{u})\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{u})} \tag{1.22}$$

Le terme c_0 désigne la célérité du rayonnement dans le vide et $n_{\tilde{\nu}}$ l'indice optique complexe du milieu. La longueur d'onde d'un rayonnement qui se propage dans un milieu réel quelconque dépend de la position $\mathbf{r}$ dans le milieu et de la direction de propagation Δ, de vecteur unitaire $\mathbf{u}$. En revanche, la fréquence et le nombre d'onde sont invariants dans un référentiel donné. Il n'est donc pas judicieux d'utiliser la longueur d'onde pour caractériser le rayonnement dans un milieu semi-transparent quelconque.

Dans le cas d'un indice optique unitaire, d'après les relations ci-dessus, la longueur d'onde est également invariante dans un référentiel donné. Ainsi, les trois variables spectrales peuvent être utilisées indifféremment pour caractériser le rayonnement. On se place désormais dans le cadre de cette hypothèse puisque pour les milieux gazeux, l'indice optique vaut 1 à 10^{-4} près [185].

Le champ de rayonnement électromagnétique est caractérisé à l'échelle macroscopique par la connaissance en tout point $\mathbf{r}$ du milieu, pour toute direction Δ de vecteur directeur $\mathbf{u}$ et pour toute longueur d'onde λ, d'une grandeur énergétique $I_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ appelée *luminance monochromatique directionnelle*. Cette luminance est définie par la relation suivante :

$$\mathrm{d}^5\Phi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = I_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{u})\mathrm{d}S\cos\theta\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\lambda \tag{1.23}$$

où $\mathrm{d}^5\Phi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ est le flux radiatif monochromatique directionnel traversant un élément de surface $\mathrm{d}S$ centré autour d'une direction Δ faisant un angle θ avec la normale à l'élément de surface (figure 1.10). La résolution d'un problème de transfert radiatif consiste à déterminer explicitement le champ de luminance monochromatique directionnelle.

Dans le cas où le milieu gazeux est à l'équilibre thermique, il existe en tout point un *rayonnement d'équilibre*. La luminance de ce rayonnement est indépendante de la direction (rayonnement isotrope) et ne dépend que de la longueur d'onde et de la température. L'expres-

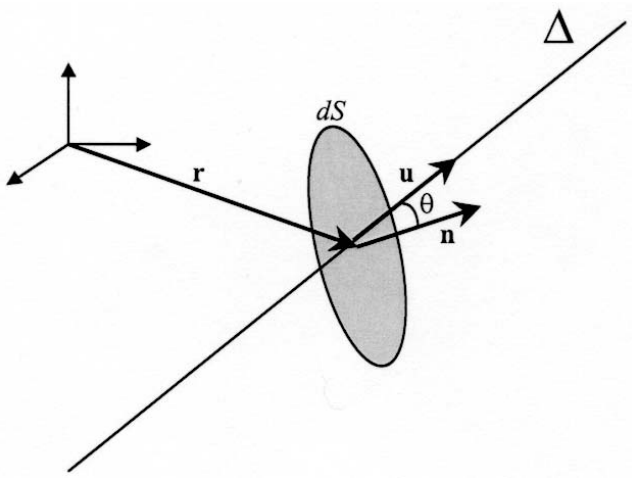


Fig. 1.10: Paramètres géométriques pour la définition du flux radiatif directionnel

sion de cette luminance, notée $I^0_\lambda(T)$ est donnée par la fonction de Planck :

$$I^0_\lambda(T) = 2hc_0^2\lambda^{-5}\left[\exp\left(\frac{hc_0}{k\lambda T}\right) - 1\right]^{-1} \tag{1.24}$$

La fonction de Planck est une fonction croissante de la température (figure 1.11). Elle présente un maximum à l'abscisse λ_{max} vérifiant la loi de déplacement de Wien[‡] :

$$T.\lambda_{max}(T) = 2898\mu m.K \tag{1.25}$$

La plage spectrale s'étendant de $\lambda_{max}/2$ à $8\lambda_{max}$[§] contient 98% de l'énergie du rayonnement d'équilibre. L'intégration sur tout le spectre de la fonction de Planck conduit à la loi de Stefan :

$$\int_0^\infty I^0_\lambda(T)\mathrm{d}\lambda = \sigma T^4/\pi \tag{1.26}$$

où σ désigne la constante de Stefan :

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c_0^2h^3} = 5,670\cdot 10^{-8} Wm^{-2}K^{-4} \tag{1.27}$$

On déduit de la relation (1.25) les longueurs d'onde caractéristiques des rayonnements en équilibre avec des sources à diverses températures (figure 1.12). Le domaine du *rayonnement thermique* couvre une grande partie du domaine infrarouge (8000Å à 700 000Å) et le domaine visible (4000Å à 8000Å).

[‡]La loi de Wien formulée en nombre d'onde s'écrit : $\tilde{\nu}_{max}/T = 1,961 cm^{-1}.K^{-1}$.
[§]Formulée en nombre d'onde, la plage correspondante s'étend approximativement de $\tilde{\nu}_{max}/5$ à $4\tilde{\nu}_{max}$.

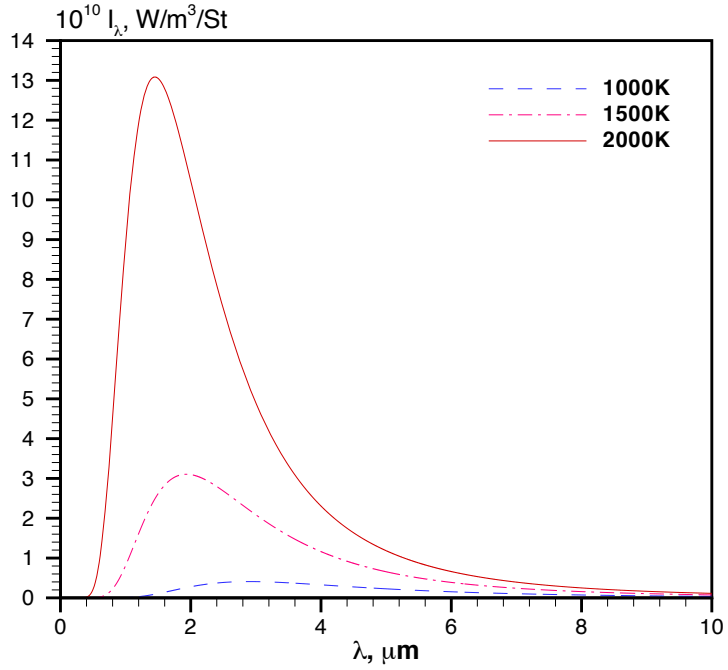


Fig. 1.11: Fonction de Planck, effet de la température

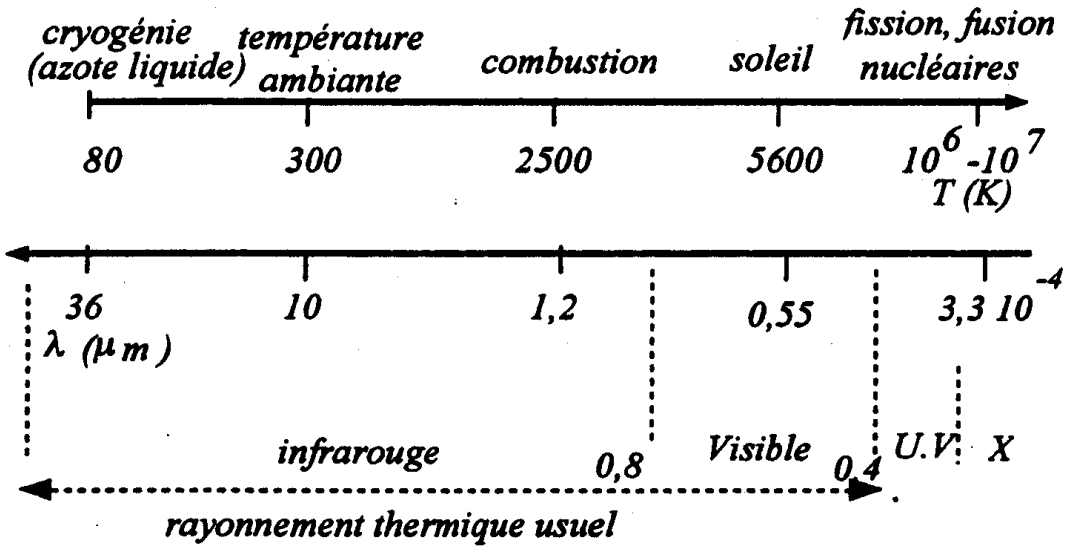


Fig. 1.12: Les différents rayonnements électromagnétiques [185]

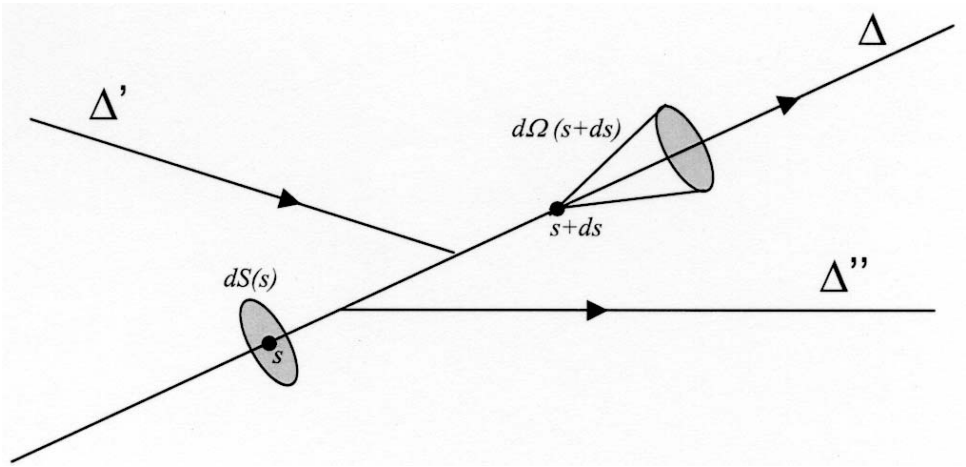


Fig. 1.13: Paramètres géométriques pour l'évolution du flux le long du chemin optique

Dans le cas général, le champ de luminance monochromatique directionnelle se détermine par la résolution d'une équation appelée *équation du transfert radiatif* (ETR). Cette équation s'obtient en écrivant l'évolution, entre deux positions s et $s + \mathrm{d}s$ d'un trajet optique, du flux radiatif monochromatique directionnel qui se propage, dans l'angle solide $\mathrm{d}\Omega$ centré autour de la direction Δ, à travers l'élément de surface $\mathrm{d}S$ normal à celle-ci (figure 1.13). L'équation d'évolution est de la forme :

flux sortant en $s + \mathrm{d}s$ − flux entrant en s = flux émis entre s et $s + \mathrm{d}s$ dans la direction Δ
+ flux entrant entre s et $s + \mathrm{d}s$ dans une direction Δ' et diffusé dans la direction Δ
− flux entrant en s dans la direction Δ et absorbé entre s et $s + \mathrm{d}s$
− flux entrant en s dans la direction Δ et diffusé entre s et $s + \mathrm{d}s$ dans une autre direction Δ"

Dans cette équation, on a négligé le terme instationnaire car la propagation du rayonnement est considérée comme instantanée. Ce point de vue est très généralement adopté, sauf pour des applications très particulières comme la photonique des plasmas de fission ou de fusion nucléaire par exemple. On précise toutefois que, les conditions thermodynamiques du système matériel évoluant dans le temps, il en est de même de ses propriétés radiatives.

Dans les milieux d'indice optique unitaire, la formulation mathématique de l'ETR est la suivante [185] :

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}I_\lambda(s,\mathbf{u})}{\mathrm{d}s} &= \underbrace{j_\lambda(s)}_{\text{émission}} + \underbrace{\frac{\sigma_\lambda(s)}{4\pi}\int_0^{4\pi} p_\lambda(\Delta" \to \Delta, s) I_\lambda(s,\mathbf{u})\mathrm{d}\Omega"}_{\text{diffusion constructive}} \\ &- \underbrace{\Big(\kappa_\lambda(s)+\sigma_\lambda(s)\Big) I_\lambda(s,\mathbf{u})}_{\text{extinction : absorption+diffusion}} \end{aligned} \tag{1.28}$$

Dans cette expression, les termes $\kappa_\lambda(s)$, $\jmath_\lambda(s)$ et $\sigma_\lambda(s)$ désignent respectivement les coefficients monochromatiques d'absorption, d'émission et de diffusion et $p_\lambda(\Delta" \to \Delta, s)$ la fonction de phase de diffusion. Dans notre étude, on suppose que les milieux ne sont pas diffusants ($\sigma_\lambda = 0$) ; par conséquent, on ne traite pas la diffusion dans la suite.

La résolution d'un problème de transfert radiatif nécessite de disposer d'une part d'un *modèle de propriétés radiatives* (§ 1.2.2.2) donnant, par exemple, les coefficients monochromatiques d'absorption et d'émission du milieu, et d'autre part d'une *méthode numérique de résolution de l'ETR* (§ 1.2.2.3). Selon la terminologie proposée par Surzhikov [177], on appelle *modèle radiatif* l'ensemble composé d'un modèle de propriétés radiatives et d'une méthode de résolution de l'ETR.

1.2.2.2 Modèles de propriétés radiatives des milieux gazeux non diffusants

La construction d'un modèle de propriétés radiatives repose sur les données spectroscopiques. Ces dernières sont regroupées en bases de données parmi lesquelles on peut citer les bases américaines HITRAN et HITEMP [93] générées par les Air Force Cambridge Research Laboratories, l'Atomic Spectra Database du NIST [140], la base GEISA [95] du laboratoire français LMD/ARA ou encore la base de donnée du laboratoire EM2C [10, 41].

Les modèles de propriétés radiatives se répartissent en trois grands groupes, classés selon leur précision de la manière suivante :

- *modèle raie-par-raie* : dans ce cadre, chaque raie est représentée de manière précise en imposant un pas de discrétisation spectrale inférieur à la demi-largeur à mi-hauteur de raie. Comme le nombre de raies peut être très élevé, typiquement de l'ordre du million, le nombre de points de discrétisation est très important. L'utilisation d'un tel modèle devient très coûteux en taille mémoire et en temps calcul. Pour des calculs de transferts radiatifs, l'utilisation d'un modèle raie-par-raie s'effectue en simplifiant la représentation du spectre et, en particulier, des lignes moléculaires.
- *modèles de bande* (bandes étroites, bandes larges, multigroupes) : le domaine spectral est discrétisé en bandes sur lesquelles les grandeurs radiatives sont moyennées. Surzhikov [177] distingue trois largeurs typiques de bandes, qui différencient respectivement les modèles à bandes étroites, les modèles à bandes larges et les modèles multigroupes. La première correspond à une résolution de l'ordre de $10 - 100 cm^{-1}$, ce qui conduit à moyenner le spectre des raies rotationnelles. La seconde correspond à une résolution de

l'ordre de $200 - 2000 cm^{-1}$ et conduit à moyenner la structure vibrationnelle des spectres moléculaires. La dernière correspond à une résolution de l'ordre de $5000 - 20000 cm^{-1}$ et conduit à discrétiser le domaine spectral en une dizaine de groupes.

- *modèles globaux* : ces modèles ne fournissent que des grandeurs radiatives intégrées sur tout le spectre.

Parmi les codes spectroscopiques utilisant une approche raie-par-raie, on peut citer le code américain NEQAIR [144, 145] (NASA + laboratoires universitaires), le code européen PARADE [172] (ESA, FGE, IRS) décrit au paragraphe 3.2.2, ou encore le code SESAM [57] du Laboratoire d'Aérothermique d'Orléans.

Parmi les modèles approchés, citons le modèle statistique à bandes étroites MSBE, développé par Rivière *et al.* [158] et spécifique aux mélanges CO/CO_2. Ce modèle est décrit au paragraphe 3.2.1. On peut également citer le modèle de bande de Park et Milos [155] développé pour des applications dans l'air à haute température. Dans le cadre de ce modèle, le coefficient d'absorption du mélange gazeux s'exprime comme la somme des contributions de chaque espèce s, de densité n_s :

$$\kappa_\lambda = \sum_s n_s \sigma_{\lambda,s} \tag{1.29}$$

Les sections de collision $\sigma_{\lambda,s}$ s'expriment à l'aide d'un polynôme fonction de la température d'excitation électronique. Le spectre est discrétisé en 615 bandes réparties afin de reproduire au mieux le spectre obtenu par un calcul raie-par-raie. L'écart constaté sur le spectre d'absorption est de l'ordre de 20%. D'autres modèles existent, on pourra consulter par exemple Taine et Soufiani [186] pour une revue des modèles approchés.

Le calcul des propriétés radiatives requiert la connaissance des densités de population sur les différents niveaux d'énergie des particules de gaz. Selon les cas, le peuplement des niveaux s'obtient en supposant un équilibre de Boltzmann ou non.

Dans le premier cas, la densité de population sur chaque niveau d'énergie s'obtient à partir des températures $T_{mode,s}$ associées à une espèce s et à un mode donné. Si le milieu étudié est à l'équilibre thermique, la température $T_{mode,s}$ est identique pour toutes les particules et tous les modes d'énergie, elle correspond à la température du milieu T. Si le milieu est hors équilibre thermique, la température $T_{mode,s}$ est déterminée à partir d'un modèle multitempérature. Les paramètres d'entrée du modèle de propriétés radiatives sont alors les densités des espèces chimiques qui participent au rayonnement, les températures de translation des espèces lourdes et des électrons, les températures de rotation et de vibration des molécules, et les températures d'excitation électronique des espèces lourdes.

Dans le cas où le milieu est fortement hors équilibre, le peuplement des niveaux s'écarte de distributions de Boltzmann. Dans ce cas, l'approche QSS (Quasi-Steady-State) de Park [144] peut être utilisée. Dans cette approche, on fait l'hypothèse que le taux de variation de population d'un état excité est négligeable devant le taux de transition depuis et vers cet état. Ainsi le système d'équations différentielles qui régit l'occupation des niveaux d'énergie se transforme en un système d'équations algébriques, plus simple à résoudre.

Il est possible de combiner les deux approches précédemment citées. Par exemple, dans le code NEQAIR [144, 145], l'approche QSS est utilisée pour calculer le peuplement des niveaux électroniques. En revanche, le peuplement des niveaux vibrationnels et rotationnels est décrit par des distributions de Boltzmann.

1.2.2.3 Méthodes numériques de résolution de l'équation de transfert radiatif

Le choix de la méthode numérique de résolution de l'équation de transfert radiatif dépend fortement de la nature du milieu étudié et de ses propriétés radiatives et thermophysiques : milieu diffusant ou non, optiquement mince ou optiquement épais,... Le choix dépend également des objectifs fixés en terme de précision recherchée, de complexité de la géométrie à traiter,... Depuis les années 1950, un grand nombre de méthodes ont été développées pour résoudre les problèmes de transfert radiatif. On décrit ci-dessous quelques-unes de ces méthodes, utilisées dans le cadre des écoulements de rentrée atmosphérique.

La *méthode des plans tangents* [9] consiste à supposer que les propriétés physiques du milieu varient seulement dans la direction orthogonale à la paroi. Cette approximation est valable pour des corps fortement émoussés dans la région de ligne d'arrêt. Ainsi, le problème se ramène à la configuration académique de deux murs plans infinis et parallèles - correspondant à la paroi du véhicule et à l'écoulement infini amont - séparés par un milieu dont les propriétés ne varient que dans la direction perpendiculaire au plan des murs. L'intérêt de l'approche réside dans le fait qu'il existe une solution pseudo-analytique au problème de transfert radiatif [170, 135, 185]. Cette méthode simple est utilisée par Gökçen [69] et Olynick *et al.* [142] entre autres.

La *méthode des moments* repose sur l'écriture des équations régissant les moments de la luminance, grandeurs intégrées en direction et en fréquence. Dans le cadre du modèle M1, on se limite aux deux premiers moments et le système est fermé par une loi portant sur le troisième moment. Les trois premiers moments correspondent respectivement à l'énergie radiative, au flux radiatif et à la pression radiative. Ils s'écrivent :

$$E^R = \iint I_\nu \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\nu \tag{1.30a}$$

$$q^R = \iint \Omega I_\nu \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\nu \tag{1.30b}$$

$$p^R = \iint \Omega \otimes \Omega I_\nu \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\nu \tag{1.30c}$$

Le modèle M1 donne de bons résultats si le problème ne présente ni de variation trop brutale en fréquence, ni de directions de propagation privilégiées. Turpault [198] a proposé une amélioration du modèle M1 appelé M1-multigroupe dans laquelle les moments sont intégrés non pas sur l'ensemble du domaine spectral, mais sur un nombre fini Q de groupes de fréquences. L'équation intégro-différentielle du transfert radiatif (1.28) est alors remplacée par un ensemble de $2 \times Q$ équations aux dérivées partielles et Q équations de fermeture. La loi de fermeture choisie par Turpault [198] est basée sur le principe d'entropie minimum[¶].

Les *méthodes des harmoniques sphériques*, ou méthodes P_N, consistent à décomposer la luminance sur une base complète de fonctions - les harmoniques sphériques - ne dépendant que de la direction. Ces méthodes sont, en pratique, mises en œuvre pour des ordres faibles. Surzhikov [180, 181] et Hartung et Hassan [89] utilisent cette méthode à l'ordre 1 (P_1). De telles troncatures peuvent s'avérer très grossières dans de nombreuses applications [202].

Les *méthodes de Monte-Carlo* ont la particularité d'être des méthodes statistiques. Dans ces méthodes, on s'intéresse à des paquets de photons transportant une fraction de l'énergie radiative émise par l'ensemble du domaine de calcul. La caractérisation d'un paquet se fait de manière stochastique : certaines grandeurs - par exemple le point d'émission, la fréquence, la direction de propagation - sont choisies aléatoirement. Ensuite, le paquet est suivi le long de son trajet dans le domaine de calcul. Lorsqu'il traverse une cellule absorbante, il y dépose toute

[¶]Minimisation de l'entropie au sens mathématique, qui correspond à la maximisation de l'entropie physique.

ou partie de son énergie. Sa trajectoire est modifiée si le milieu est diffusant. Les méthodes de Monte-Carlo permettent un traitement satisfaisant de problèmes complexes (milieu diffusant, discrétisation spectrale fine, géométrie 3D complexe, interaction rayonnement-turbulence). Kay et Gogel [105] et Surzhikov [179, 180] mettent en œuvre de telles méthodes.

Les *méthodes de lancer de rayons* [122] sont le pendant déterministe des méthodes de Monte-Carlo et les méthodes déterministes les plus générales et les plus rigoureuses. L'espace angulaire entourant un point de calcul est découpé en angles solides élémentaires. Ces angles solides sont construits depuis un point du volume ou des frontières jusqu'à la première frontière rencontrée, puis sont découpés en colonnes homogènes isothermes. L'ETR est alors résolue le long des axes des angles solides. On effectue l'opération pour chaque point ou bande spectrale et pour tous les points du volume et des frontières. Si ces méthodes sont précises, elles requièrent des temps de calcul importants lorsque les discrétisations de l'espace angulaire et du domaine spectral sont fines. Sakai *et al.* [164] utilisent par exemple une méthode de lancer de rayons où l'espace angulaire est discrétisé en 289 angles solides élémentaires et le domaine spectral est découpé en 2294 bandes.

Pour la description d'autres méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif, on pourra consulter les références [170, 135, 185, 202].

1.2.3 Couplage hydrodynamique/rayonnement

Le système d'équations qui régit les écoulements de rentrée atmosphérique se compose des équations de l'hydrodynamique et de l'équation du transfert radiatif. Puisque le champ de rayonnement et le champ hydrodynamique interagissent en permanence (voir § 1.1.3.2), ces équations sont couplées.

L'influence du champ hydrodynamique sur le champ de rayonnement se traduit par le fait qu'en un point du milieu, les propriétés radiatives (par exemple les coefficients d'émission et d'absorption qui apparaissent dans l'équation 1.28) dépendent à tout instant des conditions thermodynamiques en tous les points du milieu et des parois.

L'influence du champ de rayonnement sur le champ hydrodynamique se traduit par l'ajout de termes dans les équations de Navier-Stokes [11, 116, 79]. Ainsi, l'apport ou la perte d'énergie respectivement par absorption ou émission radiative participe au bilan d'énergie totale par l'intermédiaire d'un terme source. Ce terme correspond à la puissance radiative, qui s'écrit au signe près comme la forme de la divergence du flux radiatif : $P^R = -\nabla.\mathbf{q}^R$. Des termes similaires peuvent également apparaître dans les autres équations de bilan d'énergie (énergies de vibration, énergie des électrons, ...). Soulignons toutefois la difficulté de découper la contribution radiative dans le cadre d'un modèle multitempérature. En effet, il est délicat de distinguer quelle fraction de puissance radiative agit sur le bilan de chaque réservoir énergétique. Par ailleurs, les variations de densité des espèces chimiques par suite des processus radiatifs (photodissociation, réattachement radiatif, ...) modifient les bilans de masse. Les termes de production/destruction massique s'obtiennent à l'aide d'un modèle collisionnel-radiatif [11, 23]. Ces termes sont cependant rarement pris en compte, excepté lorsque le déséquilibre du milieu est modélisé par une approche hybride entre une approche niveau-par-niveau et une approche multitempérature comme celle proposée par Broc [23].

1.3 Etude bibliographique

1.3.1 Solveurs hydrodynamiques pour la simulation des écoulements hypersoniques ionisés

Dans cette partie, on s'intéresse aux solveurs hydrodynamiques adaptés à la simulation numérique des écoulements hypersoniques hyperenthalpiques partiellement ionisés en déséquilibre chimique et thermique. Pour chacun des codes, on présente successivement, lorsque les informations sont disponibles, le modèle multitempérature, les modèles relatifs aux coefficients et lois de transport, les modèles relatifs aux termes d'échange énergétique considérés et les modèles de cinétique chimique. Enfin, on donne la méthode numérique choisie, en distinguant les méthodes pour le traitement des flux convectifs, le traitement des flux visqueux et l'avance en temps. On précise que tous les solveurs résolvent les équations de Navier-Stokes, exceptés les codes de Gökçen [69] et de Sawada *et al.* [163] qui traitent les équations d'Euler, et le code DSMC [17, 18, 187] qui traite les écoulements en régime raréfié.

Pour chacun des solveurs, on énumère également les cas d'épreuve simulés. Dans la suite du mémoire, les résultats relatifs à certains de ces cas sont utilisés comme base de comparaison. Le lecteur pourra se référer à l'étude bibliographique ci-dessous afin de connaître les modélisations associées à ces résultats.

Cette liste n'est bien sûr pas exhaustive. Elle présente cependant les contributions les plus récurrentes dans la littérature. Elle met également en valeur la diversité des modélisations retenues.

Le code de Candler, Université de Stanford [25, 26]
Le modèle multitempérature est le modèle (T,$T_{v,m}$,T_e) où l'indice m désigne les différentes espèces moléculaires. L'énergie d'excitation électronique est incluse dans le calcul de l'énergie totale. Le peuplement des modes électroniques des particules lourdes est supposé suivre une distribution de Boltzmann à la température T_e. Cependant, l'équation qui régit la température T_e ne porte que sur l'énergie du gaz d'électrons libres.
La viscosité d'un gaz pur s'exprime en fonction de la température T selon la loi d'interpolation de Blöttner [20]. La viscosité du mélange gazeux s'obtient ensuite par la loi de mélange de Wilke [208]. De même, la conductivité thermique d'un gaz pur est donnée par la relation d'Eucken [201] qui relie cette dernière à la viscosité et aux capacités calorifiques. La conductivité thermique d'une espèce dans le mélange s'obtient ensuite à l'aide de la loi de mélange de Wilke [208]. La diffusion suit le modèle de Lee [116]. Ce modèle s'appuie sur le principe de diffusion ambipolaire selon lequel le coefficient de diffusion d'un ion est le double du coefficient de l'espèce neutre associée. Cette assertion résulte du lien existant entre la diffusion des ions et des électrons, créé par le champ électrique. Le principe s'applique aux gaz partiellement ionisés dans lequel un gradient de pression des électrons existe, mais sans courant de conduction. Par ailleurs, les phénomènes dissipatifs au sein du gaz d'électrons sont négligés.
Le terme d'échange V-T entre le mode de vibration d'une espèce moléculaire m et le mode de translation des espèces lourdes s'exprime sous la forme de Landau et Teller [111] :

$$\rho_m \frac{e_{v,m}(T) - e_{v,m}(T_{v,m})}{\tau_m} \tag{1.31}$$

où le terme $e_{v,m}$ désigne l'énergie de vibration calculée à la température T ou à la température $T_{v,m}$. Le temps de relaxation τ_m s'exprime en fonction des temps de relaxation binaire entre l'espèce moléculaire m et les autres espèces lourdes du mélange selon la formule de Lee [116].

Les temps de relaxation binaire sont ceux préconisés par Millikan et White [132]. Le terme d'échange e-T entre les modes de translation des électrons et des espèces lourdes suit le modèle de Lee [116], basé sur les travaux d'Appleton et Bray [11]. Le terme d'échange e-V s'exprime sous la forme de Landau et Teller [111]. Les temps de relaxation e-V sont basés sur le modèle de Lee [116]. Ce dernier traite les échanges entre le mode de translation des électrons et l'ensemble des modes de vibration des molécules. Candler [25] a particularisé le modèle pour traiter les échanges entre le mode de translation des électrons et le mode de vibration de chaque molécule. Les termes d'échanges V-V suivent le modèle de Candler [25] construit à partir de la théorie cinétique et des probabilités d'échange d'énergie de vibration lors d'une collision déterminées expérimentalement.
Le modèle de cinétique chimique est le modèle de l'air à 7 espèces (N_2,O_2,NO,N,O,NO^+,e^-) de Park 1985 [146], sauf pour la réaction de production des ions NO^+ par collision d'atomes N et O pour laquelle les coefficients de Wray [211] sont utilisés. L'expression de la température d'activation est fonction de la réaction considérée. Pour les réactions de dissociation, elle est prise égale à $\sqrt{TT_{v,m}}$, sauf si des électrons participent au processus réactionnel. Dans ce cas, elle est prise égale à $\sqrt{T_eT_{v,m}}$ et la constante de réaction inverse est calculée à la température $\sqrt{T_eT}$. Enfin, la réaction d'ionisation de l'ion NO^+ est activée à la température T dans le sens direct, et $\sqrt{T_eT_{v,NO^+}}$ dans le sens inverse. Pour chaque réaction chimique, la constante de réaction inverse est calculée comme le quotient de la constante directe et de la constante d'équilibre. Cette dernière est exprimée à partir du modèle de Park [146].
Du point de vue numérique, le traitement des flux convectifs se fait par une combinaison de deux méthodes de flux splitting. La première est la méthode de MacCormack [26], utilisée partout sauf dans les zones à fort gradient de pression. Dans ces zones, la méthode de Steger et Warming [174] est utilisée afin d'augmenter la dissipation et ainsi maintenir la stabilité du schéma. Le système implicité est résolu par la technique de Gauss-Seidel.
Le code a été testé notamment sur le cas d'épreuve RAM-C II [56, 166], pour lequel un bon accord avec les mesures expérimentales de densité électronique a été obtenu. Cependant, Candler et McCormack [26] concluent que les modèles pour les échanges T-V et e-V sont inadéquats. Concernant les échanges T-V, la comparaison avec les résultats obtenus par Park [147] sur le cas d'épreuve RAM-C II [56, 166] montre que les taux de relaxation de Millikan et White [132] sont plus élevés à haute température que ceux préconisés par Park [147]. Concernant les échanges e-V, Candler et McCormack [26] s'attendent à un couplage fort entre le mode de translation des électrons et le mode de vibration de la molécule N_2. Or leur modélisation conduit à une température T_e nettement inférieure aux températures de vibration dans la couche de choc. L'erreur est attribuée aux taux de relaxation des échanges e-V développés par Lee [116]. Enfin, du fait des échanges V-V, les différentes températures $T_{v,m}$ sont suffisamment proches dans le cas d'épreuve traité pour que les modes de vibration des molécules puissent être décrits à l'aide d'une seule température de vibration T_v.

Le code GIANTS, NASA [142]

Le code GIANTS est une version modifiée du code de Candler [25, 26] dans laquelle le déséquilibre est représenté par un modèle deux-température (T,T_v). Les électrons sont supposés à l'équilibre avec le mode de translation des particules lourdes. L'énergie d'excitation électronique est négligée.
Les lois de mélange pour la viscosité et les conductivités thermiques de translation et de vibration sont basées sur les travaux de Gupta *et al.* [79]. Dans ces lois, les sections de collision sont données par Stallcop [142]. La diffusion dans le mélange est traitée par une approximation dite de bifurcation.

Le modèle de cinétique chimique est le modèle de l'air à 11 espèces (N_2,O_2,NO,N,O,N_2^+,O_2^+, NO^+,N^+,O^+,e^-) de Park 1993 [150] excepté pour les réactions d'ionisation par impact d'électrons pour lesquelles les coefficients de Wilson [210] sont utilisés. Les constantes de vitesse des réactions d'ionisation sont calculées avec la température T. Les constantes de vitesse des réactions de dissociation sont calculées avec la température $\sqrt{TT_v}$.
L'application porte sur le cas d'épreuve FIRE II [29, 30, 55].

Le code LAURA, NASA [66]
Le modèle multitempérature est soit le modèle deux-température (T,T_{v-el-e}) soit le modèle trois-température (T,T_v,T_{el-e}) de Gnoffo *et al.* [66].
Les modèles des propriétés de transport (viscosité, diffusion, conductivité thermique) sont ceux préconisés par Lee [116].
Le terme d'échange V-T s'exprime sous la forme de Landau-Teller [111]. Les temps de relaxation binaire sont donnés par la formule de Millikan et White [132], mais avec les coefficients préconisés par Park [147]. A ces temps s'ajoute le terme correctif proposé par Park [146] de sorte que le temps de relaxation total pour une espèce moléculaire m est égal à la somme :

$$\tau_m = \tau_m^{MW,P} + \tau_m^P \tag{1.32}$$

où l'exposant MW fait référence à Millikan et White et l'exposant P à Park. Le terme correctif de Park s'écrit [146] :

$$\tau_m^P = (\sigma_m \bar{c_m} n_m)^{-1} \quad \text{où } \bar{c_m} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_m}} \tag{1.33}$$

Cette correction tient compte de deux phénomènes apparaissant à haute température : la limitation, à une valeur σ_m, des sections de collision et la nature diffusive de la relaxation vibrationnelle [146]. Hartung *et al.* [91] préconise le choix d'une section σ_m constante, égale à $10^{-21}m^2$. Le terme d'échanges e-T est donné par Appleton et Bray [11]. Ce modèle est très proche de celui de Lee [116]. Les sections de collision entre les électrons et les espèces neutres s'expriment par un polynôme du second degré fonction de la température T_{el-e}. Le modèle pour les termes d'échanges e-V n'est pas développé. Pour le couplage chimie-vibration, trois modèles sont disponibles : celui de la recombinaison et dissociation préférentielle de Treanor et Marrone [125], le modèle de Park [147] et le modèle non préférentiel de Jaffe [96].
Le modèle de cinétique chimique est le modèle de l'air à 11 espèces de Park 1987 [147] ou le modèle de Dunn et Kang [62].
La méthode numérique repose sur un schéma décentré en formulation volume fini. Les variables de l'écoulement sont interpolées selon le schéma TVD (Total Variation Diminishing) de Weilmuenster et Gnoffo [207]. Les composantes du flux convectif aux interfaces des cellules sont décrites à l'aide de moyennes de Roe [160] avec la correction entropique de Harten [84].
Des comparaisons avec le code DSMC de Bird [17] dédié au calcul d'écoulements en milieu raréfié montrent que le modèle cinétique de Park [147] donne de meilleurs résultats que celui de Dunn et Kang [62]. Cependant, les incertitudes sur le modèle de cinétique chimique et de relaxation sont présentées comme grandes.

Le code de Barbante, VKI Bruxelle [15]
Dans les travaux de Barbante, les écoulements sont toujours à l'équilibre thermique. L'ionisation du gaz est prise en compte à travers les réactions chimiques.
Les lois de mélange de Yos [213] permettent d'exprimer la viscosité et la conductivité thermique de translation du gaz. Les conductivités thermiques liées aux modes d'énergie interne

suivent l'approximation d'Eucken [201]. La conductivité thermique des électrons suit le modèle de Devoto [58]. Enfin, les coefficients de diffusion binaires sont définis par les polynômes de Sonine [92, 36].
Les modèles de cinétique chimique de Dunn et Kang [62], de Gupta *et al.* [79] et de Park 1993 [150] sont utilisés.
Plusieurs méthodes numériques (van Leer [200], HUS [49], AUSMDV [203], AUSMP [118]) sont testées et comparées. Dans le cadre des écoulements eulériens, le schéma de van Leer est le plus robuste. Dans le cadre des écoulements visqueux, Barbante recommande l'utilisation du schéma HUS combiné à une procédure permettant de supprimer les instabilités numériques de type carbuncle. Dans ce but, Barbante propose d'ajouter localement de la dissipation numérique dans la région de choc.
Les calculs sont effectués pour différents cas d'épreuve, dont l'essai en vol RAM-C II [56, 166], les véhicules SSTO [81] et OREX [82]. Dans le cas d'épreuve RAM-C II [56, 166], les profils de densité électronique sont comparés aux mesures en vol. Les résultats sont très sensibles au choix du modèle de cinétique chimique ainsi qu'à la condition de catalycité de paroi.

Le code LORE, Université de Delft et ESA/ESTEC [205]
Le modèle multitempérature est le modèle (T,$T_{v,m}$,T_{el-e}).
La viscosité est donnée par la loi de Blöttner [20] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La conductivité thermique globale est donnée par les relations d'Eucken [201] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La diffusion suit la loi de Fick, reliant le flux diffusif au gradient de fraction massique des espèces par l'intermédiaire du coefficient de diffusion. Ce dernier est calculé en supposant un nombre de Lewis constant compris entre 1,0 et 1,4 pour l'air.
Les termes d'échange V-T s'expriment sous la forme de Landau et Teller [111] pour laquelle le temps de relaxation est défini selon la formulation proposée par Lee [116]. Les temps de relaxation binaires sont ceux préconisés par Millikan et White [132] avec la correction haute-température de Park [146]. Les termes d'échanges e-T et e-V suivent le modèle de Candler [25]. Seuls les échanges e-V avec l'espèce N_2 sont pris en compte, les échanges e-V avec les autres espèces moléculaires sont considérés comme négligeables [153]. Les termes d'échanges V-V suivent également le modèle de Candler [25]. Concernant le couplage entre la vibration et la dissociation des espèces moléculaires, les modèles de Park [147] et de Treanor et Marrone [125] sont implémentés.
Les modèles de cinétique chimique pour l'air 11 espèces sont ceux de Dunn et Kang [62] et de Park 1987 [147].
Concernant la procédure numérique, la discrétisation spatiale est obtenue par un schéma AUSM-van Leer [203] pour les flux convectifs. La méthode MUSCL [199] permet d'obtenir une précision d'ordre 2 en espace. Pour les flux visqueux, un schéma aux différences centrées est utilisé. L'intégration implicite en temps est réalisée par une méthode de Gauss-Seidel.
La méthode est appliquée entre autres au cas d'épreuve RAM-C II [56, 166] en configuration 2D-axisymétrique, et aux véhicules ARD (Atmospheric Reentry Demonstrator, ESA) [127] et X-38 en configuration 3D (maillage multidomaine structuré). L'étude des différentes modélisations du déséquilibre thermochimique montre que le modèle de cinétique chimique et la condition de catalycité de paroi ont une grande influence sur les résultats. Pour le cas d'épreuve RAM-C II [56, 166] par exemple, le flux de chaleur pariétal prédit en utilisant le modèle de Park 1987 [147] est inférieur d'environ 10% à celui obtenu avec le modèle de Dunn et Kang [62]. Par ailleurs, le flux de chaleur double lorsqu'on suppose que la paroi est catalytique plutôt que non-catalytique.

Le code CARBUR, IUSTI Marseille [190, 192]
Le modèle multitempérature est le modèle (T,$T_{v,m}$,T_{el-e}). Pour tenir compte du déséquilibre thermique, l'expression de la vitesse du son s'écrit :

$$a^2 = \gamma \left(\frac{p}{\rho}\right) + (\gamma - 1)\left(\frac{T}{T_e} - 1\right)\frac{p_e}{\rho} \tag{1.34}$$

Tchuen [190] dérive cette expression à partir des deux premiers principes de la thermodynamique. Le terme γ désigne le coefficient polytropique correspondant aux modes d'énergie en équilibre à la température T. Ceci permet d'assurer que sous l'hypothèse d'une température de translation unique ($T_e = T$), on retrouve l'expression classique de la vitesse du son.
La viscosité est donnée par la loi de Blöttner [20] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La conductivité thermique est donnée par les relations d'Eucken [201] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La conductivité thermique de vibration est déterminée à partir du modèle d'Ahtye [4]. La diffusion suit la loi de Fick avec un nombre de Lewis constant égal à 1,2. Le coefficient de diffusion d'un ion I est exprimé à partir du coefficient de diffusion de l'espèce neutre associée s suivant la relation proposée par Ramshaw et Chang [157] dans le but d'améliorer la loi de diffusion ambipolaire de Lee [116] :

$$D_I = D_s\left(1 - \frac{T_e}{T}\right) \tag{1.35}$$

Enfin, comme c'est le cas généralement, le coefficient de diffusion du mode d'énergie de vibration - qui intervient dans l'expression du flux de conduction de vibration - est assimilé au coefficient de diffusion massique de l'espèce vibrante, suivant la proposition de Mason et Monchick [126].
Les termes d'échanges V-T s'expriment sous la forme de Landau et Teller [111]. Les temps de relaxation associés à ces échanges suivent le modèle de Blackmann [19], avec les corrélations de Treanor et Marrone [125] et de Thivet [197]. Les termes d'échanges V-V suivent le modèle de Candler [25]. Le nombre de collisions par unité de volume est donné par la théorie cinétique des gaz [201]. Les probabilités de collision sont données par Park et Lee [153]. Les termes d'échanges e-T suivent le modèle de Lee [116]. Concernant les échanges e-V, seuls les échanges avec les molécules N_2 sont pris en compte. Ils sont exprimés sous la forme de Landau et Teller [111], avec les temps de relaxation proposés par Candler [25]. Le Couplage Vibration Dissociation (CVD) est pris en compte selon le modèle de Park [149], pour lequel la température d'activation des réactions de dissociation vaut $T^q T_{v,m}^{1-q}$, ou $T_e^q T_{v,m}^{1-q}$ si des électrons participent au processus de dissociation. Le paramètre q est pris égal à 0,7.
Le modèle de cinétique chimique est le modèle de l'air à 7 espèces de Park 1985 [146].
La procédure numérique repose sur une formulation en volume fini. La méthode de type MUSCL-Hancock [199] d'ordre 2, combinée au limiteur minMod, est associée à un solveur exact de Riemann pour le calcul des flux convectifs. Les flux visqueux sont discrétisés avec un schéma aux différences finies centrées de second ordre. L'avancement en temps est opéré par une méthode semi-implicite.
La méthode a été testée pour des nombres de Mach compris entre 15 et 25,9, notamment pour reproduire les expériences de Lobb [121] et les mesures en vol de la campagne RAM-C II [56, 166]. La prise en compte du déséquilibre thermique et des échanges entre les modes énergétiques peut affecter jusqu'à 4% la prédiction de la position du choc et jusqu'à 12% la prédiction du flux de chaleur pariétal. Par ailleurs, les évolutions des températures de vibration des molécules d'azote et d'oxygène sont bien distinctes, contredisant les conclusions de Candler et McCormack [26]. L'écart est d'autant plus grand que l'altitude et la vitesse du corps de rentrée sont élevées.

Le code de Josyula et Bailey, US Air Force [102]
Le modèle multitempérature est le modèle (T,$T_{v,m}$,T_e). L'excitation électronique des particules lourdes est équilibrée avec la translation à la température T.
La viscosité est donnée par la loi de Blöttner [20] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La conductivité thermique globale est donnée par les relations d'Eucken [201] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La diffusion suit la loi de Fick avec un nombre de Lewis constant égal à 1,4.
Les termes d'échanges V-T s'expriment par la formule de Landau et Teller [111] avec les temps de relaxation de Millikan et White [132]. Les termes d'échanges e-T s'expriment également par la formule de Landau et Teller [111] avec les temps de relaxation de Lee [116]. La section de collision entre les électrons et les espèces neutres est prise constante et égale à $10^{-20}m^2$. Les échanges e-V sont modélisés selon la formule de Landau et Teller [111] avec les temps de relaxation de Lee [116]. Le couplage vibration-chimie suit un modèle développé par Josyula et Bailey [102].
La cinétique chimique de l'air est régie par le modèle de l'air à 7 espèces de Park 1985 [146], excepté pour la la réaction $N + O \rightleftharpoons NO^+ + e^-$ dont les taux sont donnés par Wray [211]. La température d'activation des réactions de dissocation est donnée par l'expression $\sqrt{TT_v}$, ou $\sqrt{T_eT_v}$ si l'une des espèces collisionnelles est un électron. L'apport d'énergie au gaz d'électrons lors des processus d'ionisation est pris en compte.
La procédure numérique est basée sur le schéma de Roe avec correction entropique. Cependant, la formulation non conservative du système d'équations bilan étant mathématiquement incompatible avec le schéma décentré, la méthode de Taylor *et al.* [189] est utilisée afin de s'affranchir de cette difficulté. La précision au second ordre en espace est obtenue par une méthode MUSCL [199] combinée au limiteur minMod. Les flux visqueux sont calculés par différence centrée.
La méthode est utilisée en particulier pour reproduire l'essai en vol RAM-C II [56, 166].

Le code de Sawada *et al.*, Université de Tohoku [163]
Le modèle multitempérature est le modèle (T,T_{v-el-e}).
Les échanges V-T sont modélisés selon la formule de Landau et Teller [111] avec les temps de relaxation de Millikan et White [132] corrigés par Park [146]. Les gains et pertes d'énergie par réaction chimique, et notamment par impact d'électron ionisant, sont pris en compte dans l'équation de conservation du réservoir énergétique vibration-excitation électronique-électron.
Le modèle de cinétique chimique est celui de Park 1993 [150] pour l'air et Park 1994 [152] pour l'atmosphère martienne. La dissociation des molécules est supposée contrôlée par la moyenne géométrique $\sqrt{TT_{v-el-e}}$ des températures de translation et de vibration.
Le schéma numérique utilisé est le schéma AUSM-DV [204] en formulation volume fini. La méthode MUSCL [199] permet d'atteindre une précision d'ordre deux en espace.
L'application porte sur des vols balistiques pour des vitesses allant jusqu'à 13,4km/s [27].

Le code de Gökçen, Eloret Institute [69]
Le modèle multitempérature est un modèle à trois températures (T,T_r,T_{v-e-el}). Dans ce modèle, les modes de translation et de rotation sont décrits par des températures T et T_r distinctes.
Le code traite les écoulements non visqueux. Les termes de transport suivent les modèles de Lee [116].
Les échanges énergétiques V-T sont modélisés selon la formule de Landau et Teller [111]. Les temps de relaxation sont ceux de Millikan et White [132] avec la correction haute-température de Park [146]. Les temps de relaxation rotationnelle sont obtenus en considérant un nombre

de collisions constant égal à 5. Le couplage vibration-dissociation est exprimé en supposant que l'énergie vibrationnelle gagnée ou perdue en moyenne lors des réactions de dissociation et de recombinaison correspond à 30% de l'énergie de dissociation, selon les recommandations de Park [149].
La cinétique chimique est dictée par le modèle air 11 espèces de Park 1991 [151]. La température d'activation des réactions de dissociation est prise égale à la moyenne géométrique $\sqrt{TT_{v-el-e}}$ des températures de translation et de vibration.
L'application porte sur l'essai en vol FIRE II [29, 30, 55].

Le code TINA, Fluid Gravity Engineering Ltd [105, 159]
Le modèle multitempérature est un modèle à deux températures (T,T_{v-e-el}).
La viscosité est donnée par la loi de Blöttner [20] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La conductivité thermique est donnée par les relations d'Eucken [201] pour un gaz pur, et la loi de mélange de Wilke [208]. La diffusion est obtenue par le modèle de Candler [25], avec un nombre de Schmidt égal à $0,5$ pour les espèces neutres et $0,25$ pour les ions.
Les seuls échanges entre les modes d'énergies sont les échanges V-T, modélisés par la forme de Landau et Teller [111]. Les temps de relaxation sont ceux de Millikan et White [132] avec la correction haute-température préconisée par Park [146].
Les taux de réactions chimiques pour l'air sont ceux de Dunn et Kang [62] ou ceux de Park 1987 [147]. Dans ce dernier cas, la température d'activation des réactions de dissociation est prise égale à $\sqrt{TT_{v-e-el}}$.
Le solveur numérique est le solveur de Riemann approché développé par Roe [160]. La résolution au second ordre en espace est obtenue par le limiteur de flux symétrique TVD proposé par Yee [212]. L'avancement en temps se fait par la technique implicite de Gauss-Seidel.

Le code URANUS, IRS Stuttgart [108]
Le modèle multitempérature est un modèle (T,$T_{v,m}$,T_{e-el}) où l'indice m désigne les espèces moléculaires N_2, O_2 et NO.
Les échanges énergétiques T-V sont modélisés selon la formule de Landau et Teller [111]. Les temps de relaxation sont ceux de Millikan et White [132] avec la correction haute-température préconisée par Park [146]. Les sections de collision σ_m qui apparaissent dans l'expression (1.33) sont prises égales à $1,5 \cdot 10^{-20} m^2$ pour la molécule N_2, $4,5 \cdot 10^{-20} m^2$ pour la molécule O_2 et $10^{-20} m^2$ pour la molécule NO. Les échanges V-V suivent le modèle de Candler [25]. Les échanges e-V sont également pris en compte. De plus, l'accent est mis sur le couplage vibration-chimie-vibration. Un modèle CVCV (Coupled Vibration-Chemistry-Vibration) est proposé et testé.
L'application choisie correspond à l'essai en vol FIRE II [29, 30, 55]. Le modèle CFCF proposé tend à améliorer l'accord entre le résultat numérique et les données expérimentales par rapport à d'autres modèles comme celui de Treanor et Marrone [125].

Le code CELHyO2D, ONERA [64, 65, 47, 45, 50, 51, 52, 53, 54, 124, 209]
Le modèle multitempérature est un modèle (T,$T_{v,m}$,T_e) où l'indice m désigne les espèces moléculaires N_2 et O_2. L'approche de Coquel et Marmignon est utilisée pour écrire un système de lois sous forme conservative, en remplaçant l'équation bilan de l'énergie du gaz d'électrons par une équation portant sur une variable entropique. Le modèle ne permet pas de prendre en compte les phénomènes dissipatifs au sein du gaz d'électrons (conduction thermique, diffusion), ces derniers sont négligés. L'énergie d'excitation électronique peut être introduite, elle est alors supposée à l'équilibre avec la translation des espèces lourdes.

De nombreux modèles ont été implémentés et testés pour décrire les propriétés de transport du gaz (viscosité, conductivité thermique, diffusivité), les échanges T-V, V-V, C-V, e-T, e-V, e-R, et la cinétique chimique (Park [153, 148], Dunn et Kang [62], ...). Pour les applications en écoulements ionisés [51, 52, 53, 54, 124], la modélisation suivante est utilisée.
La viscosité est donnée par la loi de Blöttner [20] pour un gaz pur, et la loi de mélange d'Armaly et Sutton [12]. La conductivité thermique est donnée par les relations d'Eucken [201] pour un gaz pur, et la loi de mélange d'Armaly et Sutton [13]. La diffusion suit la loi de Fick en supposant un nombre de Lewis constant. Le principe de diffusion ambipolaire est appliqué. Les termes dissipatifs au sein du gaz d'électrons sont négligés.
Le terme d'échange V-T s'écrit sous la forme de Landau et Teller [111]. Le terme d'échange e-T suit le modèle de Lee [116]. Les autres termes d'échange énergétique sont négligés.
Les taux de réactions chimiques sont ceux de Dunn et Kang [62] pour le modèle de l'air à sept espèces.
La méthode numérique est basée sur une extension du schéma de Roe [160, 52] pour le traitement explicite des flux de fluide parfait. La correction entropique de Harten [84] permet d'améliorer la robustesse de la méthode. L'implicitation des flux de fluide parfait est basée sur une extension du schéma de van Leer [200].
L'application porte sur la sonde RAM-C II [56, 166]. Une comparaison des résultats numériques à des résultats d'essai en vol a montré un accord satisfaisant. La conductivité thermique des électrons a été évaluée et comparée à celle du mélange. Le rapport des deux ne dépasse pas $0,2$. Par conséquent, l'approximation qui consiste à négliger ce terme dissipatif au sein du gaz d'électrons est jugée valable.

Le code DSMC, Université de Sydney [17, 18, 187]
En marge de tous les solveurs précédemment cités, le code DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) a été développé par Bird pour simuler les écoulements de gaz raréfiés. La méthode consiste à suivre la trajectoire de quelques milliers de particules. La vitesse, l'état énergétique et la position des particules sont modifiés avec le temps selon les collisions subies et les interactions aux limites du domaine de calcul. Les collisions entre particules sont traitées suivant le modèle Variable Hard Sphere. Dans ce modèle, Bird suppose que le coefficient de viscosité est proportionnel à la puissance 0,7 de la température. Les processus inélastiques sont modélisés selon l'approche de Borgnakke et Larson [21] avec des taux de relaxation constants. Les taux des réactions chimiques sont basés sur un modèle ionisé de l'air proposé par Park et Menees [154]. Dans la version originale du code [17, 18], le plasma est traité de sorte que les électrons se meuvent conjointement avec les ions, ceci afin d'imposer la condition d'électroneutralité. En 1992, Taylor *et al.* [187] introduisent un modèle d'ionisation qui s'affranchit de la contrainte sur le mouvement des électrons, basé sur l'approche de diffusion ambipolaire. Ils introduisent également un modèle décrivant la réflexion des particules chargées sur la paroi.

Tableau récapitulatif et analyse
On récapitule dans le tableau 1.1 les modèles multitempérature, de transport et d'échange énergétique retenus dans les principaux codes. Le symbole " ?" signifie que l'information n'a pu être trouvée, "S/O" (Sans Objet) que l'information n'a pas lieu d'être et "0.0" que le terme en question n'est pas présent dans la modélisation (terme supposé nul).

On observe une large diversité dans les choix de modélisations. Concernant le modèle multitempérature par exemple, le déséquilibre thermique vibrationnel est toujours modélisé, mais en utilisant soit une soit plusieurs températures de vibration. De plus, les conclusions sur ce

Code	Modèle multi-température	Transport...			
		Viscosité		Conductivité thermique	
		gaz pur	mélange	gaz pur	mélange
Candler	$(T,T_{v,m},T_e)$	Blöttner	Wilke	Eucken	Wilke
GIANTS	(T,T_v)	Blöttner	Stallcop	Lee	Stallcop
LAURA	(T,T_v,T_{e-el})	Blöttner	Lee	Lee	Lee
LORE	$(T,T_{v,m},T_{e-el})$	Blöttner	Wilke	Eucken	Wilke
CARBUR	$(T,T_{v,m},T_{e-el})$	Blöttner	Wilke	Eucken	Wilke
Josyula et Bailey	$(T,T_{v,m},T_e)$	Blöttner	Wilke	Eucken	Wilke
Gökçen	(T_t,T_r,T_{v-e-el})	0.0	0.0	Lee	Lee
TINA	(T,T_{v-e-el})	Blöttner	Wilke	Eucken	Wilke
URANUS	$(T,T_{v,m},T_{e-el})$	?	?	?	?
Sawada *et al.*	(T,T_{v-e-el})	0.0	0.0	?	?
CELHyO2D	$(T,T_{v,m},T_e)$	Blöttner	Armaly-Sutton	Eucken	Armaly-Sutton

Code	...Transport			Echanges énergétiques...	
	paires collisionnelles	Diffusivité espèce	loi de diffusion	T-V	V-V
Candler	Lee	Lee	Fick, ambip.	Millikan-White	Candler
GIANTS	Lee	bifurc.	Fick, ambip.	Millikan-White	S/O
LAURA	Lee	Lee	Fick, ambip.	Millikan-White+Park	?
LORE	S/O	Le=1..1,4	Fick, ambip.	Millikan-White+Park	Candler
CARBUR	S/O	Le=1,2	Fick, ambip.	Blackmann	Candler
Josyula et Bailey	S/O	Le=1,4	Fick	Millikan-White	?
Gökçen	Lee	Lee	Fick, ambip.	Millikan-White+Park	S/O
TINA	Lee	Lee	Fick, ambip.	Millikan-White+Park	S/O
URANUS	?	?	?	Millikan-White+Park	Candler
Sawada *et al.*	?	?	?	Millikan-White+Park	S/O
CELHyO2D	S/O	Le=1..1,4	Fick, ambip.	?	0.0

Code	...Echanges énergétiques			
	e-T	e-V	C-V	V-D, T_d
Candler	Lee	Lee	0.0	Park
GIANTS	S/O	S/O	0.0	$\sqrt{TT_v}$
LAURA	Appleton-Bray	0.0	3 modèles	3 modèles
LORE	Lee	Lee	0.0	Park, Treanor-Marrone
CARBUR	Lee	Lee	?	$T^{0,7}T_v^{0,3}$, $T_e^{0,7}T_v^{0,3}$
Josyula et Bailey	Lee	Lee	Josyula *et al.*	$\sqrt{TT_v}$, $\sqrt{T_eT_v}$
Gökçen	S/O	S/O	0.0	?
TINA	S/O	S/O	0.0	?
URANUS	?	0.0	Knab *et al.*	Knab *et al.*
Sawada *et al.*	?	S/O	0.0	$\sqrt{TT_{v-e-el}}$
CELHyO2D	Lee	0.0	0.0	0.0

Tab. 1.1: Modélisations physico-chimiques dans les codes hydrodynamiques

point diffèrent selon les auteurs. Ainsi, le modèle d'échange V-V préconisé par Candler [25, 26] et Gnoffo *et al.* [66] conduit à équilibrer les températures de vibration des espèces N_2 et O_2. Ce résultat justifierait que l'on utilise une seule température pour représenter les modes de vibration de ces espèces moléculaires. Au contraire, pour des conditions d'écoulement similaires, Coquel et Joly [47] et Tchuen [190] montrent que ces deux températures ne sont pas égales et qu'il est donc préférable de les considérer toutes deux.

De même, selon Candler et McCormack [26], la température de vibration de l'azote moléculaire et la température des électrons sont équilibrées dans la couche de choc à cause des échanges e-V. Gorelov *et al.* [72] corrigent cette assertion en précisant que les échanges e-V ne sont importants que si le degré de dissociation de l'azote moléculaire n_N/n_{N_2} ne dépasse pas 10%. Or, d'après la figure 1.7, le gaz s'ionise à des conditions de vitesse et d'altitude pour lesquelles les molécules N_2 se dissocient. L'équilibre des températures T_e et T_{v,N_2} par les processus e-V n'est donc effectif que dans une plage restreinte de conditions d'écoulement.

Concernant les échanges énergétiques, la modélisation des échanges T-V repose le plus souvent sur les temps de relaxation de Millikan et White [132], mais certains auteurs y ajoutent la correction de Park [146]. Celle-ci a tendance à augmenter les temps de relaxation, et donc à accentuer le déséquilibre thermique vibrationnel. Pour les échanges V-V, e-V et e-T, les modèles utilisés sont généralement ceux préconisés par Lee [116], ou bien des modèles très proches de ces derniers. Par contre, pour les échanges entre le mode de vibration des molécules et la cinétique chimique (C-V et V-D), les choix de modélisation sont très disparates.

Concernant les termes de transport, la loi de viscosité pour un gaz pur repose toujours sur le modèle de Blöttner [20]. Par contre, la loi pour le mélange varie selon les codes. Pour la diffusivité, certains modèles supposent que le nombre de Lewis est constant dans l'écoulement , d'autres s'affranchissent de cette hypothèse. Une étude comparative [73] montre que les deux approches donnent des résultats similaires pour des écoulements à une vitesse de $6km/s$, mais que l'hypothèse d'un nombre de Lewis constant conduit à surestimer le flux de chaleur convectif d'environ 30% lorsque l'écoulement atteint des vitesses de l'ordre de $12km/s$. Pour déterminer quelle approche est la plus appropriée, on serait tenté de comparer le flux donné par le calcul à un flux mesuré expérimentalement. Cependant, changer par exemple le modèle de cinétique chimique peut, dans certaines conditions de vol, diminuer la valeur du flux convectif d'autant que s'affranchir de l'hypothèse d'un nombre de Lewis constant l'augmente (voir par exemple Walpot [205]). De même, la condition de catalycité de paroi est un paramètre très influent sur la prédiction du flux de chaleur convectif. Dès lors, la valeur du flux convectif n'est pas une donnée suffisante pour conclure sur la validité d'un modèle et sur l'invalidité d'un autre.

La validation des modèles physico-chimiques est rendue délicate par la rareté des données expérimentales. Le coût élevé des essais en vol et la difficulté d'obtenir des écoulements hypersoniques hyperenthalpiques dans les moyens d'essai au sol expliquent le manque de données exploitables auxquelles confronter des résultats numériques. Citons Mitcheltree [133] qui écrit, en conclusion d'une étude paramétrique sur les modèles de dissociation et d'ionisation dans les écoulements à $12km/s$, que le manque de mesures en vol à de telles conditions empêche de dresser des conclusions définitives quant au choix correct de ces modèles.

1.3.2 Plateformes de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement

Dans cette partie, on s'intéresse aux travaux portant sur la résolution des écoulements de couches de choc radiatives. Les premiers travaux sur ce thème datent des années 60-70. Citons par exemple les travaux de Howe et Viegas [94] en 1963 : l'analyse porte sur des écoulements à l'équilibre thermodynamique, et les simplifications sont valides dans la zone d'arrêt uniquement. La divergence du flux radiatif est introduite comme terme source, au signe près, dans l'équation de bilan d'énergie. Le coefficient d'absorption de l'air est tabulé en fonction de la pression et de la température. Le coefficient d'émission s'exprime, sous la condition d'équilibre thermodynamique local, comme le produit du coefficient d'absorption et de la fonction de Planck. Howe et Viegas [94] observent que la prise en compte du terme radiatif dans la résolution des équations de conservation conduit à une diminution du flux convectif, pouvant atteindre 50% pour des vols dont la vitesse de rentrée est de $15km/s$ et le rayon de nez de l'ordre de $1,5m$. Il y a donc bien un effet de couplage entre le champ de rayonnement et le champ hydrodynamique. Par conséquent, tous les modes de transfert énergétique doivent être combinés pour déterminer l'échauffement de paroi. Howe et Viegas [94] incluent également les produits de l'ablation dans leur analyse. Dans le modèle, ces produits sont supposés être cinquante fois plus émissifs et absorbants que les espèces de l'air. Ils ont pour effet de diminuer de 45% le flux convectif, et d'augmenter de 14% le flux radiatif. Ce dernier chiffre peut paraître étonnamment faible au regard de leur pouvoir émissif nettement supérieur ; cependant, les produits de l'ablation sont confinés à la zone proche de la paroi, dans laquelle la température est beaucoup moins élevée que dans la couche de choc.

On peut également citer les travaux d'Olstad [141] datant de 1970 : l'auteur s'intéresse à la quantification du rayonnement de couche de choc au niveau du point d'arrêt d'un véhicule de rentrée. Il propose quatre solutions analytiques approchées pour quatre situations particulières : selon que le rayonnement est le mode principal de transport d'énergie ou considéré comme une petite perturbation, et pour les cas limites où le milieu est supposé optiquement mince ou optiquement épais. Il présente une analyse de l'effet de "radiation cooling" sur le flux convectif : ce phénomène correspond au refroidissement de la couche de choc par suite de la perte énergétique engendrée par l'émission radiative. La diminution de la température conduit à la décroissance du flux convectif. En même temps, cette diminution de température tend à limiter l'émission radiative. Il y a donc un couplage entre le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement.

Les activités portant sur la modélisation des couches de choc radiatives s'intensifient dans les années 80. Un certain nombre d'hypothèses simplificatrices sont introduites dans la modélisation hydrodynamique. Ainsi, en 1984, Sutton [183] utilise une approche non visqueuse à l'équilibre chimique et couple les effets radiatifs en introduisant le terme de divergence du flux radiatif dans l'équation de conservation de l'énergie. L'application choisie est l'essai en vol FIRE II [29, 30, 55]. En 1985, Balakrishnan *et al.* [14] s'intéressent aux couches de choc visqueuses, à l'équilibre thermochimique, avec effet radiatif couplé. Ils cherchent à reproduire les données issues des campagnes FIRE [29, 30, 55], Apollo et PAET. En 1987, Gupta [80] obtient des solutions des équations de Navier-Stokes avec déséquilibre chimique mais équilibre thermique, incluant de manière couplée le rayonnement. De leur côté, Park [147] en 1987, puis Hartung *et al.* [91] en 1991 s'intéressent aux solutions Navier-Stokes avec déséquilibre thermochimique et rayonnement en déséquilibre, mais en utilisant une approche découplée. L'ensemble de ces travaux ouvrira la voie vers les études bidimensionnelles couplées prenant en compte le déséquilibre thermochimique des écoulements de rentrée.

Dans les années 1990-2000, différentes plateformes de calcul prenant en compte le couplage entre les champs hydrodynamique en déséquilibre thermochimique et le champ de rayonnement

sont développées. Ces plateformes sont présentées ci-dessous. Pour chacune d'elle, on détaille le modèle de propriétés radiatives des gaz, la méthode de résolution du transfert radiatif, et la méthodologie de couplage.

Comme au paragraphe 1.3.1, pour chacune des plateformes de calcul, on énumère les cas d'épreuve simulés. Les résultats numériques relatifs à certains de ces cas sont utilisés comme base de comparaison dans la suite du mémoire. Le lecteur pourra se référer à l'étude bibliographique ci-dessous afin de connaitre les modélisations associées à ces résultats.

La chaîne de calcul LAURA/LORAN, NASA [88, 75]

Cette chaîne de calcul se compose du solveur hydrodynamique deux-température (T,T_{v-e-el}) LAURA (voir § 1.3.1), du code spectroscopique LORAN, et d'un solveur de transfert radiatif. Le code LORAN a été développé par Hartung, sur la base combinée du code RAD/EQUIL de Nicolet [139] et du code NEQAIR de Park [144, 145]. Le modèle de propriétés radiatives implémenté dans le code RAD/EQUIL calcule les contributions du continuum, des transitions moléculaires, et des raies atomiques des espèces C, H, N et O, mais suppose que le milieu est à l'ETL. Il a été jugé trop approximatif. Le code NEQAIR est un code de type raie-par-raie trop coûteux pour traiter les problèmes couplés.

Le code LORAN inclut le rayonnement lié-lié, lié-libre et libre-libre pour les espèces de l'air. Plus spécifiquement, il inclut les contributions des atomes d'oxygène et d'azote, du système premier négatif de l'ion N_2^+, des systèmes premier et second positifs de la molécule N_2, ainsi que les bandes des systèmes Lyman-Birge-Hopfield de la molécule N_2, des systèmes β et γ de la molécule NO et du système Schumann-Runge de la molécule O_2. Le rayonnement moléculaire est traité avec un modèle de bande. De plus, la répartition des points spectraux est optimisée pour diminuer le nombre de points nécessaires à la description des spectres d'émission/absorption, ceci afin de réduire le coût en place mémoire. Enfin, le déséquilibre du peuplement des niveaux électroniques est traité à l'aide de l'approximation QSS [144]. Le peuplement des autres modes d'énergie est calculé en supposant un équilibre de Boltzmann aux températures définies par le modèle multitempérature.

Le transfert radiatif est résolu par la méthode des plans tangents [9].

Le couplage entre les champs hydrodynamique et de rayonnement suit une approche dite faiblement couplée (figure 1.14). Le terme de divergence du flux radiatif est introduit à la fois dans l'équation de bilan de l'énergie totale et dans l'équation de bilan du réservoir énergétique vibration-électron-excitation électronique. Ce terme source est traité de manière explicite. Il est réactualisé par un calcul de transfert radiatif toutes les 200 à 5000 itérations hydrodynamiques, selon que l'écoulement est respectivement en déséquilibre ou proche de l'équilibre. Pour améliorer la convergence du processus couplé, le terme source est sous-relaxé : le dernier champ radiatif calculé, d'indice $n+1$, est combiné avec la solution du calcul radiatif précédent, d'indice n, pour obtenir un terme source radiatif de la forme :

$$(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^{n'+1} = d_q(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^n + (1 - d_q)(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^{n+1} \tag{1.36}$$

Le coefficient de relaxation d_q est pris égal à $0,5$. De plus, on s'assure que le processus de calcul ne rend pas incompatibles les champs hydrodynamique et radiatif entre deux réactualisations du terme source radiatif. Une incompatibilité peut apparaître par exemple lorsque le choc se rapproche de la paroi. A l'ancienne position occupée par l'onde de choc, le terme source radiatif sera important alors que le gaz ne sera plus émissif car sa température sera très faible, de l'ordre de la température dans l'écoulement infini amont. Pour éviter ce type de problème, le terme source radiatif est mis à zéro dans les régions en amont du choc, où le gaz est supposé transparent. Numériquement, le critère porte sur les températures : le terme source est mis à

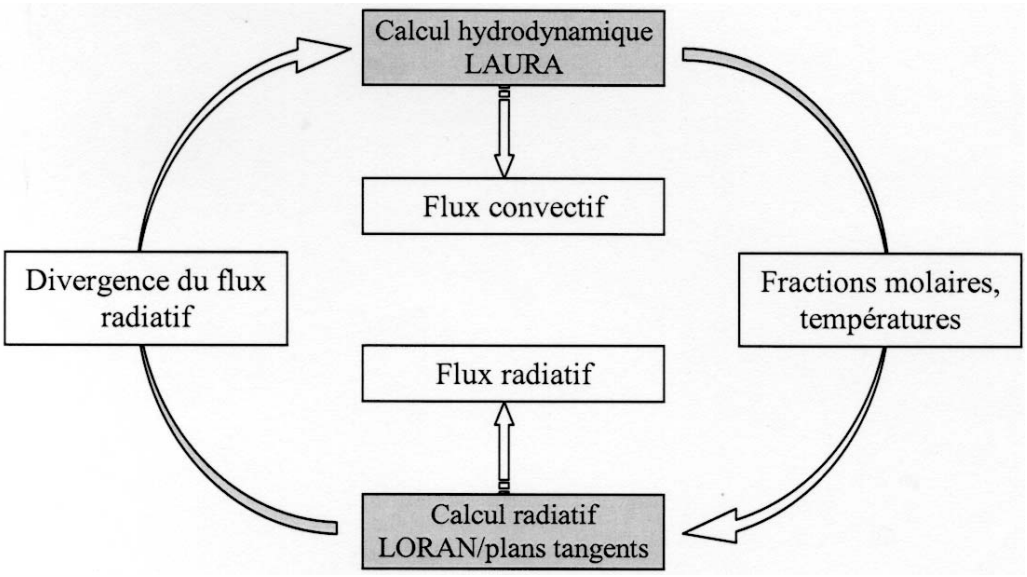


Fig. 1.14: Méthodologie de couplage faible dans la plateforme LAURA/LORAN

zéro lorsque les températures T et T_{v-e-el} sont toutes deux inférieures à $500K$. En outre, pour gagner en temps de calcul, la résolution de l'ETR peut porter sur un sous-maillage du maillage utilisé pour le calcul hydrodynamique.
La méthode couplée a permis de simuler les essais en tube à choc AVCO [86] et l'essai en vol FIRE II [29, 30, 55], et de traiter le retour de missions martiennes [90] ou lunaires [90, 67]. Les écarts avec les mesures expérimentales sont parfois très grands. Pour le cas d'épreuve FIRE II [29, 30, 55] par exemple, l'écart sur la luminance incidente au point d'arrêt peut dépasser 100% ; concernant l'échauffement de la paroi, l'écart entre les calculs et les mesures peut dépasser 30% [75]. La plateforme LAURA/LORAN, spécialement dédiée à l'étude des écoulements rayonnants en déséquilibre, n'a pas permis d'améliorer l'accord avec les mesures expérimentales par rapport aux méthodes simplifiées utilisées par le passé.
Lorsque l'approximation monodimensionnelle inhérente à la méthode des plans tangents n'est pas valide, Hartung et Hassan [89] ont utilisé la méthode P_1, mais dans une approche découplée. La distribution des points spectraux est optimisée pour réduire leur nombre à 1066. Les applications concernent le retour de mission martienne [134] et d'orbite géosynchrone (AFE [42]). Les comparaisons avec la méthode des plans tangents montrent que cette dernière surestime le flux radiatif d'environ 10% au point d'arrêt, l'écart s'accroissant lorsque l'on s'écarte de ce point.

Les chaînes de calcul dérivées de LAURA/LORAN : LAURA/NEQAIR, LAURA/NOVAR, et GIANTS/NOVAR

Dans la chaîne de calcul LAURA/NEQAIR [86, 75], le modèle de propriétés radiatives LORAN est remplacé par le code raie-par-raie plus précis NEQAIR [145]. Cependant, la chaîne n'est utilisée que dans une approche découplée à cause des temps de calcul requis par le code NEQAIR. L'intérêt d'utiliser ce code est de valider l'approche implémentée dans le solveur LORAN. Le flux radiatif incident à la paroi est supposé égal à :

$$q^{R-} = 2\pi \int I'^{-}_{\lambda} \mathrm{d}\lambda \tag{1.37}$$

Le terme I'^{-}_{λ} désigne la luminance monochromatique directionnelle incidente. Il s'obtient par un calcul de type ligne de visée le long de la normale à la paroi, discrétisée en couches thermodynamiquement homogènes coïncidant avec les cellules de maillage traversées par le rayon. Sur la ligne de visée, l'ETR est intégrée de proche en proche, depuis l'écoulement infini amont jusqu'à la paroi. L'utilisation du code NEQAIR n'a pas permis d'améliorer l'accord avec les mesures expérimentales sur le cas d'épreuve FIRE II [29, 30, 55].
Dans la chaîne de calcul LAURA/NOVAR [142], le modèle de propriétés radiatives des gaz LORAN est remplacé par le modèle NOVAR. Ce dernier, dérivé du code LORAN, permet de réduire le temps CPU en remplaçant l'approche QSS [144] par l'hypothèse de distributions de Boltzmann pour décrire l'occupation des niveaux d'énergie. L'écart engendré par cette approximation a été estimé inférieur à 3% pour des conditions thermodynamiques typiques de celles rencontrées dans les écoulements de rentrée terrestre à grande vitesse ($V \simeq 11km/s$). La méthode a été appliquée sur la configuration FIRE II [29, 30, 55].
Dans la chaîne de calcul GIANTS/NOVAR [142], le code hydrodynamique LAURA est remplacé par le code GIANTS décrit au paragraphe 1.3.1. Le déséquilibre thermique est modélisé par un modèle deux-température (T,T_v). Pour le calcul des propriétés radiatives du gaz, la température électronique des particules lourdes est supposée égale à la température de vibration T_v. En outre, la contribution radiative dans le bilan d'énergie vibrationnelle est négligée. La méthode a été appliquée à la configuration FIRE II [29, 30, 55]. Les prédictions en terme de luminance incidente et de flux de chaleur au point d'arrêt sont en bon accord avec les mesures expérimentales, bien que la modélisation soit en théorie plus simplifiée que dans la chaîne LAURA/LORAN, à la fois pour la partie hydrodynamique et pour le modèle de propriétés radiatives. Toutefois, on ne peut pousser la simplification jusqu'à s'affranchir de l'hypothèse de déséquilibre thermique. En effet, Olynick *et al.* [142] montrent que si l'on suppose l'écoulement à l'équilibre thermique alors que la couche de choc est théoriquement hors équilibre, on surévalue très fortement l'échauffement pariétal.

La chaîne de calcul TINA/HERTA/PARADE [105, 103, 130]
La chaîne de calcul TINA/HERTA/PARADE se compose du solveur hydrodynamique deux-température (T,T_{v-e-el}) TINA (voir §1.3.1), du code de transfert radiatif HERTA, et du modèle spectroscopique PARADE [172], initialement développé à partir du code NEQAIR [145].
Dans le code PARADE, l'émission et l'absorption du gaz sont quantifiées à l'aide d'une approche de type raie-par-raie. Pour l'air, le code inclut les contributions de 109 transitions pour les atomes d'oxygène et 179 transitions pour les atomes d'azote, les contributions du système premier négatif de l'ion N_2^+, des systèmes premier et second positifs de la molécule N_2, ainsi que les bandes des systèmes Lyman-Birge-Hopfield de la molécule N_2, des systèmes β et γ de la molécule NO et du système Schumann-Runge de la molécule O_2. Le code PARADE calcule le peuplement des niveaux électroniques soit selon une distribution de Boltzmann basée sur le modèle multitempérature du code TINA, soit selon une approche QSS [144]. Les répartitions de population sur les états vibrationnels et rotationnels au sein d'un même niveau électronique suivent des lois de Boltzmann respectivement aux températures T_{v-e-el} et T. Le domaine spectral est discrétisé en 5000 points, auxquels s'ajoutent des points supplémentaires pour une discrétisation plus fine des raies atomiques.
Le code HERTA [105] est basé sur une méthode de Monte-Carlo développée pour des configurations 2D-axisymétriques. La fréquence des paquets de photons et la trajectoire du faisceau sont déterminées par des processus stochastiques. L'absorption est également traitée de manière stochastique.
Le couplage hydrodynamique/rayonnement suit une approche faiblement couplée proche de

celle utilisée par la plateforme LAURA/LORAN (figure 1.14). Le terme source radiatif $-\nabla.\mathbf{q}^R$ est introduit à la fois dans l'équation de bilan d'énergie totale et dans l'équation de bilan du réservoir énergétique vibration-électronique. Il est traité de manière explicite. De plus, il est corrigé à chaque itération en fonction de l'évolution du champ hydrodynamique par la méthode suivante : après chaque calcul radiatif, les cellules purement émissives ou purement absorbantes sont supposées le rester lors des itérations CFD. Pour les cellules purement émissives, le terme $\nabla.\mathbf{q}^R$ est supposé proportionnel à la puissance quatrième de la température T_{v-el} ; pour les cellules purement absorbantes, il est supposé proportionnel à l'inverse de la puissance quatrième de la température T_{v-el}. Après un calcul radiatif, les facteurs de proportionnalité A et B sont définis tels que $\nabla.\mathbf{q}^R = AT^4_{v-e-el}$ et $\nabla.\mathbf{q}^R = B/T^4_{v-e-el}$. Ces facteurs restent constants jusqu'au prochain calcul radiatif. Ainsi, lors du calcul hydrodynamique, le terme source radiatif suit l'évolution de la température. Cette méthode permet d'accélérer la convergence du calcul en renforçant le couplage entre les champs hydrodynamique et radiatif.
La méthode a été appliquée à la sonde Rosetta de la mission ESA/NASA Comet Nucleus Sample Return [105, 106], à la sonde BSUV [103], et à la sonde Huygens pour une rentrée dans l'atmosphère de Titan [130].

La chaîne de calcul URANUS/HERTA/PARADE, IRS université de Stuttgart [108]
Cette chaîne de calcul est similaire à la chaîne TINA/HERTA/PARADE, excepté le fait que le solveur hydrodynamique TINA est remplacé par le solveur URANUS. Le modèle multi-température est de la forme (T,$T_{v,m}$,T_{e-el}).
Comme une seule température de vibration doit être spécifiée en entrée du code PARADE, on calcule cette température à partir de la moyenne des énergies associées aux trois températures $(T_{v,m})_{m=N_2,O_2,NO}$ pondérées par les fractions molaires des molécules.
Lors du couplage, le terme source est introduit dans l'équation d'énergie totale et dans l'équation bilan du réservoir énergétique électron-excitation électronique. La contribution radiative dans les équations de conservation des énergies vibrationnelles est négligée.
La méthode a été utilisée pour reproduire les mesures en vol de l'essai FIRE II [29, 30, 55].

Le code ARES, MAB/CEA/CESTA [198, 39]
Le code ARES calcule les écoulements de gaz réactif à l'équilibre thermique.
Le modèle de propriétés radiatives des gaz est un modèle de groupe. Le spectre est découpé en 4 à 15 groupes sur lesquels le coefficient d'absorption s'exprime en fonction de paramètres thermodynamiques et de deux paramètres radiatifs : la température radiative et le facteur d'anisotropie. Ces deux grandeurs sont définies à partir des deux premiers moments de la luminance, que sont l'énergie radiative E^R et le flux radiatif q^R. Les fonctions sont obtenues à partir du code spectroscopique PARADE pour les espèces monoatomiques (C,N,O) et à partir d'un solveur propre au MAB/CEA/CESTA pour les espèces polyatomiques (N_2,CO,CO_2,NO,O_2).
Le transfert radiatif est résolu dans l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local par une méthode des moments de type M1-multigroupe (voir § 1.2.2.3). La loi de fermeture choisie par les auteurs est écrite sous la forme d'Eddington : $p^R = D^R.E^R$ où p^R désigne la pression radiative, et D^R le tenseur d'Eddington, déterminé par application du principe d'entropie minimum[‖].
Cette loi de fermeture présente des propriétés intéressantes. Contrairement à la fermeture P_1 ($p^R = \frac{1}{3}I_d$) largement répandue, elle assure notamment le respect de la condition de limitation de flux, empêchant que la vitesse de propagation des photons ne dépasse pas la vitesse de la lumière.

[‖]Minimisation de l'entropie au sens mathématique, qui correspond à la maximisation de l'entropie physique.

Les équations de l'hydrodynamique et du transfert radiatif sont résolues simultanément dans un système conservatif hyperbolique en temps. La procédure implicite est basée sur la méthode GMRES.
Les cas d'application portent sur des rentrées en atmosphère martienne (TC3 [38]), vénusienne (sonde Pionneer) et terrestre (MSR). Dans le cas de la rentrée en atmosphère martienne, l'effet du couplage est très faible. Dans les deux autres cas, l'écoulement est considérablement modifié par les effets du rayonnement. L'onde de choc s'est fortement rapprochée de la paroi et les températures dans la couche de choc ont diminué (effet de "radiation cooling").

Le code RGDSV-2 et l'outil MONSTER, IPMech RAS [177, 178, 179, 180, 181]
Le modèle RGDSV-2, développé par Surzhikov [179, 180, 181], se base sur les équations de gaz visqueux rayonnant en déséquilibre chimique et thermique vibrationnel. L'équation de bilan d'énergie totale est remplacée par une équation portant sur la température de translation de type Fourier-Kirchhoff.
Le modèle de propriétés radiatives du gaz est un modèle multigroupe. Il est construit à partir de la base de données spectroscopiques ABSORB_AGM, extraite de l'outil de calcul MONSTER** [177, 178].
Le champ de rayonnement est calculé à l'aide de l'approximation P_1 de la méthode des harmoniques sphériques. A la paroi, le flux radiatif monochromatique incident est calculé par une méthode de Monte-Carlo tandis que le flux radiatif intégré sur le domaine spectral est calculé par une méthode de lancer de rayons.
Pour la résolution numérique, le système d'équations est découpé en trois parties. Les équations de la dynamique du gaz sont discrétisées par une méthode AUSM [203] précise au second ordre en espace. Les équations de conservation de la masse de chaque espèce chimique sont intégrées par une méthode implicite. L'équation de Fourier-Kirchhoff et l'équation du transfert radiatif sont intégrées simultanément par une méthode implicite aux différences finies précise au second ordre en temps et en espace. La divergence du flux radiatif est introduite dans l'équation de Fourier-Kirchhoff. Pour les cas de forte interaction hydrodynamique/rayonnement, des itérations internes peuvent être utilisées à chaque pas de temps pour les équations de Fourier-Kirchhoff et du transfert radiatif.
L'application porte sur des cas de rentrée martienne (TC3 [38]). Les calculs montrent que les flux radiatif et convectif sont du même ordre de grandeur au niveau de l'arrière-corps. Le rayonnement incident se situe majoritairement dans la partie infrarouge du spectre, il est donc plutôt d'origine moléculaire. Au niveau de l'avant-corps, le flux convectif est clairement dominant. Le rayonnement est distribué sur l'ensemble du spectre. Néanmoins, lorsqu'on s'écarte de la ligne d'arrêt, les transitions dans la plage IR deviennent rapidement prépondérantes.

Le modèle cinétique du TsAGI/NEQRAD, TsAGI [71, 72]
Sur la base d'expériences réalisées dans les années 90, les auteurs ont montré que pour des vitesses de choc supérieures à 9km/s et des pressions relativement faibles ($< 133Pa$) dans un écoulement de gaz derrière une onde de choc, le peuplement des niveaux d'énergie des atomes et des ions - les molécules sont dissociées dans le contexte de l'étude - s'écarte nettement d'une distribution de Boltzmann. Cette constatation s'explique par la dépopulation, par émission radiative, des états atomiques excités de l'azote et de l'oxygène. Ainsi, le degré d'ionisation, l'intensité du rayonnement et la densité du gaz peuvent différer notablement des valeurs correspondantes obtenues sous l'hypothèse d'une distribution de Boltzmann, hypothèse classiquement

**Le Computing System MONSTER est aujourdhui rebaptisé ASTEROID.

adoptée.
Le modèle cinétique du TsAGI simule les processus d'ionisation et de rayonnement en déséquilibre dans les écoulements de rentrée terrestre. Le modèle inclut le déséquilibre thermique vibrationnel pour les molécules O_2, NO et N_2, le déséquilibre thermique du gaz d'électrons, le couplage vibration-dissociation suivant le modèle CVDV de Treanor et Marrone [125], les réactions de dissociation et d'échange, et les réactions d'ionisation et d'échange de charge. L'ionisation des atomes N et O est décomposée en une suite de mécanismes faisant intervenir des états électroniques résonants, dépeuplés par émission radiative. Par exemple, l'ionisation de l'azote s'opère en deux temps : la collision avec un électron entraîne d'abord l'excitation depuis le niveau fondamental $N(^4S)$ vers le premier radiatif $N(^4P)$, puis une nouvelle collision arrache un électron lié à l'atome excité pour produire un ion. Ces processus réactionnels s'écrivent :

$$\begin{aligned} N(^4S) + e^- &\rightarrow N(^4P) + e^- \\ N(^4P) + e^- &\rightarrow N^+(^3P) + 2e^- \end{aligned}$$

Les propriétés radiatives sont calculées à l'aide d'un code de type raie-par-raie, appelé NEQRAD. Il inclut les systèmes moléculaires prépondérants des molécules N_2, O_2, NO, N_2^+ et NO^+, les raies atomiques de N et O sur la base des données spectroscopiques de Surzhikov [176] et le continuum. Le rayonnement moléculaire est basé sur l'approximation QSS [144].
Par rapport aux modèles chimiques classiques du type de celui de Park [150], le modèle cinétique du TsAGI prédit un degré d'ionisation plus faible et des niveaux de température T et T_e plus élevés. Des essais numériques réalisés sur la configuration FIRE II [29, 30, 55] montrent que la prédiction de l'échauffement de la paroi est alors en meilleur accord avec les mesures en vol.

Le code de Gökçen, Eloret Institute [69]
La partie hydrodynamique du solveur de Gökçen a été présentée au paragraphe 1.3.1. Le modèle multitempérature est un modèle à trois températures (T_t,T_r,T_{v-e-el}).
Le modèle de propriétés radiatives repose sur le modèle de bande de Park et Milos [155]. Sur chaque bande, le coefficient d'absorption s'exprime par des polynômes fonction de la température de vibration-électronique T_{v-e-el}. Pour les applications terrestres, les espèces rayonnantes sont les espèces N_2, O_2, NO, N, O et N_2^+. Le spectre est discrétisé en 2371 bandes d'absorption dans l'intervalle 750-15000Å. Le modèle a été partiellement validé par comparaison au code NEQAIR [144, 145]. Le coefficient d'émission est calculé sous l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local.
L'équation de transfert radiatif est résolue à l'aide de l'approche monodimensionnelle des plans tangents [9].
Le terme source radiatif $-\nabla.\mathbf{q}^R$ est introduit dans l'équation de bilan d'énergie totale et dans l'équation de bilan du réservoir énergétique vibration-électronique. La méthode numérique est entièrement implicite ; la matrice incluant le terme source radiatif est inversée par une méthode itérative par bloc. Théoriquement, cette méthode ne fonctionne que si la dominance diagonale de la matrice est préservée. Or les termes radiatifs tendent à réduire la dominance diagonale. L'auteur suppose que la dominance diagonale est brisée lorsque le rayonnement devient prédominant par rapport aux phénomènes convectifs. Il constate néanmoins que dans le cas d'épreuve choisi (FIRE II [29, 30, 55]), le processus converge. Cependant, le modèle sous-évalue fortement le flux radiatif incident au point d'arrêt par rapport aux données expérimentales.

Le code DSMC, Université de Sydney [18, 188]
Le code DSMC développé par Bird utilise la méthode Direct Simulation Monte-Carlo pour

traiter les écoulements de gaz raréfié selon une approche lagrangienne.
Le rayonnement thermique résultant des transitions lié-lié entre états électroniques est pris en compte. Le peuplement des niveaux électroniques est déterminé en supposant une distribution de Boltzmann. Cette distribution est caractérisée par une température effective basée sur la somme des énergies de translation et d'excitation électronique de la particule collisionnelle. Les états électroniques des atomes sont rassemblés en groupes pour diminuer le nombre d'états à traiter. Les transitions radiatives entre ces groupes sont caractérisées par la donnée de la longueur d'onde et du temps caractéristique d'émission. De plus, dans le modèle, une fraction seulement des collisions conduit à l'excitation électronique de la particule. Cette fraction est reliée au rapport de la section efficace pour l'excitation électronique et de la section efficace élastique. Le rayonnement moléculaire suit le modèle de Park [144] et inclut les contributions des systèmes suivants : premier et second positifs de N_2, Schumann-Runge de O_2, β et γ de NO, et premier négatif de N_2^+. L'absorption est le plus souvent négligée, ou bien introduite selon une méthode simple de calcul de la probabilité d'absorption d'un photon.
La méthode est appliquée aux écoulements rencontrés lors des expériences tube à choc AVCO [7] et de l'essai en vol FIRE II [29, 30, 55].

Le code CELHyO2D, ONERA [23]
Broc [23] a modifié le code CELHyO2D, présenté au paragraphe 1.3.1, afin de prendre en compte le couplage hydrodynamique/rayonnement pour des écoulements de rentrée terrestre à très grande vitesse ($\simeq 15km/s$). Cette approche combine à la fois une representation multi-température avec un modèle (T,T_e) et une représentation de type niveau-par-niveau. En effet, les cinq premiers niveaux électroniques de l'atome d'azote sont considérés comme des espèces chimiques à part entière. Ce choix conduit à ajouter des équations de conservation qui traduisent l'évolution du taux de peuplement des cinq niveaux lors des processus collisionnels et radiatifs. Les termes sources des équations supplémentaires s'obtiennent à l'aide d'un modèle collisionnel-radiatif prenant en compte les processus chimiques et les transitions radiatives de type lié-lié et lié-libre.
Le transfert radiatif est traité selon une approche ligne de visée.
Le couplage hydrodynamique/rayonnement se traduit par le terme de divergence du flux radiatif dans l'équation de bilan d'énergie totale et par les termes sources dans les équations de conservation de la densité des espèces et des niveaux.
La méthode est appliquée aux conditions de rentrée de la sonde Rosetta (ESA), pour une vitesse de $14,3km/s$ et une altitude de $63km$. L'occupation des niveaux électroniques est comparée avec la solution obtenue en supposant un équilibre de Boltzmann : des écarts importants sont constatés. Le modèle collisionnel-radiatif conduit à des densités beaucoup plus faibles sur les niveaux électroniques excités par rapport à une distribution de Boltzmann à la température T.

Analyse
La diversité des conditions d'écoulement - atmosphère terrestre ou autre mélange gazeux, écoulement de couche de choc ou écoulement de sillage, ...- implique une grande variété de modèles radiatifs et de méthodes de couplage hydrodynamique/rayonnement. Ainsi, chaque plateforme de calcul est dédiée à la résolution d'un type de problématique.

Par exemple, le calcul des transferts thermiques dans la couche de choc qui se forme autour d'un corps de rentrée terrestre à grande vitesse, amène à l'étude du rayonnement atomique. Dans ce cas, on privilégie une approche de type raie-par-raie comme celles implémentées dans les codes spectroscopiques LORAN [88], NEQAIR [144, 145], NOVAR [142], PARADE [172] ou encore NEQRAD [71, 72]. Néanmoins, le coût élevé de ces codes, en terme de place mémoire

et de temps de calcul, incite à choisir des méthodes de résolution de l'ETR simplifiées, comme la méthode des plans tangents par exemple.

D'un autre côté, pour une étude portant sur le rayonnement de sillage derrière un corps de rentrée martienne, le rayonnement moléculaire semble prédominant [177, 178, 179, 180, 181]. Pour ce type de rayonnement, un modèle de propriétés radiatives approché permet de diminuer le coût du calcul tout en gardant une bonne précision. Dans ce cas, il est possible d'utiliser une méthode de résolution de l'ETR plus précise, de type Monte-Carlo par exemple [179, 180].

D'autre part, certains modèles de propriétés radiatives représentent le déséquilibre du peuplement des niveaux électroniques. C'est le cas, par exemple, des codes spectroscopiques NEQAIR [144, 145] ou NEQRAD [71, 72], où l'approche QSS de Park [144] est utilisée.

Dans des conditions de rentrée terrestre à vitesse modérée ($V \simeq 5km/s$, $z \simeq 80km$), le rayonnement est proche de l'équilibre. Par conséquent, l'approche QSS ne donne pas des résultats satisfaisants [105, 103], au contraire de l'approche multitempérature.

Pour des conditions de rentrée typiques de la mission FIRE II ($V \simeq 11km/s$, $z \simeq 70km$), le rayonnement s'écarte de la condition d'équilibre. Toutefois, Olynick *et al.* [142] estiment que l'écart entre les approches QSS et multitempérature sur le calcul des spectres d'émission est de l'ordre de 3% seulement. Ainsi, l'approche multitempérature reste dans ce cas une alternative intéressante à l'approche QSS (et par extension à l'approche niveau-par-niveau). Cependant, se pose la question du domaine d'application de cette approche.

Par ailleurs, le choix des modélisations retenues pour l'hydrodynamique et pour le rayonnement soulève certaines difficultés. Par exemple, le peuplement des niveaux d'énergie des particules, et en particulier du mode d'excitation électronique, est théoriquement influencé par les processus radiatifs (voir § 1.1.3.2). Selon Smith *et al.* [172], il est même inutile de considérer l'énergie électronique dans un solveur hydrodynamique ignorant les effets radiatifs. Or si certains modèles spectroscopiques (NEQAIR [144, 145], PARADE [172], NEQRAD [71, 72]) représentent le déséquilibre du peuplement des niveaux électroniques par des approches de type QSS, les solveurs hydrodynamiques associés (LAURA [66], TINA [105, 159], URANUS [108]) utilisent des approches multitempératures reposant sur un équilibre de Boltzmann. Le couplage de ces solveurs pose donc un problème de principe.

Un dernier point concerne les termes de couplage présents dans les équations de Navier-Stokes. Dans tous les cas, le terme de puissance radiative apparaît dans l'équation de bilan d'énergie totale. Dans le cadre d'une approche multitempérature, ce terme est parfois introduit dans les équations de bilan d'énergie des modes internes. Tel est le cas, par exemple, dans la plateforme URANUS/HERTA/PARADE [108] où l'approche multitempérature repose sur les températures T, $T_{v,m}$ et T_{e-el}. La puissance radiative est introduite dans l'équation de bilan d'énergie associée à la température T_{e-el}, c'est-à-dire associée aux modes de translation des électrons et d'excitation électronique des espèces lourdes. Par contre, la contribution radiative sur la partie vibrationnelle est nulle. Ce choix revient à affirmer que les transitions radiatives les plus importantes sont les transitions entre états électroniques, ou encore que les transitions rovibrationnelles ou rotationnelles sont négligeables. Pourtant, les contributions rovibrationnelles sont prises en compte dans le code PARADE [108], elles sont donc incluses dans le calcul de la puissance radiative. Si la simplification faite n'était pas valable, la puissance radiative devrait être redistribuée entre les différents réservoirs d'énergie ; cette question n'a jamais été abordée, à notre connaissance.

Chapitre 2

Description de la modélisation et de la méthode numérique pour l'hydrodynamique

L'objectif du chapitre est de présenter le système d'équations retenu dans le cadre de cette thèse pour décrire le comportement du fluide dans les écoulements hypersoniques de rentrée. On énumère l'ensemble des hypothèses conduisant à l'écriture de ce système. On décrit également l'ensemble des modèles physico-chimiques qui déterminent le comportement thermodynamique du gaz : cinétique chimique, transport, relaxation énergétique. Enfin, on expose brièvement la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations du fluide, sans toutefois rentrer dans les détails du schéma numérique de flux convectif dont le développement a fait partie intégrante de l'étude. La modélisation hydrodynamique et la méthode numérique sont implémentées dans le solveur CELHyO2D.
On note que le terme source radiatif est présent dans les équations ; cependant, les méthodes relatives au traitement du transfert radiatif ne sont pas abordées dans ce chapitre. Elles font l'objet d'un chapitre indépendant (chapitre 3).

2.1 Système d'équations pour les écoulements hypersoniques faiblement ionisés

2.1.1 Hypothèses du modèle

- Le système est thermodynamiquement isolé.
- Aucun champ électromagnétique extérieur n'agit sur l'écoulement. En particulier, le champ magnétique planétaire est négligé. Les effets des forces de pesanteur sont également négligés.
- L'écoulement est supposé continu et laminaire.
- Le mélange gazeux se comporte comme un fluide newtonien.
- Chaque espèce du mélange, supposé idéal, suit la loi d'état de gaz parfait.
- Le mélange gazeux est un plasma, c'est-à-dire un gaz ionisé globalement neutre du point de vue macroscopique. Les seules particules chargées négativement sont les électrons, et les espèces chargées positivement le sont simplement.

- Le plasma est faiblement ionisé, c'est-à-dire que les effets des collisions entre les électrons et les particules neutres sont plus importants que les effets des collisions entre les électrons et les ions [28]. De plus, la fraction massique des ions est de l'ordre de quelques pour cent et les seules collisions considérées sont de type binaires [11].
- A cause de leur faible masse et donc de leur grande mobilité, les électrons ont tendance à diffuser plus vite que les particules lourdes, laissant derrière eux un excès de charge positive. Ce phénomène est appelé séparation de charge. En retour, le champ de charges engendre des forces électriques. Ces forces ont un effet de ralentissement sur les électrons et d'accélération sur les ions. Elles tendent ainsi à limiter la séparation de charge. C'est le concept de la diffusion ambipolaire [165, 128, 18]. Ce phénomène a lieu notamment au voisinage d'un choc où le gradient de la densité électronique est maximal et où l'on s'écarte localement de l'hypothèse de neutralité [18]. En accord avec la théorie de Debye-Henckel, si les dimensions caractéristiques de l'écoulement sont grandes devant le rayon de Debye ξ, les ions retiennent les électrons dans leur voisinage immédiat, à une distance ne dépassant pas ce rayon, et diffusent avec eux. La grandeur ξ est donnée par [18] :

$$\xi = \left(\frac{kT_e}{4\pi n_e q_e^2} \right)^{1/2} \tag{2.1}$$

  Nous nous plaçons dans cette hypothèse et considérons que le mélange est localement électriquement neutre et sans courant de conduction.
- Toutes les espèces chimiques sont supposées se déplacer à la même vitesse moyenne.
- Les termes suivants sont négligés : les termes produits de contraintes visqueuses avec des vitesses de diffusion [26], la viscosité volumique, et les effets diffusifs liés aux gradients thermiques (effet Soret) et de pression (effet Dufour).
- Le déséquilibre thermique est représenté par l'approche multitempérature $(T, T_{v,m}, T_e)$. Les modes de translation et de rotation des espèces lourdes sont supposés équilibrés à la température T. L'occupation des niveaux vibrationnels est décrite par une loi Boltzmanienne caractérisée par une température de vibration spécifique $T_{v,m}$ pour les espèces moléculaires d'oxygène O_2 et d'azote N_2 et par la température T pour les autres espèces moléculaires. La température T_e est la température de translation du gaz d'électrons. Le choix de ce modèle multitempérature permet d'écrire le système d'équations sous la forme conservative proposée par Coquel et Marmignon [53, 124, 54].
- L'énergie du mode d'excitation électronique des espèces lourdes est négligée. Une étude d'Olynick *et al.* [142], portant sur des écoulements de rentrée terrestre à des vitesses allant jusqu'à $11km/s$, a montré qu'inclure l'énergie de ce mode dans le calcul de l'énergie totale et, a fortiori, résoudre une équation de bilan d'énergie d'excitation électronique caractérisée par une température propre T_{el}, ne permet pas d'améliorer la précision des résultats. D'autre part, le peuplement des niveaux électroniques est très sensible aux processus radiatifs [172].
- Les phénomènes dissipatifs au sein du gaz d'électrons (contraintes visqueuses, conduction thermique, diffusion) et ses effets d'inertie sont négligés. La derniere approximation est justifiée par la faible masse de l'électron. L'hypothèse portant sur les phénomènes dissipatifs internes au gaz d'électrons permet d'écrire le système d'équations sous la forme conservative proposée par Coquel et Marmignon [53, 54, 124].
- La contribution radiative dans le système d'équations hydrodynamiques n'apparaît que dans l'équation bilan de l'énergie totale. La contribution sur les autres modes d'énergie (vibration des espèces moléculaires, translation des électrons) est négligée.
- L'énergie radiative et la pression radiative sont négligées [214].

2.1.2 Système d'équations de conservation

Le système d'équations qui régit le comportement du fluide dans les écoulements hypersoniques de rentrée est donné ci-dessous. Il est écrit dans un repère cartésien. L'approche utilisée est l'approche proposée par Coquel et Marmignon [53, 54, 124] : le système se compose des équations de bilan de masse de chaque espèce lourde, des équations de bilan de quantité de mouvement, des équations de bilan d'énergie vibrationnelle pour les espèces moléculaires en déséquilibre thermique vibrationnel, de l'équation de bilan d'entropie du gaz d'électrons, et de l'équation de bilan d'énergie totale du mélange. Le système est fermé par la loi d'électroneutralité locale et par les lois d'état de gaz parfait.

$$\underbrace{\partial_t \rho_s}_{1} + \underbrace{\partial_{x_j}(\rho_s u_j)}_{2} = \underbrace{\partial_{x_j}\left(\rho D_s \partial_{x_j} y_s\right)}_{3} + \underbrace{\dot{w}_s}_{4} \tag{2.2a}$$

$$\underbrace{\partial_t \rho u_i}_{1} + \underbrace{\partial_{x_j}(\rho u_i u_j)}_{2} + \underbrace{\partial_{x_j}(p+p_e)\delta_{ij}}_{3} = \underbrace{\partial_{x_j}\left[\mu\left(\partial_{x_j}u_i + \partial_{x_i}u_j\right) - \frac{2}{3}\mu\partial_{x_k}u_k\delta_{ij}\right]}_{4} \tag{2.2b}$$

$$\begin{aligned}\underbrace{\partial_t \rho_m e_{v,m}}_{1} + \underbrace{\partial_{x_j}\left(\rho_m e_{v,m} u_j\right)}_{2} &= \underbrace{\partial_{x_j}\left(\eta_{v,m}\partial_{x_j}T_{v,m}\right)}_{3} + \underbrace{\partial_{x_j}\left(\rho e_{v,m} D_m \partial_{x_j} y_m\right)}_{4} \\ &+ \underbrace{\rho_m \frac{e_{v,m}(T) - e_{v,m}(T_{v,m})}{\tau_{t-v,m}}}_{5} + \underbrace{S_m^{v-v}}_{6} + \underbrace{S_m^{e-v}}_{7} \\ &+ \underbrace{\dot{w}_m e_{v,m}}_{8}\end{aligned} \tag{2.2c}$$

$$\underbrace{\partial_t \rho s_e}_{1} + \underbrace{\partial_{x_j}(\rho s_e u_j)}_{2} = \underbrace{\frac{\gamma_e - 1}{\gamma_e}\frac{\rho s_e}{p_e}(S_{e-t} + S_{e-r} + S_{e-v})}_{3} \tag{2.2d}$$

$$\begin{aligned}\underbrace{\partial_t \rho E}_{1} + \underbrace{\partial_{x_j}(\rho H u_j)}_{2} &= \underbrace{\partial_{x_j}\left[\eta_{eq}\partial_{x_j}T + \sum_m \left(\eta_{v,m}\partial_{x_j}T_{v,m}\right)\right]}_{3} \\ &+ \underbrace{\partial_{x_j}\left[u^i\mu\left(\partial_{x_j}u_i + \partial_{x_i}u_j\right) - \frac{2}{3}\mu u_i \partial_{x_k}u_k\delta_{ij}\right]}_{4} \\ &+ \underbrace{\partial_{x_j}\left(\rho\sum_s h_s D_s \partial_{x_j} y_s\right)}_{5} - \underbrace{\partial_{x_j} q_j^R}_{6}\end{aligned} \tag{2.2e}$$

L'électroneutralité locale s'écrit :

$$\frac{\rho_e}{M_e} = \sum_{s=ion}\frac{\rho_s}{M_s} \tag{2.3}$$

La masse volumique du mélange ρ est définie par la relation :

$$\rho = \sum_s \rho_s \tag{2.4}$$

et vérifie la loi de conservation :

$$\partial_t \rho + \partial_{x_j}\rho u_j = 0 \tag{2.5}$$

Cette loi est redondante avec les lois par espèce puisqu'elle s'obtient en sommant ces dernières. Le terme y_s désigne la fraction massique :

$$y_s = \rho_s/\rho \tag{2.6}$$

La pression des espèces lourdes p se définit, d'après la loi de Dalton, comme la somme des pressions partielles :

$$p = \sum_{s\neq e} p_s \tag{2.7}$$

où les pressions partielles s'écrivent :

$$p_{s\neq e} = n_s kT = \rho_s RT/M_s \tag{2.8}$$

La pression du gaz d'électrons s'écrit :

$$p_e = n_e kT_e = \rho_e RT_e/M_e \tag{2.9}$$

L'entropie du gaz d'électrons est définie par l'expression [54, 124] :

$$\rho s_e = \left(\frac{p_e}{(\gamma_e - 1)y_e}\right)^{1/\gamma_e} \tag{2.10}$$

L'énergie totale E est définie par la relation :

$$E = \frac{u_i u_i}{2} + \sum_s \frac{\rho_s e_s}{\rho} \tag{2.11}$$

L'enthalpie totale H est définie par la relation :

$$H = E + \frac{p + p_e}{\rho} \tag{2.12}$$

En supposant que les modes internes sont indépendants [97], l'énergie d'une particule lourde e_s s'écrit comme la somme des contributions* des modes internes et de l'enthalpie de formation :

$$e_{m=molecule} = e_{t,m} + e_{r,m} + e_{v,m} + h^0_{f,m} \tag{2.13a}$$

$$e_{s=atome} = e_{t,s} + h^0_{f,s} \tag{2.13b}$$

$$e_{t,s} = \frac{3}{2}\frac{R}{M_s}T \tag{2.13c}$$

$$e_{r,m} = \frac{R}{M_m}T \tag{2.13d}$$

$$e_{v,m} = \frac{R}{M_m}\theta_{v,m}\left(e^{\frac{\theta_{v,m}}{T_{v,m}}} - 1\right)^{-1} \tag{2.13e}$$

Le terme $\theta_{v,m}$ désigne la température caractéristique de vibration de l'espèce moléculaire m. L'énergie vibrationnelle est décrite à l'aide du modèle de l'oscillateur harmonique à nombre infini de niveaux vibrationnels [209].
L'énergie d'un électron est égale à son énergie de translation :

$$e_e = \frac{3}{2}\frac{R}{M_e}T_e \tag{2.14}$$

Les propriétés thermodynamiques des espèces chimiques (masse molaire, enthalpie de formation, température caractéristique de vibration, de dissociation et d'ionisation) sont données en annexe C (tableau C.1).

*Si l'énergie d'excitation électronique n'est pas négligée, un terme $e_{el,m}$ apparaît également dans la somme (2.13a) et $e_{el,s}$ dans la somme (2.13b).

2.1.3 Signification des termes de chaque équation

Chaque terme des équations de conservation est explicité ci-dessous.

2.1.3.1 Conservation de la masse de l'espèce s

Les quatre termes de l'équation (2.2a) représentent :

(1)	Taux de variation temporelle de la masse par unité de volume
(2)	Flux de masse convectée à la vitesse du mélange u_j
(3)	Diffusion massique
(4)	Taux de production massique due aux réactions chimiques

2.1.3.2 Conservation de la quantité de mouvement globale dans la direction i

Les quatre termes de l'équation (2.2b) représentent :

(1)	Taux de variation temporelle de la quantité de mouvement par unité de volume
(2)	Flux de quantité de mouvement convectée à la vitesse du mélange u_j
(3)	Action des forces de pression
(4)	Action des forces visqueuses

2.1.3.3 Conservation de l'énergie de vibration de l'espèce moléculaire m

Les huit termes de l'équation (2.2c) représentent :

(1)	Taux de variation temporelle de l'énergie de vibration par unité de volume
(2)	Flux d'énergie de vibration convectée à la vitesse du mélange u_j
(3)	Conduction thermique de l'énergie de vibration due au gradient de température de vibration
(4)	Diffusion de l'énergie de vibration due au gradient de concentration
(5)	Echange d'énergie (relaxation) entre le mode de vibration de l'espèce m et le mode de translation des autres espèces lourdes
(6)	Echange d'énergie avec les modes de vibration des différentes espèces moléculaires
(7)	Echange d'énergie entre le mode de vibration de l'espèce moléculaire m et le mode de translation des électrons
(8)	Energie de vibration perdue ou gagnée lors des réactions chimiques

2.1.3.4 Conservation de l'entropie du gaz d'électrons

Les trois termes contenus dans l'équation (2.2d) représentent :

(1)	Taux de variation temporelle de l'entropie du gaz d'électrons par unité de volume
(2)	Flux d'entropie du gaz d'électrons convectée à la vitesse du mélange u_j
(3)	Echange d'énergie entre le mode de translation des électrons et les modes de translation, rotation et vibration des espèces lourdes

Cette équation est caractéristique du modèle proposé. Sa construction est donnée dans [53] et reprise dans l'annexe B.

2.1.3.5 Conservation de l'énergie totale

Les six termes contenus dans l'équation (2.2e) représentent :

(1)	Taux de variation temporelle de l'énergie totale par unité de volume
(2)	Flux d'enthalpie totale convectée à la vitesse du mélange u_j
(3)	Conduction de l'énergie due aux gradients de températures
(4)	Travail des contraintes visqueuses
(5)	Diffusion de l'enthalpie due aux gradients de concentration
(6)	Terme source radiatif

Le terme radiatif (6) est explicité au paragraphe 3.1.3.

2.2 Modélisations physico-chimiques

Cette partie présente les différents modèles physico-chimiques utilisés dans cette étude. D'autres modèles sont implémentés dans le code CELHyO2D ; ils ont été étudiés et comparés, par exemple, par Flament *et al.* [65] et William[209].

2.2.1 Cinétique chimique

Une réaction chimique (r) s'écrit sous la forme générale :

$$\sum_{s=1}^{ns} \nu_s^{'(r)} A_s^{(r)} \underset{k_b^{(r)}}{\overset{k_f^{(r)}}{\rightleftharpoons}} \sum_{s=1}^{ns} \nu_s^{''(r)} A_s^{(r)} \tag{2.15}$$

où le terme $A_s^{(r)}$ désigne est une espèce chimique présente dans le milieu considéré, $\nu_s^{'(r)}$ le coefficient stœchiométrique (positif) pour un réactif, $\nu_s^{''(r)}$ le coefficient stœchiométrique (positif) pour un produit. La constante $k_f^{(r)}$ (resp. $k_b^{(r)}$) représente la constante de vitesse directe (resp. inverse) de la réaction (r). La détermination de ces constantes de vitesse permet d'écrire les taux de production/destruction des espèces :

$$\dot{w}_s = M_s \sum_{(r)} \left(\nu_s^{''(r)} - \nu_s^{'(r)} \right) \left[k_f^{(r)} \prod_r \left(\frac{\rho_r}{M_r} \right)^{\nu_r^{'(r)}} - k_b^{(r)} \prod_r \left(\frac{\rho_r}{M_r} \right)^{\nu_r^{''(r)}} \right] \tag{2.16}$$

2.2.1.1 Loi d'Arrhénius

Une réaction chimique se produit lorsque l'énergie mise en jeu au cours d'une collision entre particules dépasse une valeur seuil appelée énergie d'activation. L'expérience montre que les vitesses de réaction suivent généralement une loi de type Arrhénius[†] :

$$k_f = A_f T_{a,f}^{B_f} e^{-\frac{\theta_f}{T_{a,f}}} \tag{2.17a}$$

$$k_b = A_b T_{a,b}^{B_b} e^{-\frac{\theta_b}{T_{a,b}}} \tag{2.17b}$$

Les valeurs des constantes $A_f, B_f, \theta_f, A_b, B_b, \theta_b$ dépendent de la réaction considérée. La température d'activation $T_{a,f}$ (resp. $T_{a,b}$) est représentative des modes contribuant au processus réactionnel dans le sens direct (resp. dans le sens inverse).

[†]D'autres modélisations existent, voir par exemple Chernyi *et al.* [44]

2.2.1.2 Modèle chimique

La construction d'un modèle chimique consiste à déterminer :

- les espèces qui composent le mélange et qui, même si elles ne sont pas présentes initialement dans le milieu, pourront apparaître au cours des processus chimiques
- les réactions mises en jeu
- les constantes de vitesse associées à chaque réaction (modèle de cinétique chimique)

Atmosphère terrestre

Deux modèles chimiques sont utilisés dans le cadre des rentrées dans l'atmosphère terrestre. Le plus ancien est le modèle de Dunn et Kang [62]. Le second est issu des nombreux travaux de Park [146, 148, 149, 153, 150], réactualisés régulièrement en fonction des vérifications expérimentales. Pour les deux modèles, le mélange se compose des onze espèces N_2, O_2, NO, N, O, N_2^+, O_2^+, NO^+, N^+, O^+ et e^-. Le modèle de Dunn et Kang [62] comporte trente-deux réactions, celui de Park quarante-neuf. Les taux de réaction associés à ces modèles sont exprimés sous la forme de la loi d'Arrhénius. Les constantes et les températures d'activation des réactions sont données en annexe C (tableaux C.3 et C.4).

Pour les réactions d'ionisation par impact d'électrons, on utilise également les taux de réactions de Wilson [210]. Dans ce cas, le taux d'excitation d'un atome se déduit de la formule :

$$\frac{dn^*}{dt} = \left(\frac{8kT}{\pi m_e}\right)^{1/2} \frac{\sigma_0 B}{\Delta E^2} \left(1 + \frac{2kT_e}{\Delta E}\right) e^{-\Delta E/kT} n_e n_L \tag{2.18}$$

où la constante σ_0 vaut $6,5 \cdot 10^{-14} cm^2.(eV)^2 = 1,6836 \cdot 10^{-55} m^2.J^2$ et la constante B est de l'ordre de $0,18$. Les termes n^*, n_e et n_L désignent les densités de l'atome excité, des électrons et de l'atome au niveau énergétique bas, respectivement. Le terme ΔE désigne l'écart d'énergie correspondant à la transition entre le niveau excité et le niveau bas. Le taux net d'excitation est alors la somme des contributions depuis chacun de ces niveaux.

En ne considérant que la transition de l'état fondamental A vers l'état ionisé A^+, on obtient :

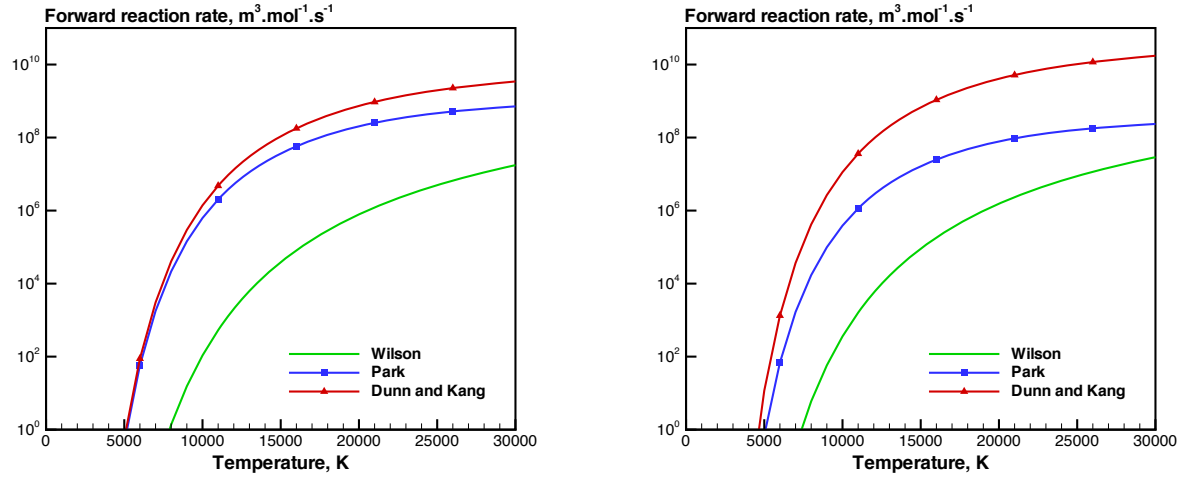
$$k_f = \frac{1}{n_e n_A} \frac{dn_{A^+}}{dt} = \left(\frac{8kT}{\pi m_e}\right)^{1/2} \frac{\sigma_0 B}{k^2 \theta_i^2} \left(1 + \frac{2T_e}{\theta_i}\right) e^{-\theta_i/T} N_{avog} \tag{2.19}$$

En supposant que la température des électrons reste très petite devant la température d'ionisation ($T_e << \theta_i$), on a finalement :

$$N + e^- \rightarrow N^+ + e^- \quad : \quad k_f = 2,085 \cdot 10^{07} \times T^{0.5} \times e^{-168917/T} \tag{2.20a}$$

$$O + e^- \rightarrow O^+ + e^- \quad : \quad k_f = 2,375 \cdot 10^{07} \times T^{0.5} \times e^{-158270/T} \tag{2.20b}$$

Sur la figure 2.1, on compare les taux de réaction donnés par les différents modèles de cinétique chimique pour les deux réactions d'ionisation par impact d'électron. Les taux de Wilson [210] sont plus faibles que ceux de Park [150] et de Dunn et Kang [62], de un à trois ordres de grandeur selon la température. Pour l'azote, les taux de Park [150] et de Dunn et Kang [62] sont proches. En revanche, ils diffèrent dans le cas de l'oxygène, les taux de Park [150] étant plus faibles de un à deux ordres de grandeur losque la température augmente.



(a) $N + e^- \rightarrow N^+ + e^-$ (b) $O + e^- \rightarrow O^+ + e^-$

Fig. 2.1: Taux de réaction des réactions d'ionisation par impact d'électron

Atmosphère martienne

Le modèle de cinétique chimique utilisé pour l'étude des rentrées en atmosphère martienne a été défini dans le cadre d'un groupe de travail piloté par l'ESA et le CNES [38]. Ce modèle est basé sur le modèle de Park [152]. Le mélange gazeux contient les cinq espèces chimiques CO_2, CO, O_2, C et O. Le modèle se compose de dix-huit réactions. Les constantes de réactions s'expriment sous la forme de la loi d'Arrhénius. Les constantes associées à chaque réaction sont données en annexe C (tableau C.5). Le modèle est défini à l'équilibre thermique. Par conséquent, la température d'activation des réactions n'est pas précisée dans le tableau C.5.

2.2.1.3 Couplage Vibration-Dissociation CVD

La vibration des molécules influe sur leur dissociation. En effet, plus une molécule est excitée vibrationnellement, plus elle se dissocie facilement. Le modèle de Park [148] permet de tenir compte de cette influence. Selon ce modèle, la température d'activation des réactions de dissociation n'est plus égale à la température T, comme indiqué dans les tableaux C.3 et C.4 ; elle est prise égale à la moyenne géométrique de la température de translation et de la température de vibration de l'espèce considérée :

$$T_{a,f} = \sqrt{T T_{v,m}} \tag{2.21}$$

On applique le modèle de Park [148] aux réactions de dissociation des espèces N_2 et O_2 pour lesquelles la particule collisionnelle M est neutre :

$$N_2 + M \rightleftharpoons N + N + M, \qquad M = N_2, O_2, NO, N, O \tag{2.22}$$

$$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M, \qquad M = N_2, O_2, NO, N, O \tag{2.23}$$

2.2.1.4 Catalycité de la paroi

Les conditions de catalycité de paroi déterminent le comportement chimique du gaz à proximité de la paroi d'un véhicule de rentrée. Ainsi, une paroi non catalytique n'influe pas sur la composition chimique du gaz : le taux de production ou de destruction des espèces chimiques

est nul à la surface. A l'inverse, une paroi est dite catalytique si le gaz et la surface interagissent d'un point de vue chimique. La surface joue le rôle de catalyseur, favorisant la recombinaison moléculaire. Parmi les différentes conditions de catalycité, on a utilisé seulement la condition pseudo-catalytique, pour laquelle la composition chimique à la paroi est supposée égale à celle à l'infini amont.

2.2.2 Termes de transport

Différentes propriétés de transport apparaissent dans les équations de Navier-Stokes : la viscosité dynamique (transfert de la quantité de mouvement), la conductivité thermique (transfert de chaleur) et la diffusivité des espèces (transfert de masse et de chaleur). La théorie cinétique des gaz permet d'exprimer ces grandeurs à partir des équations de Boltzmann (procédure de Chapman-Enskog [201]).

2.2.2.1 Viscosité dynamique

L'expression de la viscosité du mélange gazeux repose sur le modèle d'Armaly et Sutton [12] :

$$\mu = \sum_s \frac{\mu_s}{1+\sum_{r\neq s}\frac{x_r}{x_s}\Phi_{sr}\left(\frac{M_s}{M_s+M_r}\right)\left(\frac{5}{3A^*_{sr}}+\frac{M_r}{M_s}\right)} \tag{2.24a}$$

$$\text{avec } \Phi_{sr} = \left(F_{sr}+\sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}}\left(\frac{M_r}{M_s}\right)^{1/4}B_{sr}\right)^2 \Big/ \sqrt{8\left(1+\frac{M_s}{M_r}\right)} \tag{2.24b}$$

Le terme x_s désigne la fraction molaire de l'espèce s :

$$x_s = \frac{\rho_s/M_s}{\sum_r \rho_r/M_r} \tag{2.25}$$

Les valeurs des constantes A^*_{sr}, B_{sr} et F_{sr} sont données en annexe C (tableau C.6).

Le terme μ_s désigne la viscosité d'un gaz pur. Son expression repose sur la relation d'interpolation de Blöttner *et al.* [20] :

$$\mu_s = 0,1\,\exp\left[\left(A^\mu_s lnT + B^\mu_s\right)lnT + C^\mu_s\right] \qquad [kg.m^{-1}.s^{-1}] \tag{2.26}$$

Les coefficients A^μ_s, B^μ_s et C^μ_s dépendent de l'espèce considérée.

Pour les espèces rencontrées dans le cadre des rentrées terrestres, on utilise les valeurs proposées par Gupta *et al.* [79] (tableau C.7 de l'annexe C). Elles 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 :

$$p_{em} = 0,0975\,(T_e/10^3)^4 \qquad [atm] \tag{2.27}$$

Pour toute valeur de p_e inférieure à p_{em}, la correction suivante doit être apportée (p_e exprimée en atmosphères) :

$$\frac{\mu_s(p_e)}{\mu_s(p_{em})} = \frac{1}{ln\Lambda(p_e)} = \frac{2}{ln\left[2.09\cdot10^{-2}\left(\frac{T_e}{1000p_e^{1/4}}\right)^4+1.52\left(\frac{T_e}{1000p_e^{1/4}}\right)^{8/3}\right]} \tag{2.28}$$

En pratique, on applique toujours la correction car la valeur limite de pression p_{em} est largement supérieure aux valeurs rencontrées dans les applications aérospatiales [79]. En outre, on rappelle que la viscosité des électrons est négligée.

Pour les espèces carbonées, William [209] a construit une loi de viscosité sous la forme du modèle de Blöttner à partir de la théorie cinétique des gaz (avec le modèle d'intégrale de collision de Neufeld *et al.* [138]). Le domaine de validité en terme de température s'étend de $100K$ à $20000K$. Les coefficients sont donnés dans le tableau C.7 de l'annexe C.

2.2.2.2 Conductivité thermique

On utilise deux modèles pour calculer les termes de conductivité thermique η_{eq} et $\eta_{v,m}$ des espèces lourdes - on rappelle que la conductivité thermique des électrons est négligée. Le premier modèle repose sur l'hypothèse d'un nombre de Prandtl constant dans l'écoulement. Le second modèle s'affranchit de cette hypothèse. On rappelle que la conductivité thermique des électrons est négligée.

Dans le premier modèle, la définition de la conductivité thermique est divisée en deux parties. Pour l'ensemble des modes d'énergie à l'équilibre thermique, on définit une conductivité thermique globale à l'aide du nombre de Prandtl Pr :

$$\eta_{eq} = \mu\, Cp_{eq}/Pr \tag{2.29}$$

Le terme Cp_{eq} désigne la capacité calorifique à pression constante pour les modes d'énergie correspondants (translation, rotation et vibration des espèces moléculaires supposées à l'équilibre thermique vibrationnel) :

$$Cp_{eq} = Cv_{eq} + \frac{R}{M} \tag{2.30a}$$

$$Cv_{eq} = \sum_s y_s Cv_{t,s} + \sum_m y_m Cv_{r,m} + \sum_{m,T_{v,m}=T} y_m Cv_{v,m} \tag{2.30b}$$

Le terme M désigne la masse molaire du mélange, définie par :

$$M = \sum_s x_s M_s \tag{2.31}$$

Les termes $Cv_{mode,s}$ désignent les capacités calorifiques à volume constant pour les différents modes d'énergie de l'espèce s. Ils s'écrivent :

$$Cv_{t,s} = \frac{3}{2}\frac{R}{M_s} \tag{2.32a}$$

$$Cv_{r,m} = \frac{R}{M_m} \tag{2.32b}$$

$$Cv_{v,m} = \frac{R}{M_m}\left(\frac{\theta_{v,m}}{T}\right)^2 e^{\frac{\theta_{v,m}}{T}}\left(e^{\frac{\theta_{v,m}}{T}}-1\right)^{-2} \tag{2.32c}$$

On précise que pour le mode vibrationnel, l'expression repose sur le modèle de l'oscillateur harmonique à nombre infini de niveaux de vibration [209].

L'expression (2.29) est théoriquement valable à l'équilibre thermique. Pour l'air, la valeur du nombre de Prandtl varie dans la littérature entre $0,7$ et $0,75$; on retient la valeur de $0,72$. Pour l'atmosphère martienne, la valeur retenue est de $0,66$ [38].

Pour les espèces moléculaires m en déséquilibre thermique vibrationnel, le modèle de Monchick *et al.* [136] donne les conductivités de mélange pour le mode vibrationnel selon la formule :

$$\eta_{v,m} = \frac{\frac{6}{5} A^*_{mm} \mu_m C v_{v,m}}{\sum_{r \neq e} \frac{x_r}{x_m} \Phi_{mr}} \tag{2.33}$$

où le terme $Cv_{v,m}$ désigne la capacité calorifique à volume constant du mode de vibration de l'espèce moléculaire m.

Dans le second modèle, on évalue la conductivité thermique associée à chaque mode d'énergie. La conductivité thermique de translation d'une espèce neutre dans le mélange gazeux est donnée par la formule de Wilke [208] :

$$\eta_{t,s} = \frac{\frac{5}{2} \mu_s C v_{t,s}}{1 + \sum_{r \neq s} \frac{x_r}{x_s} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} \right)^2 \Big/ \sqrt{8 \left(1 + \frac{M_s}{M_r} \right)}} \tag{2.34}$$

La conductivité thermique de rotation d'une espèce moléculaire dans le mélange gazeux s'écrit selon le modèle de Monchick *et al.* [136] :

$$\eta_{r,m} = \frac{\mu_m C v_{r,m}}{\sum_{r \neq e} \frac{x_r}{x_m} \Phi_{mr}} \tag{2.35}$$

La conductivité thermique de vibration d'une espèce moléculaire dans le mélange gazeux s'écrit selon l'expression (2.33) proposée par Monchick *et al.* [136].

Le terme de conductivité thermique η_{eq} s'écrit alors :

$$\eta_{eq} = \sum_{s \neq e} \eta_{t,s} + \sum_{m} \eta_{r,m} + \sum_{m,\, T_{v,m} = T} \eta_{v,m} \tag{2.36}$$

2.2.2.3 Diffusion

On utilise deux modèles pour calculer le coefficient de diffusion D_s. Le premier repose sur l'hypothèse d'un nombre de Lewis constant. Le second s'affranchit de cette hypothèse. On rappelle que la diffusion des électrons est négligée.

Dans le premier modèle, le coefficient de diffusion est supposé identique pour toutes les espèces neutres. Son expression repose sur le nombre de Lewis Le :

$$(D_s)_{s=n} = D_D = \eta_{eq} Le / (\rho C p_{eq}) \,, \qquad \forall n \text{ espèce neutre} \tag{2.37}$$

Le nombre de Lewis est un nombre sans dimension caractérisant la diffusion massique (rapport du transport d'énergie dû à la diffusion et de la conduction thermique). Ses variations selon la température sont assez mal connues [209] et une valeur comprise entre 1,0 et 1,4 est en général utilisée pour l'air à l'équilibre. Dans notre étude, le nombre de Lewis est fixé à $1,2$ pour les applications terrestres et à $1,0$ pour les applications martiennes [38].

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 [116] :

$$(D_s)_{s=ion} = 2D_D \tag{2.38}$$

Dans le second modèle, le coefficient de diffusion suit la loi de Gubernatis [77] :

$$(D_s)_{s=n} = \frac{1 - x_s}{\sum_{r\neq s, r\neq e} \frac{x_r}{D_{sr}}}, \qquad \forall n \text{ espèce neutre} \tag{2.39}$$

Les coefficients de diffusion binaire D_{sr} suivent la loi d'interpolation de Gupta *et al.* [79] :

$$D_{sr} = \frac{e^{C_{D_{sr}}} T^{(A_{D_{sr}} \ln T + B_{D_{sr}})}}{p} \tag{2.40}$$

Les coefficients $A_{D_{sr}}$, $B_{D_{sr}}$ et $C_{D_{sr}}$ sont donnés en annexe C (tableau C.8). Le domaine de validité de la loi d'interpolation de Gupta *et al.* [79] s'étend jusqu'à la température de $30000K$.

2.2.2.4 Expression du flux convectif pariétal

Le flux thermique convectif est la résultante des flux de conduction, de vibration et de diffusion d'énergie totale. Dans le cadre de nos hypothèses, le flux convectif à une paroi de normale unitaire $\mathbf{n}$ s'écrit :

$$q^C = -\mathbf{q}^C \cdot \mathbf{n} \qquad \text{avec : } q_j^C = -\eta_{eq}\partial_{x_j} T - \sum_m \eta_{v,m}\partial_{x_j} T_{v,m} - \rho \sum_s h_s D_s \partial_{x_j} y_s \tag{2.41}$$

2.2.3 Relaxation

Lors des collisions, les particules échangent une partie de leur énergie. On parle de collision élastique lorsque le transfert d'énergie concerne le mode de translation. On parle de collision inélastique quand le transfert met en jeu un mode d'énergie interne d'une particule.

Dans le cadre de nos hypothèses, les échanges V-T (vibration-translation des espèces lourdes), V-V (vibration-vibration), e-T (électrons-translation des espèces lourdes), e-R (électrons-rotation) et e-V (électrons-vibration) sont pris en compte.

2.2.3.1 Relaxation vibrationnelle

Echanges V-T Le terme d'échange V-T s'écrit sous la forme de Landau et Teller [111] :

$$\rho_m \frac{e_{v,m}(T) - e_{v,m}(T_{v,m})}{\tau_m^{v-t}} \tag{2.42}$$

Le temps caractéristique τ_m^{v-t} se définit à partir des temps caractéristiques relatifs aux collisions entre l'espèce moléculaire m et les autres espèces lourdes s présentes dans le mélange :

$$\frac{1}{\tau_m^{v-t}} = \sum_s \frac{x_s}{\tau_{m,s}^{v-t}} \tag{2.43}$$

Ces derniers s'expriment à l'aide du modèle de Park [150] basé sur la formulation de Millikan et White [132] qui les relie à la pression du gaz p (en atmosphères) et à la température T selon la relation :

$$p\tau_{m,s}^{v-t} = \exp\left(a_{ms}^{MWP}(T^{-1/3} - b_{ms}^{MWP}) - 18.42\right) \qquad [atm.s] \tag{2.44}$$

Les coefficients a_{ms}^{MWP} et b_{ms}^{MWP} sont donnés en annexe C (tableau C.9) pour les espèces neutres. Pour les espèces ionisées, l'efficacité des échanges vibrationnels faisant intervenir des ions augmente par rapport au mécanisme analogue entre espèces neutres [44]. Cette augmentation est due aux forces attractives qui régissent les interactions ions - particules neutres. Cependant, à haute température, la contribution des forces attractives diminue [44] ; dans ce cas, on peut utiliser les formules dérivées des échanges entre particules neutres. Nous nous plaçons dans le cadre de cette hypothèse. On a alors la relation :

$$\tau_{m,n^+}^{v-t} = \tau_{m,n}^{v-t} \tag{2.45}$$

où l'indice m désigne une espèce moléculaire en déséquilibre thermique vibrationnel, n une espèce neutre et n^+ l'espèce ionisée associée à n.

Echanges V-V Le terme d'échange V-V s'écrit sous la forme [196, 175] :

$$S_m^{v-v} = \sum_{m' \neq m} S_{m,m'}^{v-v} \tag{2.46a}$$

$$S_{m,m'}^{v-v} = \frac{1}{\tau_{m,m'}^{v-v}} \frac{M}{\rho R\, \theta_{v,m'}} \left[\rho_{m'} e_{v,m'} \left(\rho_m e_{v,m} + \frac{\rho_m R\theta_{v,m}}{M_m}\right) e^{\frac{\theta_{v,m'} - \theta_{v,m}}{T}} - \rho_m e_{v,m} \left(\rho_{m'} e_{v,m'} + \frac{\rho_{m'} R\theta_{v,m'}}{M_{m'}}\right)\right] \tag{2.46b}$$

$$S_{m',m}^{v-v} = -\frac{\theta_{v,m'}}{\theta_{v,m}} S_{m,m'}^{v-v} \tag{2.46c}$$

Le terme $\tau_{m,m'}^{v-v}$ désigne le temps de relaxation V-V pour une collision entre les espèces moléculaires m et m'. Dans le modèle de Losev *et al.* [123], ce temps s'exprime sous la forme :

$$p\tau_{m,m'}^{v-v} = \exp\left(a_{m,m'}^L + b_{m,m'}^L T^{-1/3} + c_{m,m'}^L T^{-2/3} + d_{m,m'}^L T^{1/3}\right) \qquad [atm.s] \tag{2.47}$$

Les valeurs des coefficients $a_{m,m'}^L$, $b_{m,m'}^L$, $c_{m,m'}^L$ et $d_{m,m'}^L$ sont données en annexe C (tableau C.10). Le modèle est valable sur la plage de température allant de $300K$ à $40000K$. William [209] a vérifié la validité du modèle de Losev [123] sur la plage de température $300K - 3000K$ en le comparant au modèle de Shatalov [168], basé sur des mesures expérimentales du taux de transition entre deux espèces moléculaires.

2.2.3.2 Relaxation du gaz d'électrons libres

Echanges e-T Le terme d'échange e-T s'écrit [11, 182] :

$$S_{e-t} = \sum_{s \neq e} S_s^{e-t} = 3kn_e M_e (T - T_e) \sum_{s \neq e} \frac{\nu_{es}^*}{M_s} \tag{2.48}$$

Le terme ν_{es}^* désigne la fréquence de collision effective des électrons avec l'espèce s.

Pour les collisions avec des espèces neutres n, la fréquence est donnée par la relation [11, 182] :

$$\nu_{en}^{*} = n_n \sigma_{en} \sqrt{\frac{8kT_e}{\pi m_e}} \tag{2.49}$$

Le terme σ_{en} représente la section efficace de collision entre un électron et une particule neutre. Il s'obtient à l'aide d'une loi polynomiale en fonction de la température du gaz d'électrons [129, 209] :

$$\sigma_{en} = a_{en} + b_{en}T_e + c_{en}T_e^2 + d_{en}T_e^3 + e_{en}T_e^4 \tag{2.50}$$

Les constantes introduites sont données en annexe C (tableau C.11).

Pour les collisions avec des espèces ionisées I, l'expression de la fréquence de collision est modifiée à cause de l'existence du champ électrique [25] :

$$\nu_{eI}^{*} = \frac{64}{27}\sqrt{\frac{\pi}{m_e}}\frac{n_I q_e^4}{(2kT_e)^{3/2}}\, ln\left[1 + \frac{9k^3T_e^3}{4\pi n_e q_e^6}\right] \tag{2.51}$$

Echanges e-R Le terme d'échange e-R s'écrit comme la somme des termes d'échanges relatifs à chaque espèce moléculaire :

$$S_{e-r} = \sum_m S_m^{e-r} \tag{2.52}$$

L'expression du terme S_m^{e-r} est différente selon que l'espèce m est polarisée ou non [44]. Pour les espèces moléculaires non polarisées N_2 et O_2, on utilise l'expression proposée par Koura [109] :

$$S_{N_2}^{e-r} = 4,98 \cdot 10^{-39} n_e n_{N_2} \frac{T - T_e}{\sqrt{T_e}} \qquad [J.m^{-3}.s^{-1}] \tag{2.53a}$$

$$S_{O_2}^{e-r} = 1,08 \cdot 10^{-38} n_e n_{O_2} \frac{T - T_e}{\sqrt{T_e}} \qquad [J.m^{-3}.s^{-1}] \tag{2.53b}$$

Pour l'espèce polarisée NO, on utilise la relation proposée par Matsuzaki [128] :

$$S_{NO}^{e-r} = 6,14 \cdot 10^{-36} n_e n_{NO} \left(log\frac{T_e}{\theta_{r,NO}} - \frac{1}{2}log\frac{T}{\theta_{r,NO}}\right)\frac{T - T_e}{T_e^{3/2}} \qquad [J.m^{-3}.s^{-1}] \tag{2.54}$$

où la température caractéristique de rotation $\theta_{r,NO}$ vaut $2,44K$.

Les échanges e-R pour les autres espèces moléculaires sont négligés.

Echanges e-V Le terme d'échange e-V s'écrit comme la somme des termes d'échange relatifs à chaque espèce moléculaire :

$$S_{e-v} = \sum_m S_m^{e-v} \tag{2.55}$$

Le terme d'échange S_m^{e-v} s'écrit sous la forme de Landau-Teller [111] :

$$S_m^{e-v} = \rho_m \frac{e_{v,m}(T_e) - e_{v,m}(T_{v,m})}{\tau_m^{e-v}} \tag{2.56}$$

où τ_m^{e-v} désigne le temps de relaxation de la molécule pour un échange e-V. Pour l'espèce moléculaire N_2, on utilise l'expression proposée par Bourdon [22] :

$$log_{10}\left(p_e \tau_{\mathtt{N_2}}^{e-v}\right) = 5,019\, log_{10}^2 T_e - 38,625\, log_{10} T_e + 64,219, \quad 3000K < T_e \leq 7000K \tag{2.57}$$

$$log_{10}\left(p_e \tau_{\mathtt{N_2}}^{e-v}\right) = 2,448\, log_{10}^2 T_e - 18,704\, log_{10} T_e + 25,635, \quad 7000K < T_e < 20000K \tag{2.58}$$

Les échanges e-V pour les espèces O_2 et NO sont bien moins efficaces (temps de relaxation plus longs). En première estimation, Park et Lee [153] proposent les relations suivantes :

$$\tau^{e-v}_{\mathtt{O_2}}(T_e) = 300 \times \tau^{e-v}_{\mathtt{N_2}}(1,492T_e) \tag{2.59}$$
$$\tau^{e-v}_{\mathtt{NO}}(T_e) = 300 \times \tau^{e-v}_{\mathtt{N_2}}(1,239T_e) \tag{2.60}$$

Les échanges e-V pour les autres espèces moléculaires sont négligés.

2.2.4 Les deux modélisations physico-chimiques utilisées

Dans notre étude, on utilise les deux modélisations physico-chimiques décrites dans le tableau 2.1.

Dans le modèle simplifié, les termes de conduction thermique et de diffusion reposent sur l'hypothèse de nombres de Prandtl et de Lewis constants. Seuls les termes d'échanges V-T et e-T sont pris en compte. La température d'activation des réactions de dissociation est supposée égale à la température T.

Dans le modèle complet, on s'affranchit de l'hypothèse de nombres de Prandtl et de Lewis constants. L'ensemble des termes d'échanges d'énergie sont pris en compte. La température d'activation des réactions de dissociation suit le modèle de Park [148] selon lequel on a :

$$T_{a,f} = \sqrt{TT_{v,m}} \tag{2.61}$$

On ajoute que si le milieu n'est pas ionisé, les termes e-T, e-R et e-V n'apparaissent bien évidemment pas dans la modélisation. Il en va de même des termes CVD, V-T et V-V si l'on suppose que le mode de vibration de toutes les molécules est à l'équilibre thermique avec le mode de translation. Enfin, lorsqu'on traite des écoulements à l'équilibre thermique, aucun terme d'échange énergétique n'apparait dans la modélisation.

	Conduction thermique	Diffusion	CVD	V-T	V-V
Modèle simplifié	Pr=constant	Le=constant	0.0	Millikan-White-Park	0.0
Modèle complet	Wilke, Monchick *et al.*	Gubernatis	Park	Millikan-White-Park	Losev *et al.*

	e-T	e-R	e-V
Modèle simplifié	Appleton-Bray, Matsuzaki, Candler	0.0	0.0
Modèle complet	Appleton-Bray, Matsuzaki, Candler	Koura, Matsuzaki	Bourdon, Park-Lee

Tab. 2.1: Modélisations physico-chimiques

2.3 Méthode générale de résolution numérique

2.3.1 Traitement des flux convectifs non-visqueux

Le système du premier ordre sous-jacent au système convecto-diffusif complet (2.2a)-(2.2e) s'écrit :

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho_s + \partial_x(\rho_s u) + \partial_y(\rho_s v) &= 0 && \text{(2.62a)}\\
\partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + p + p_e) + \partial_y(\rho uv) &= 0 && \text{(2.62b)}\\
\partial_t \rho v + \partial_x(\rho uv) + \partial_y(\rho v^2 + p + p_e) &= 0 && \text{(2.62c)}\\
\partial_t \rho_m e_{v,m} + \partial_x(\rho_m e_{v,m} u) + \partial_y(\rho_m e_{v,m} v) &= 0 && \text{(2.62d)}\\
\partial_t \rho s_e + \partial_x(\rho s_e u) + \partial_y(\rho s_e v) &= 0 && \text{(2.62e)}\\
\partial_t \rho E + \partial_x((\rho E + p + p_e)u) + \partial_y((\rho E + p + p_e)v) &= 0 && \text{(2.62f)}
\end{aligned}$$

ou, sous forme condensée :

$$\partial_t \mathbf{u} + \nabla.\mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0 \tag{2.63}$$

L'inconnue $\mathbf{u}\big((x,y),t\big)$ est une fonction de $\mathbf{R}^2 \times \mathbf{R}^+ \to \Omega$. Elle a pour expression :

$$\mathbf{u} = (\rho_s, \rho u, \rho v, \rho_m e_{v,m}, \rho s_e, \rho E) \tag{2.64}$$

L'espace des phases $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, où N est le nombre de variables conservatives, se définit comme suit :

$$\begin{aligned}
\Omega = \{\ \mathbf{u} \ &= \ {}^{\mathrm{T}}(\{\rho_s\}_s, \rho u, \rho v, \{\rho_m e_{v,m}\}_m, \rho s_e, \rho E),\\
&\quad \rho_s > 0, u \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}, E > 0, s_e > 0, e_{v,m} > 0\}
\end{aligned} \tag{2.65}$$

La proposition suivante résume les propriétés importantes du système (2.63) :

Proposition 1 *Le système du premier ordre (2.63) est hyperbolique sur Ω et admet trois valeurs propres réelles distinctes :*

$$u - c < u < u + c$$

où la vitesse du son c est définie par :

$$c^2 = \frac{\gamma_e p_e + \gamma p}{\rho} \quad avec \quad \gamma = 1 + \frac{ZR}{\displaystyle\sum_{s \neq e} y_s \left(Cv_{tr,s} + \frac{\mathrm{d}e_{i,s}(T)}{\mathrm{d}T} \right)} \tag{2.66}$$

La valeur propre u a pour ordre de multiplicité $(N-2)$. De plus, les valeurs propres $u-c$ et $u+c$ sont associées à des champs intrinsèquement non linéaires, tandis que la valeur propre u est associé à des champs linéairement dégénérés.

Dans l'équation (2.66), $Z = \sum y_s/M_s$ représente l'inverse de la masse molaire du mélange et le terme $e_{i,s}(T)$ représente pour la particule s l'énergie des modes internes en équilibre à la température T. Le terme $Cv_{tr,s}$ désigne la capacité calorifique à volume constant de l'espèce s pour les modes de translation-rotation.

Les solutions faibles du système (2.63) sont naturellement sélectionnées par le principe d'entropie (second principe de la thermodynamique).

2.3.1.1 Méthode bidimensionnelle des volumes finis

Dans l'approche volumes finis, l'approximation numérique de l'inconnue $\mathbf{u}$ s'obtient en résolvant l'équation suivante, pour une cellule K de frontière ∂K et de volume $|K|$:

$$\partial_t \mathbf{u}_K + \frac{1}{|K|} \sum_{e \in \partial K_e} F(\mathbf{u}_K, \mathbf{u}_{K_e}; \mathbf{n}_{K_e})|e| = 0 \tag{2.67}$$

Le terme $\mathbf{u}_K$ représente la valeur constante de la solution approchée dans la cellule K. Le terme e désigne l'interface entre la cellule K et la cellule adjacente K_e, de surface $|e|$. Le vecteur $\mathbf{n}_{K_e}$ est la normale unitaire à la facette e sortant de l'élement K. Les équations étant invariantes par rotation, on résoud le système quasi-1D associé aligné sur la normale à la facette. Le flux bidimensionnel numérique F se déduit par conséquent de l'évaluation d'un flux numérique consistant avec le problème monodimensionnel de Riemann pour lequel la fonction de flux s'écrit :

$$\mathbf{f} = (\rho_s v_1, \rho v_1^2 + p + p_e, \rho v_1 v_2, \rho_m e_{v,m} v_1, \rho s_e v_1, (\rho E + p + p_e) v_1) \tag{2.68}$$

Les vitesses v_1 et v_2 sont les vitesses normale et tangentielle à la facette e. Dans le problème quasi-1D, la vitesse tangentielle est traitée comme une grandeur transportée.
Enfin, l'opérateur rotationnel $T_{K,e}$ permet d'obtenir le flux numérique bidimensionnel à partir du flux monodimensionnel :

$$F(\mathbf{u}_K, \mathbf{u}_{K_e}; \mathbf{n}_{K_e}) = T_{K,e}^{-1} F(T_{K,e}\mathbf{u}_K, T_{K,e}\mathbf{u}_{K_e}; \mathbf{e}_x) \tag{2.69}$$

2.3.1.2 Schéma numérique

Le flux numérique monodimensionnel est construit à l'aide d'un schéma numérique de type Roe ou de relaxation. Ces deux schémas ont nécessité des adaptations et développements effectués dans le cadre de la thèse. A ce titre, ils sont détaillés respectivement dans les chapitres 5 et 7.

D'autres schémas numériques ont été utilisés dans cette étude, soit comme schéma de référence (schéma de Godunov pour la validation du schéma de relaxation, voir chapitre 7), soit parce qu'ils sont le fruit de développements antérieurs et qu'ils s'avèrent efficaces pour certaines des configurations calculées (schéma HUS utilisé pour le calcul de rentrées martiennes en atmosphère non ionisée, voir chapitre 4). On explique brièvement ci-dessous le principe de ces deux derniers schémas. Le lecteur pourra se reporter aux références citées pour de plus amples détails.

Schéma de Godunov Le schéma de Godunov [68, 74] calcule de manière exacte la solution unique du problème de Riemann monodimensionnel. Le problème de Riemann régit l'évolution d'un système dont on prescrit les conditions initiales $\mathbf{u}_L$ et $\mathbf{u}_R$ à gauche et à droite d'une discontinuité. La structure de la solution exacte est connue. Dans le cadre des équations d'Euler, les informations se propagent selon trois ondes, associées aux valeurs propres du système : $u-c$, u et $u+c$. Ces ondes séparent quatre états uniformes du gaz notés $\mathbf{u}_L$, $\mathbf{u}_L^*$, $\mathbf{u}_R^*$ et $\mathbf{u}_R$.
La figure 2.2 illustre ce propos en montrant un exemple de diagramme d'évolution de la position, dans le temps t et l'espace x, des trois ondes suivantes : un faisceau de détente à gauche de la position initiale de la discontinuité ($x = 0$) - où la pression est initialement la plus élevée - et à droite, une discontinuité de contact et une onde de choc.
Le schéma de Godunov utilise un processus itératif relativement coûteux en temps calcul. Par conséquent, on préfère aux solveurs exacts des solveurs approchés plus économiques. Cependant,

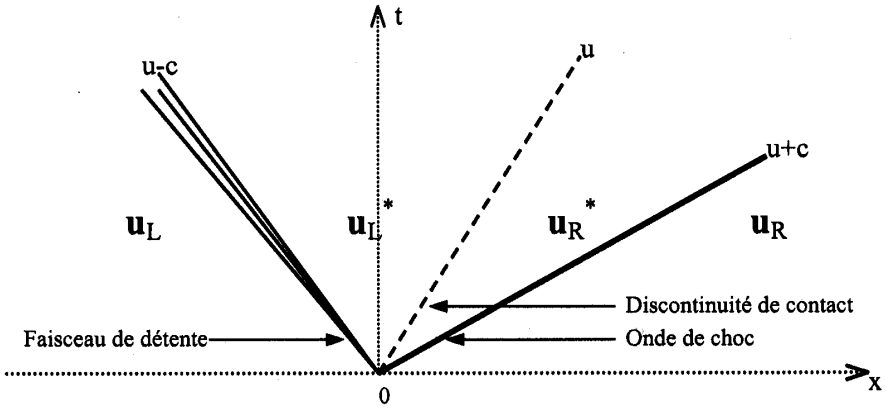


Fig. 2.2: Structure de la solution du problème de Riemann monodimensionnel

le schéma de Godunov est utilisé comme solveur de référence puisqu'il produit une solution basée sur une représentation physique précise.

Schéma HUS Le concept de schéma de décentrement hybride HUS (Hybrid Upwind Splitting) a été introduit par Coquel et Liou [48, 49]. Il s'agit de schémas décentrés dont l'originalité est de combiner les approches FVS et FDS (Flux Vector et Flux Difference Splitting) en gardant les aspects intéressants de l'un et de l'autre. D'un côté, les schémas FVS sont robustes pour la capture des chocs (ondes intrinsèquement non-linéaires). De l'autre, les schémas FDS permettent une description précise des couches limites (ondes linéairement dégénérées). La méthode HUS permet en outre de s'affranchir de la surévaluation des effets diffusifs dans les couches limites par les schémas FVS, et de l'instabilité des schémas FDS dans la capture des chocs. Le schéma HUS utilisé dans cette étude est une hybridation de l'approche d'Osher avec la méthode de van Leer [48].

2.3.2 Extension au second ordre en espace

Les schémas numériques sont en général donnés à l'ordre 1 en espace. Différentes méthodes premettent d'atteindre des ordres de précision supérieurs en utilisant le procédé de reconstruction de la solution. La reconstruction consiste à estimer, avec un certain degré de précision, les états gauche et droit aux interfaces des cellules. Le solveur de flux utilise ces données pour calculer les flux de masses, quantités de mouvement et énergies aux interfaces. Les bilans de flux permettent alors de calculer le nouvel état aux centres des cellules.

La reconstruction de la solution met en jeu deux techniques : l'interpolation et la limitation.

2.3.2.1 Interpolation

L'interpolation correspond au calcul des variables de l'écoulement en certains points du champ, basé sur la connaissance de ces variables sur une grille de points discrets environnants. L'interpolation la plus simple correspond au schéma du premier ordre suggéré par Godunov [68] pour lequel un état constant est défini dans chaque cellule. Les états gauche et droit à l'interface sont les états aux centres des cellules gauche et droite, respectivement. Simple et peu coûteuse numériquement, l'approche au premier ordre est cependant peu précise.

L'approche MUSCL (Monotonous Upstream Scheme for Conservation Laws) conduit à une précision d'ordre deux. Cette technique est aujourd'hui largement répandue pour la résolution des écoulements compressibles. Les états gauche (L) et droit (R) à l'interface entre deux cellules i et $i+1$ se déduisent des états aux centres des cellules voisines $(\mathbf{u}_j)_{j=i-1,i,i+1}$ par les expressions :

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_i + \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\Delta_i^- + (1+\kappa)\Delta_i^+\right] \tag{2.70a}$$

$$\mathbf{u}_R = \mathbf{u}_{i+1} - \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\Delta_{i+1}^+ + (1+\kappa)\Delta_{i+1}^-\right] \tag{2.70b}$$

avec les notations :

$$\Delta_i^- = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_{i-1} \tag{2.71a}$$

$$\Delta_i^+ = \mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i \tag{2.71b}$$

Le paramètre κ est pris égal à $1/2$ afin d'atteindre une précision au second ordre.

2.3.2.2 Limiteurs

Le limiteur permet de refuser des valeurs non admissibles qui seraient apparues lors du processus d'interpolation. Initialement, le code CELHyo2D utilise les limiteurs minMod et van Albada. Nous avons implémenté le limiteur de van Albada modifié par Johnston [99] pour traiter des maillages géométriques dont les écarts de taille entre deux cellules adjacentes sont importants. Ce cas peut se rencontrer lorsque le maillage est raffiné dans le choc, par exemple.

Limiteur minMod

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_i + \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)m(\Delta_i^-, \Delta_i^+) + (1+\kappa)m(\Delta_i^-, \Delta_i^+)\right] \tag{2.72a}$$

$$\mathbf{u}_R = \mathbf{u}_{i+1} - \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)m(\Delta_{i+1}^-, \Delta_{i+1}^+) + (1+\kappa)m(\Delta_{i+1}^-, \Delta_{i+1}^+)\right] \tag{2.72b}$$

où la fonction m est définie par :

$$m(x,y) = sign(x)\ \max\{0, \min(|x|, y.sign(x))\} \tag{2.73}$$

Limiteur de van Albada

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_i + \frac{s_i}{4}\left[(1-\kappa)\Delta_i^- + (1+\kappa)\Delta_i^+\right] \tag{2.74a}$$

$$\mathbf{u}_R = \mathbf{u}_{i+1} - \frac{s_{i+1}}{4}\left[(1-\kappa)\Delta_{i+1}^+ + (1+\kappa)\Delta_{i+1}^-\right] \tag{2.74b}$$

où la fonction s est définie par :

$$s = \frac{2\Delta^+\Delta^-}{(\Delta^+)^2 + (\Delta^-)^2} \tag{2.75}$$

Limiteur de van Albada modifié par Johnston [99]

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_i + \frac{h_i s_i}{4}\left[(1-s_i\kappa)\Delta_i^{\ominus} + (1+s_i\kappa)\Delta_i^{\oplus}\right] \tag{2.76a}$$

$$\mathbf{u}_R = \mathbf{u}_{i+1} - \frac{h_{i+1} s_{i+1}}{4}\left[(1-s_{i+1}\kappa)\Delta_{i+1}^{\oplus} + (1+s_{i+1}\kappa)\Delta_{i+1}^{\ominus}\right] \tag{2.76b}$$

où le terme h_i désigne la taille de la cellule i et :

$$\Delta_i^{\ominus} = 2\Delta_i^{-}/(h_i + h_{i-1}) \tag{2.77a}$$

$$\Delta_i^{\oplus} = 2\Delta_i^{+}/(h_i + h_{i+1}) \tag{2.77b}$$

2.3.3 Traitement des flux dissipatifs

La discrétisation spatiale des flux dissipatifs (termes visqueux, conductifs, diffusifs) nécessite d'évaluer la valeur moyenne des coefficients de dissipation sur les interfaces des cellules, ainsi que la moyenne ou le gradient de certaines grandeurs du système (vitesse, température, fractions massiques). Les gradients sont classiquement approchés par la méthode des différences centrées, avec une précision spatiale d'ordre 2.

2.3.4 Discrétisation en temps

Le schéma implicite pour la partie convective du système est basé sur la formulation Euler Backward en volumes finis (2.67) :

$$\mathbf{u}_K^{n+1} = \mathbf{u}_K^n - \frac{\Delta t}{|K|}\sum_{e\in\partial K_e} F^{n+1}(\mathbf{u}_K, \mathbf{u}_{K_e}; n_{K_e})|e| \tag{2.78}$$

où le terme Δt représente le pas de temps et n l'itération temporelle tels que $t = n\Delta t$. Ce système discrétisé est non-linéaire, du fait de la non-linéarité du flux numérique. On se ramène à un système de la forme $Ax = B$ en linéarisant le flux :

$$F^{n+1} = F^n + (\nabla_{\mathbf{u}_K} F^n).\Delta\mathbf{u}_K^{n+1} + (\nabla_{\mathbf{u}_{K_e}} F^n).\Delta\mathbf{u}_{K_e}^{n+1} + O(\Delta t^2) \tag{2.79}$$

L'incrément $\Delta\mathbf{u}_K^{n+1}$ correspond à l'écart $\mathbf{u}_K^{n+1} - \mathbf{u}_K^n$ et le terme $\nabla_{\mathbf{u}_K} F^n$ désigne le gradient du flux numérique par rapport aux variables conservatives. On obtient ainsi l'équation linéarisée implicite suivante :

$$\left[\mathbf{I}_d + \frac{\Delta t}{|K|}\sum_{e\in\partial K_e}|e|(\nabla_{\mathbf{u}_K} F^n)\right].\Delta\mathbf{u}_K^{n+1} + \frac{\Delta t}{|K|}\sum_{e\in\partial K_e}|e|(\nabla_{\mathbf{u}_{K_e}} F^n).\Delta\mathbf{u}_{K_e}^{n+1} = -\frac{\Delta t}{|K|}\sum_{e\in\partial K_e}|e|F^n \tag{2.80}$$

Le membre de droite de l'équation (2.80) correspond, par définition, au résidu. Ce résidu doit tendre vers 0 lorsque qu'on atteint un état stationnaire.
La construction de la matrice implicite liée aux flux convectifs repose sur la méthode de van Leer [120] au premier ordre. Ce choix s'avère assez robuste quel que soit le schéma explicite employé. On implicite également les flux visqueux et les termes sources par les méthodes de linéarisation classiques [64, 65].

La résolution du système linéaire repose sur la méthode de Krylov de type GMRES, avec un préconditionnement de type ILU(0). Le nombre de directions de recherche usuel est de 10. Le critère de tolérance sur le résidu à atteindre est fixé à 10^{-5}.

2.3.5 Conditions aux limites

A la paroi, on applique la condition de non glissement en imposant une vitesse nulle. La paroi est, selon les cas, supposée non catalytique ou pseudo-catalytique. D'autre part, elle est supposée isotherme à une valeur T_{wall} pour les températures T et $T_{v,m}$. Pour la température T_e, on peut imposer la condition isotherme $T_e = T_{wall}$ [124] ou la condition d'adiabaticité $(\nabla T_e)_{wall} = 0$ [149]. Par ailleurs, le gradient de pression normal à la paroi est pris égal à zéro. Les conditions limites pariétales sont implicitées afin d'augmenter la stabilité de la méthode [64, 65].

L'écoulement infini amont étant hypersonique, les flux à travers les limites d'entrée reposent sur les conditions d'entrée supersonique. De même, les flux à travers les limites de sortie reposent sur les conditions de sortie supersonique. Dans ces conditions, on impose un gradient nul pour l'ensemble des variables du système.

Sur l'axe de symétrie d'un calcul axisymétrique, on applique la condition de réflexion à la vitesse tangentielle et la condition de glissement aux autres grandeurs du système.

Chapitre 3

Description des modélisations et méthodes de résolution des transferts radiatifs

L'objectif du chapitre est de présenter l'équation qui régit les transferts radiatifs dans les écoulements de rentrée atmosphérique, puis de décrire l'ensemble des modélisations utilisées pour résoudre cette équation : dans un premier temps les modèles de propriétés radiatives des gaz, et dans un second temps les méthodes de résolution numérique.

3.1 Equation du transfert radiatif

3.1.1 Hypothèses adoptées

On considère les hypothèses suivantes :

- les effets de polarisation du rayonnement électromagnétique sont négligés,
- l'indice optique du milieu est supposé constant et égal à 1,
- le milieu est supposé non diffusant.

La première hypothèse est classique et quasiment incontournable. La seconde hypothèse est toujours vérifiée dans le cas des milieux gazeux, à quelques 10^{-4} près [185]. La troisième hypothèse est vérifiée dans les hautes couches de l'atmosphère. Elle pourra être mise en défaut, par exemple, dans le cas où la paroi du véhicule de rentrée est ablative.

En conséquence de ces hypothèses, le rayonnement se propage à la vitesse de la lumière dans le vide c_0 et de manière rectiligne, avec éventuellement des réflexions sur les parois. Les trajectoires du rayonnement, appelées chemins optiques, sont des lignes brisées.

Généralement, on adopte l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local (ETL) pour résoudre les problèmes de transfert radiatif dans les milieux semi-transparents [185, 193, 178, 198, 158]. Cette hypothèse revient à admettre que le peuplement des niveaux d'énergie des particules suit une distribution de Boltzmann caractérisée par une valeur locale et unique de température. Sous la condition d'ETL, le coefficient monochromatique d'émission $j_\lambda(s)$ en un point d'abscisse s, s'exprime à l'aide du coefficient monochromatique d'absorption $\kappa_\lambda(s)$ et de la luminance monochromatique du rayonnement d'équilibre $I^0_\lambda(T)$ selon la relation :

$$(j_\lambda)_{ETL}(s) = \kappa_\lambda(s) I^0_\lambda(T(s)) \tag{3.1}$$

Dans le cadre des écoulements de rentrée atmosphérique, l'hypothèse d'ETL est adoptée si l'écoulement est à l'équilibre thermique. Dans le cas contraire, il est nécessaire de calculer le coefficient d'émission à l'aide d'un modèle de propriétés radiatives.

3.1.2 Equation du Transfert de Rayonnement

La formulation générale de l'Equation du Transfert de Rayonnement (ETR) dans les gaz est donnée par la relation (1.28). Dans le cadre de nos hypothèses, l'ETR devient :

$$\frac{\partial I_\lambda(s,\mathbf{u})}{\partial s} = j_\lambda(s) - \kappa_\lambda(s) I_\lambda(s,\mathbf{u}) \tag{3.2}$$

Cette équation s'écrit également sous la forme intégrale suivante :

$$I_\lambda(s,\mathbf{u}) = I_\lambda(0,\mathbf{u})\tau_\lambda(0 \to s) + \int_0^s j_\lambda(s')\tau_\lambda(s' \to s)\mathrm{d}s' \tag{3.3}$$

en définissant la transmittivité monochromatique de l'abscisse s' à l'abscisse s comme :

$$\tau_\lambda(s' \to s) = \exp\left(\int_{s'}^{s} -\kappa_\lambda(s")\mathrm{d}s"\right) \tag{3.4}$$

Le choix de l'une ou l'autre de ces formulations dépend du modèle de propriétés radiatives. En effet, certains modèles, comme par exemple le code spectroscopique PARADE [172], calculent le coefficient d'absorption ; dans ce cas, les formulations locale et intégrale de l'ETR peuvent être utilisées indifféremment. D'autres modèles, comme le modèle MSBE [186] par exemple, fournissent la transmittivité du milieu ; dans ce cas, la formulation intégrale est la plus appropriée.

3.1.3 Expression du flux radiatif pariétal et de la puissance radiative volumique

On définit, en tout point de l'espace, le vecteur flux radiatif $\mathbf{q}^R$ par la relation suivante :

$$\mathbf{q}^R(s) = \int_0^\infty \int_{4\pi} I_\lambda(s,\mathbf{u})\mathbf{u}\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\lambda \tag{3.5}$$

A la paroi d'un corps à propriétés radiatives isotropes, le flux radiatif surfacique s'écrit comme la différence entre les flux absorbé et émis par la paroi :

$$q^R = \int_0^\infty \alpha_\lambda(s) \int_{2\pi} I_\lambda(s,\mathbf{u})\,\mathbf{u}.\mathbf{n}\,\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\lambda - \pi \int_0^\infty \epsilon_\lambda(s) I^0_\lambda(s)\mathrm{d}\lambda \tag{3.6}$$

où le vecteur unitaire $\mathbf{n}$ est normal à la paroi. Les termes α_λ et ϵ_λ désignent respectivement l'absorptivité et l'émissivité monochromatiques isotropes de la paroi. On ajoute que si la paroi est un corps opaque, alors son absorptivité monochromatique directionnelle α'_λ est égale à son émissivité monochromatique directionnelle ϵ'_λ (loi de Kirchhoff), soit :

$$\alpha'_\lambda = \epsilon'_\lambda \tag{3.7}$$

A fortiori, si la paroi est un corps opaque à propriétés radiatives isotropes, on a la relation :

$$\alpha_\lambda = \epsilon_\lambda \tag{3.8}$$

La puissance radiative volumique en un point G s'exprime comme l'opposé de la divergence du flux radiatif :

$$\begin{aligned} P^R(G) &= -\left[\nabla.\mathbf{q^R}\right]_G \\ &= -\int_0^\infty \int_{4\pi} \left[\frac{\partial I_\lambda(s,\mathbf{u})}{\partial s}\right]_{s=G} \mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\lambda \\ &= \int_0^\infty \kappa_\lambda(G) \int_{4\pi} I_\lambda(G,\mathbf{u})\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\lambda - 4\pi \int_0^\infty j_\lambda(G)\mathrm{d}\lambda \end{aligned} \tag{3.9}$$

Ce terme apparaît dans l'équation (2.2e) de bilan d'énergie totale, pour le système gouvernant l'hydrodynamique.

Dans les conditions de l'équilibre thermodynamique local, la puissance radiative s'exprime en fonction de la transmittivité du milieu sous la forme :

$$\begin{aligned} P^R(G) &= \underbrace{\int_0^\infty \int_{4\pi} \left[-I_{\tilde{\nu}}(0,\Omega)\frac{\partial\tau_{\tilde{\nu}}(0\to s)}{\partial s} - \int_0^s I^0_\nu(T(s'))\frac{\partial^2\tau_{\tilde{\nu}}(s'\to s)}{\partial s'\,\partial s}\mathrm{d}s'\right]_{s=G} \mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\tilde{\nu}}_{\text{absorption}} \\ &- \underbrace{\int_0^\infty \int_{4\pi} I^0_{\tilde{\nu}}(T_G)\left[\frac{\partial\tau_{\tilde{\nu}}(s'\to G)}{\partial s'}\right]_{s'=G} \mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\tilde{\nu}}_{\text{émission}} \end{aligned} \tag{3.10}$$

3.2 Modèles de propriétés radiatives des gaz

Dans cette partie, on décrit les deux modèles de propriétés radiatives des gaz utilisés dans ce travail. Le premier modèle est un modèle approché dédié aux mélanges de gaz CO/CO_2. Le second modèle utilise une approche de type raie-par-raie pour déterminer les propriétés radiatives de mélanges gazeux à base d'azote et d'oxygène (représentatifs de l'atmosphère terrestre).

3.2.1 Le Modèle Statistique à Bandes Etroites pour les mélanges de gaz CO/CO_2

En 2003, Rivière *et al.* [158], du laboratoire EM2C, ont développé un Modèle Statistique à Bandes Etroites (MSBE) [186] pour calculer les propriétés radiatives des gaz CO/CO_2. Le modèle est limité au cas de mélanges gazeux à l'ETL. Il est construit à partir de données expérimentales obtenues dans les régimes basse pression - haute température qui définissent le domaine de validité du modèle :

$$1Pa \leq p \leq 500Pa, \quad 1000K \leq T \leq 4000K$$

Rivière *et al.* [158] ont recensé toutes les transitions susceptibles de contribuer de façon significative aux phénomènes d'absorption/émission. Le domaine spectral considéré se situe dans la partie infrarouge du spectre. Il couvre de manière discontinue l'intervalle $512,5cm^{-1} - 5162,5cm^{-1}$.

Pour la molécule CO, le modèle utilise les données précises publiées dans la littérature [31, 32, 78]. Sont prises en compte toutes les transitions ayant un saut de nombre quantique vibrationnel égal à 1 ou 2, le nombre quantique rotationnel allant jusqu'à 115. Les autres transitions

apportent une contribution négligeable et ne modifient pas l'intensité totale d'une bande de plus de 2% [158]. Les domaines de nombre d'onde à considérer pour la molécule CO s'étendent de $1637,5cm^{-1}$ à $2337,5cm^{-1}$ et de $3387,5cm^{-1}$ à $4362,5cm^{-1}$.

Pour la molécule CO_2, la base de données a été développée par EM2C à partir de la base HITRAN [161], rigoureuse mais limitée aux conditions de basses températures. Cette dernière a été extrapolée aux nombres quantiques vibrationnels et rotationnels élevés. Les niveaux rotationnels pris en compte vont jusqu'à 200. Les bandes spectrales à considérer pour la molécule CO_2 s'étendent de $512,5cm^{-1}$ à $1112,5cm^{-1}$, de $1912,5cm^{-1}$ à $2437,5cm^{-1}$, de $3262,5cm^{-1}$ à $3787,5cm^{-1}$ et de $4737,5cm^{-1}$ à $5162,5cm^{-1}$. La base de donnée a été validée par comparaison à des données expérimentales jusqu'à $2850K$.

On s'intéresse maintenant à la construction du modèle. Un modèle statistique à bandes étroites est tout d'abord un modèle à bandes étroites au sens où le domaine spectral est discrétisé en bandes suffisamment étroites pour que la fonction de Planck puisse être considérée comme constante à l'intérieur de chaque bande. Le MSBE est ensuite un modèle statistique dans le sens où la position des raies, la distribution de leurs intensités et leurs profils sont obtenues à partir d'hypothèses statistiques [186]. Ces lois statistiques permettent d'exprimer la transmittivité moyenne d'une colonne gazeuse.

Dans le cas du MSBE développé par Rivière *et al.* [158], la largeur des bandes spectrales est de $25cm^{-1}$. Le nombre total de bandes spectrales est de 118. La méthode statistique utilisée est basée sur le modèle de Mayer et Goody [70]. Elle consiste à supposer que les positions des raies sont aléatoires à l'intérieur de chaque bande.

On définit l'opérateur de moyenne $\overline{.}_{\Delta\tilde{\nu}}$ sur une bande spectrale de largeur $\Delta\tilde{\nu}$ centrée sur le nombre d'onde $\tilde{\nu}_0$ par :

$$\overline{f}_{\Delta\tilde{\nu}} = \frac{1}{\Delta\tilde{\nu}} \int_{\tilde{\nu}_0-\Delta\tilde{\nu}/2}^{\tilde{\nu}_0+\Delta\tilde{\nu}/2} f(\eta)\mathrm{d}\eta \tag{3.11}$$

Si l'on suppose la luminance incidente $\overline{I}_{\Delta\tilde{\nu}}(0,\mathbf{u})$ constante sur l'intervalle $\Delta\tilde{\nu}$ [186], la luminance moyenne $\overline{I}_{\Delta\tilde{\nu}}$ est régie par l'équation :

$$\overline{I}_{\Delta\tilde{\nu}}(s,\mathbf{u}) = \overline{I}_{\Delta\tilde{\nu}}(0,\mathbf{u})\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}}(0\rightarrow s) + \int_0^s \overline{I}^0_{\Delta\tilde{\nu}}(T(s'))\frac{\partial\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}}(s'\rightarrow s)}{\partial s'}\mathrm{d}s' \tag{3.12}$$

Le terme $\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}}(s'\rightarrow s)$ désigne la transmittivité moyenne sur la bande spectrale $\Delta\tilde{\nu}$. L'objectif est d'exprimer cette transmittivité moyenne. Les trois étapes de la construction du modèle sont détaillées ci-dessous.

On s'intéresse dans un premier temps à une colonne uniforme - homogène et isotherme - de longueur l. Dans le cadre du MSBE, la transmittivité de la colonne considérée, moyennée sur la bande spectrale de largeur $\Delta\tilde{\nu}$, est donnée par :

$$\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}} \;=\; \frac{1}{\Delta\tilde{\nu}} \int_{\Delta\tilde{\nu}} \exp\left(-\kappa_{\tilde{\nu}}\, l\right)\, d\tilde{\nu} \;=\; \exp\left(-\frac{\overline{W}}{\delta}\right) \tag{3.13}$$

Le terme $\delta = \Delta\tilde{\nu}/N$ désigne l'espacement moyen séparant deux raies consécutives parmi les N raies présentes dans l'intervalle $\Delta\tilde{\nu}$. Pour une raie d'absorption i, on définit la largeur de la raie noire équivalente W_i par :

$$W_i \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 \;-\; \exp\left(-\kappa^i_{\tilde{\nu}} l\right)\right] d\tilde{\nu} \tag{3.14}$$

Le terme $\overline{W}$ désigne la moyenne sur les N raies des largeurs de raie noire équivalente :

$$\overline{W} = \frac{1}{N} \sum_{raies\, i} W_i \tag{3.15}$$

Le calcul de $\overline{W}$ nécessite d'imposer des hypothèses sur le profil des raies et sur la distribution de leurs intensités. L'intensité d'une raie S s'exprime à partir de la densité volumique n de l'espèce considérée et du coefficient d'absorption monochromatique $\kappa_{\tilde{\nu}}$ selon la relation :

$$S = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \kappa_{\tilde{\nu}} \mathrm{d}\tilde{\nu} \tag{3.16}$$

Dans le régime pression/température considéré, l'élargissement collisionnel est négligeable. Les raies d'absorption suivent alors un profil Doppler de demi-largeur à mi-hauteur γ_D constante dans chaque bande. En considérant que l'intensité des raies S suit une loi de distribution exponentielle [158], le terme $\overline{W}$ se déduit de la relation suivante [186] :

$$\frac{\overline{W}}{\delta} = \frac{\gamma_D}{\delta} E\left(\frac{(< S > /\delta)\, u}{\gamma_D/\delta}\right) \tag{3.17}$$

avec $E(y) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{y e^{-\xi^2}}{1 + y e^{-\xi^2}}\, d\xi$. Le terme $< S >$ désigne l'intensité moyenne des N raies. Le terme u désigne le produit de la longueur de la colonne et de la pression partielle du gaz absorbant m, soit $u = l p_m = l x_m p$.

L'expression de $\overline{W}/\delta$, et donc de $\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}}$, dépend uniquement de deux paramètres indépendants : $< S > /\delta$ et γ_D/δ. Le premier paramètre s'identifie au coefficient d'absorption moyen dans la bande $\Delta\tilde{\nu}$ divisé par la pression partielle du gaz absorbant. Le second paramètre est le rapport entre la largeur Doppler des raies et l'espacement moyen entre deux raies. Il décrit la dynamique du spectre du coefficient d'absorption. Les deux paramètres sont ajustés afin d'obtenir le meilleur accord, au sens des moindres carrés, entre l'évolution de la grandeur $\overline{W}/\delta$ en fonction de u donnée par le modèle et la courbe théorique, obtenue par un calcul de type raie-par-raie.

Dans un second temps, le modèle est étendu au cas de colonnes gazeuses anisothermes et hétérogènes. Suivant l'approximation formelle de Curtis-Godson [186], la transmittivité d'une espèce m s'écrit :

$$\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}}(s_1 \rightarrow s_2) = \exp\left[-\beta_{eq,m} E\left(\frac{k_{eq,m} u_{eq,m}}{\beta_{eq,m}}\right)\right] \tag{3.18}$$

avec :

$$u_{eq,m} = \int_{s_1}^{s_2} p_m(s)\, ds \tag{3.19}$$

$$k_{eq,m} = \frac{1}{u_{eq,m}} \int_{s_1}^{s_2} p_m(s)\, \frac{< S >}{\delta}(s)\, ds \tag{3.20}$$

$$\frac{1}{\beta_{eq,m}} = \frac{1}{k_{eq,m} u_{eq,m}} \int_{s_1}^{s_2} p_m(s)\, \frac{< S >}{\delta}(s)\, \left(\frac{\gamma_D}{\delta}\right)^{-1}(s)\, ds \tag{3.21}$$

Dans notre cas, les paramètres $< S > /\delta$ et γ_D/δ des espèces CO et CO_2 sont tabulés en fonction de la bande spectrale et de la température [158]. La plage de température s'étend de $1000K$ à $4000K$ avec un pas de $200K$. Hors de ce domaine, le modèle utilise la valeur des paramètres

à l'extremum de température le plus proche ; par exemple, si la température dépasse $4000K$, le modèle utilise la valeur de $k_{eq,m}$ et $\beta_{eq,m}$ à la température $4000K$.

Dans un troisième et dernier temps, le modèle est étendu aux mélanges contenant plusieurs espèces susceptibles d'absorber du rayonnement dans la même bande spectrale. Dans le cas d'un mélange CO/CO_2, la transmittivité du mélange s'exprime, avec une très bonne précision [158], comme le produit des deux transmittivités moyennes des espèces :

$$\overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu}} = \overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu},CO} \times \overline{\tau}_{\Delta\tilde{\nu},CO_2} \tag{3.22}$$

En pratique, le modèle nécessite la donnée des fractions molaires des espèces CO et CO_2 ainsi que la pression et la température. Il fournit en sortie la transmittivité du mélange pour les 118 bandes de largeur $25cm^{-1}$.

3.2.2 Le code spectroscopique de type raie-par-raie PARADE

Le code PARADE (PlasmA RAdiation DatabasE) [172, 103, 156, 171] calcule les spectres d'émission et d'absorption de mélanges gazeux avec une approche de type raie-par-raie. Il a été développé conjointement par l'Institut für Raumfahrtsysteme de l'université de Stuttgart et les sociétés Fluid Gravity Engineering Ltd. et Aerophysics Consulting, sous contrat émanant de l'ESA/ESTEC. Son développement se base sur le code spectroscopique NEQAIR de Park [144, 145]. La premiere version opérationnelle de PARADE date de 1996 [172]. Nous utilisons la version 1.9 [171].

Pour des applications en atmosphère terrestre, le code PARADE prend en compte les contributions radiatives des huit espèces chimiques suivantes : N_2, N_2^+, O_2, NO, N, O, N^+ et e^-.

Les données spectroscopiques relatives aux atomes N, O et N^+ sont issues des National Standard Reference Data Series (NSRDS) du National Bureau of Standards (NBS) [173]. Le nombre de transitions lié-lié prises en compte pour chaque espèce atomique est donné dans le tableau 3.1. Le calcul des profils de raie tient compte de l'effet Doppler et de l'élargissement par collisions (profil de Lorentz). Ces deux effets conduisent au profil de Voigt, représenté mathématiquement par le produit de convolution des profils Lorentz et Doppler.

Tab. 3.1: Processus radiatifs pris en compte par le code PARADE

Atome	Nombre de transitions lié-lié
N	212
O	86
N^+	88
Molécule	**Systèmes moléculaires**
N_2	Premier et second positif, Birge-Hopfield
O_2	Schumann-Runge
NO	β, γ, δ, ϵ
N_2^+	Premier négatif

Les données spectroscopiques relatives à l'espèce moléculaire N_2^+ sont issues du code NEQAIR [144, 145]. Pour les autres espèces moléculaires, les données plus récentes de Laux [113] sont utilisées. Les systèmes moléculaires calculés par le code sont indiqués dans le tableau 3.1.

Le code PARADE calcule également le continuum. Concernant le rayonnement de type lié-libre, seul le rayonnement par photoionisation atomique est pris en compte, et ce pour l'azote uniquement [172]. Les sections de collision associées à ce mécanisme sont basées sur les données relatives à l'atome d'hydrogène [104].

Le code PARADE détermine le peuplement des niveaux électroniques selon deux approches : l'approche multitempérature ou l'approche QSS (voir § 1.2.2.2). Cependant, l'approche QSS est pour l'instant disponible uniquement pour les espèces N, O et N_2^+ [171]. De plus, pour les applications qui nous intéressent, l'écart constaté entre les deux approches sur la prédiction des spectres ne dépasse pas 3% [142]. Par conséquent, nous avons utilisé l'approche multitempérature. Dans ce cas, le peuplement des niveaux d'énergie électronique, rotationnel et vibrationnel des molécules est supposé suivre des distributions de Boltzmann à des températures spécifiques de chaque mode. Les trois températures sont spécifiées par l'utilisateur pour chacune des espèces, ainsi que la température du gaz d'électrons libres.

L'utilisateur spécifie également les bornes du domaine spectral et le nombre de points de discrétisation. Le domaine spectral est discrétisé de manière uniforme. Une méthode de discrétisation auto-adaptative est également implémentée dans le code PARADE [103]. Elle permet de réduire le nombre de points spectraux tout en assurant que les points importants - notamment les longueurs d'onde centrales des raies atomiques - soient effectivement présents dans la discrétisation. Cette méthode ne concerne pas le rayonnement moléculaire du fait de sa complexité. Ce dernier est donc traité dans l'approche usuelle d'une discrétisation uniforme. Le lecteur est invité à se reporter à la référence [103] pour des détails sur la méthode de répartition auto-adaptative des points spectraux.

Dans nos travaux, nous n'avons pas employé cette technique, car son utilisation s'avère délicate lorsque le calcul porte sur un champ d'écoulement. En effet, les contributions radiatives prédominantes varient selon les conditions thermodynamiques du milieu. Par conséquent, la distribution adaptée des points spectraux varie selon les cellules du maillage de calcul. Ceci impose des modifications dans le solveur de transfert radiatif [172, 103]. Si l'on ne désire pas modifier le solveur radiatif, il est nécessaire de considérer une discrétisation spectrale unique pour l'ensemble des cellules. Afin d'éviter toute extrapolation des grandeurs monochromatiques, et ainsi toute perte d'information et de précision, cette distribution unique reprendrait l'ensemble des points spectraux de chaque cellule. Le nombre de points spectraux serait alors considérable. Une telle opération conduirait à perdre le bénéfice de la discrétisation adaptée en terme de réduction du nombre de points spectraux.

3.3 Méthodes numériques de résolution de l'équation du transfert radiatif

Dans cette partie, on décrit les trois méthodes utilisées dans ce travail pour résoudre l'ETR. Il s'agit de la méthode des plans tangents, d'une méthode de lancer de rayons et d'une méthode de type Monte-Carlo.

3.3.1 La méthode des plans tangents

La méthode des plans tangents consiste à supposer que les propriétés radiatives du milieu varient uniquement dans la direction normale à la paroi. On se ramène alors à la résolution d'un problème de type mur plan, c'est-à-dire un milieu semi-transparent compris entre deux plans parallèles infinis à propriétés isotropes et uniformes. L'un de ces plans correspond à la paroi du véhicule, l'autre plan correspond aux conditions de l'écoulement infini amont.

La résolution de ce problème classique (voir par exemple [9, 184]) est maintenant rappelée. La figure 3.1(a) présente la géométrie afférente au modèle plan tangent. L'ETR associée s'écrit sous forme intégrale :

$$I_\lambda(\eta, l) = I_\lambda(0, l)e^{-\check{\tau}_\lambda(\eta)/l} + \int_{\eta_0}^{\eta} j_\lambda(\eta')e^{-[\check{\tau}_\lambda(\eta)-\check{\tau}_\lambda(\eta')]/l}\mathrm{d}\eta' \tag{3.23}$$

où le terme l désigne le cosinus de l'angle de direction du rayon par rapport à la normale et η l'abscisse dans la direction normale à la paroi. En pratique, la direction normale est définie selon chaque ligne de maillage (figure 3.1(b)).

Le terme $\check{\tau}_\lambda(s)$ désigne l'épaisseur optique, définie par la relation :

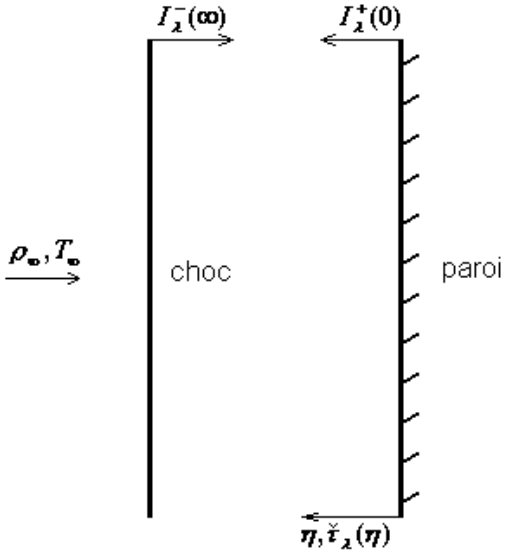
$$\check{\tau}_\lambda(s) = \int_0^s \kappa_\lambda(s')\mathrm{d}s' \tag{3.24}$$

Le flux radiatif monochromatique s'obtient par intégration de la luminance monochromatique I_λ sur l'angle solide, conduisant à la relation :

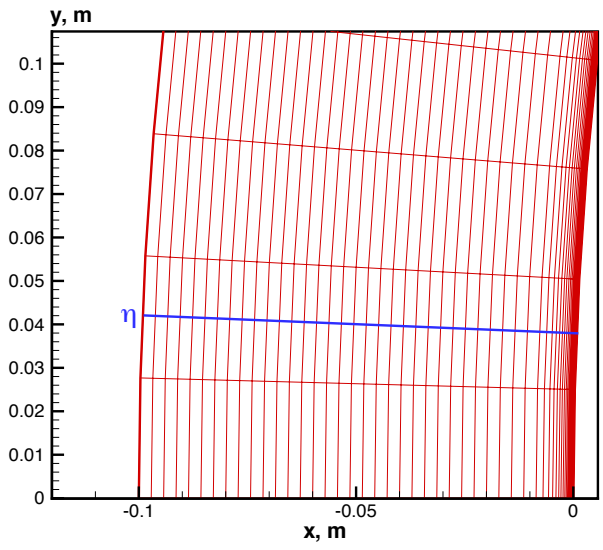
$$q_\lambda^R(\eta) = 2\pi \int_{-1}^{1} I_\lambda(\eta, l)l\mathrm{d}l \tag{3.25}$$

Il est alors pratique d'introduire les demi-flux pour exprimer le flux radiatif monochromatique :

$$q_\lambda^R(\eta) = q_\lambda^{R+}(\eta) - q_\lambda^{R-}(\eta) \tag{3.26}$$



(a) **Géométrie du modèle**



(b) **Définition de la direction η**

Fig. 3.1: Méthode des plans tangents

Le terme q_λ^{R-} représente le flux dirigé vers la paroi et le terme q_λ^{R+} le flux dirigé dans le sens opposé. Ces termes s'expriment par les relations suivantes :

$$q_\lambda^{R+}(\eta) = \quad 2\pi I_\lambda^+(0)E_3[\check{\tau}_\lambda(\eta)] \quad +2\pi\int_0^\eta j_\lambda(\eta')E_2[\check{\tau}_\lambda(\eta)-\check{\tau}_\lambda(\eta')]\mathrm{d}\eta' \quad (3.27a)$$

$$q_\lambda^{R-}(\eta) = \quad 2\pi I_\lambda^-(\infty)E_3[\check{\tau}_\lambda(\infty)-\check{\tau}_\lambda(\eta)] \quad +2\pi\int_\eta^\infty j_\lambda(\eta')E_2[\check{\tau}_\lambda(\eta')-\check{\tau}_\lambda(\eta)]\mathrm{d}\eta' \quad (3.27b)$$

Dans ces expressions, les premiers termes correspondent à la transmission jusqu'à l'abscisse η du rayonnement issu de la paroi (indice 0) et de l'écoulement infini amont (indice ∞). Les seconds termes correspondent aux effets cumulés des rayonnements émis par les tranches $(\eta',\ \eta'+\mathrm{d}\eta')$ et transmis jusqu'au plan η.

Les relations (3.27a) et (3.27b) contiennent les fonctions exponentielles intégrales E_2 et E_3. La fonction d'ordre n se définit par :

$$E_n(x) = \int_0^1 l^{n-2}e^{-x/l}\mathrm{d}l \quad (3.28)$$

Les fonctions E_n sont calculées à l'aide des approximations polynomiales et rationelles [2] présentées en Annexe D.

Les expressions précédentes font également apparaître les termes $I_\lambda^+(0)$ et $I_\lambda^-(\infty)$. Ces termes correspondent aux conditions aux limites des luminances monochromatiques intégrées sur un demi-espace. Le terme $I_\lambda^+(0)$ par exemple correspond au rayonnement partant de la paroi, c'est-à-dire émis ou réfléchi par la paroi. Nous avons supposé que l'écoulement infini amont se comporte comme un corps noir à la température T_∞, les luminances s'obtiennent par résolution du système linéaire suivant [184] :

$$\left\{\begin{array}{ll} I_\lambda^+(0) & = \epsilon_\lambda^w I_\lambda^0(T_w) + (1-\epsilon_\lambda^w)I_\lambda^-(0) \\ I_\lambda^-(\infty) & = I_\lambda^0(T_\infty) \\ \pi I_\lambda^-(0) & = q_\lambda^{R-}(0) \\ \pi I_\lambda^+(\infty) & = q_\lambda^{R+}(\infty) \end{array}\right. \quad (3.29)$$

où le terme ϵ_λ^w désigne l'émissivité spectrale de la paroi et T_w sa température.

Enfin, le flux radiatif q^R s'obtient par intégration des demi-flux monochromatiques sur le domaine spectral choisi.

3.3.2 La méthode de lancer de rayons

Dans la méthode de lancer de rayons, des rayons optiques sont lancés dans un espace angulaire Ω, depuis un point de la paroi jusqu'aux limites non-réfléchissantes du domaine. L'équation de transfert radiatif est résolue sur chacun des rayons. La résolution s'effectue dans le sens inverse de la construction du chemin optique, c'est-à-dire depuis la frontière du domaine jusqu'au point de la paroi. De ce point de vue, la méthodologie s'apparente à celle proposée par Walters et Buckius [206]. La méthode de lancer de rayons permet de calculer le rayonnement incident à la paroi.

Pour définir les rayons optiques, on découpe l'espace angulaire Ω en angles solides élémentaires $\mathrm{d}\Omega$. Ce découpage s'effectue de manière déterministe par la donnée d'un nombre N_θ de directions zénithales (par rapport à la normale) et d'un nombre N_ϕ de directions azimutales.

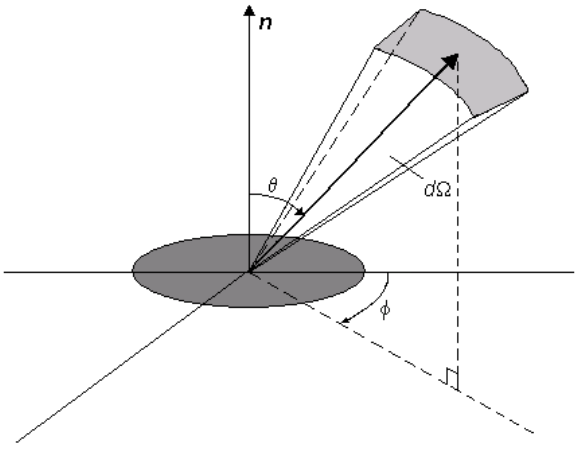


Fig. 3.2: Définition de l'angle solide élémentaire

Les angles d'élévation et d'azimut définissent l'axe central des angles solides élémentaires (figure 3.2). Chaque rayon optique s'identifie à l'un de ces axes centraux.

Afin de ne privilégier aucune direction par rapport aux autres, les angles solides élémentaires sont pris égaux. Le nombre $N_{\mathrm{d}\Omega}$ d'angles solides élémentaires s'obtient à partir des nombres N_ϕ et N_θ selon la relation :

$$N_{\mathrm{d}\Omega} = N_\phi(N_\theta - 1) + 1 \tag{3.30}$$

en remarquant qu'un seul rayon est lancé pour l'angle $\theta = 0$. L'angle solide Ω est donné par la relation :

$$\Omega = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\theta_{max}} \sin\theta \mathrm{d}\theta = 2\pi(1 - \cos\theta_{max}) \tag{3.31}$$

L'angle solide élémentaire vaut alors :

$$\mathrm{d}\Omega = \Omega / N_{\mathrm{d}\Omega} \tag{3.32}$$

Une façon d'imposer l'égalité des angles solides élémentaires consiste à poser :

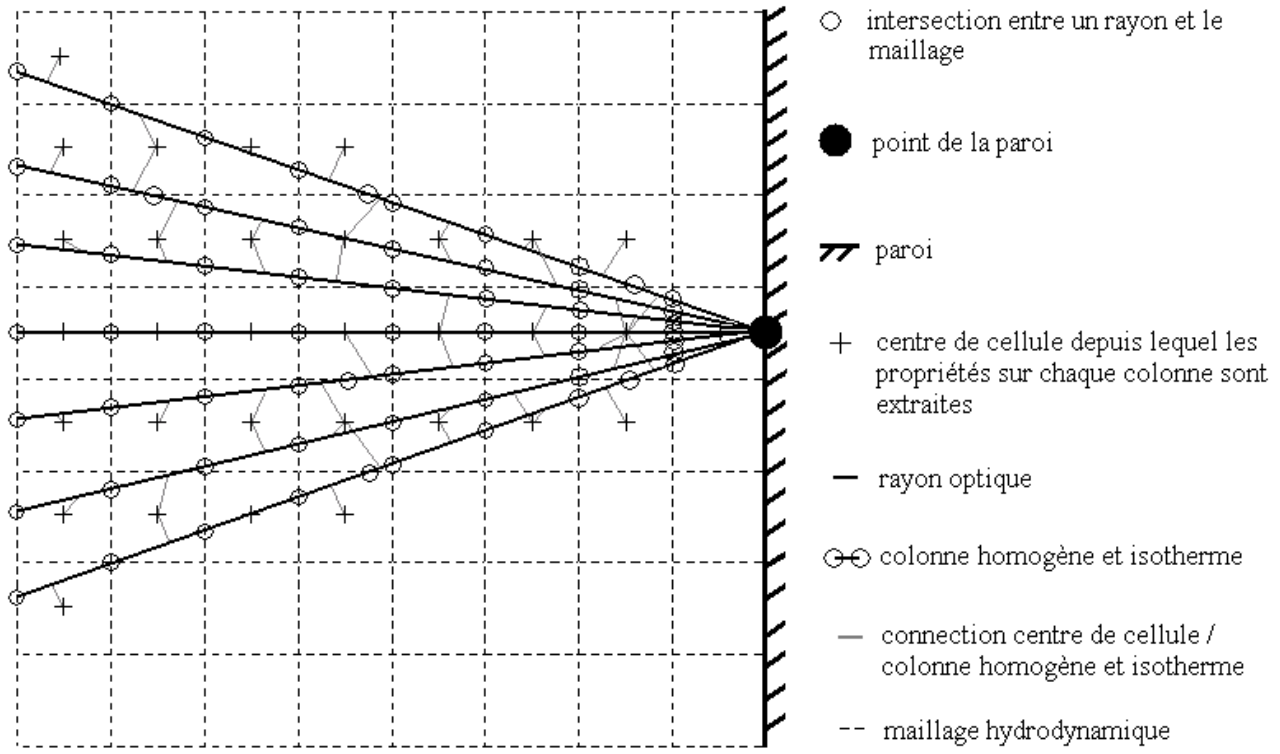
$$\sin\theta \mathrm{d}\theta = \text{constante} \ , \ \mathrm{d}\phi = \text{constante} \tag{3.33}$$

Dans notre étude, les rayons optiques sont systématiquement issus de points situés sur la paroi. Par conséquent, les angles ϕ et θ sont distribués sur les intervalles suivants :

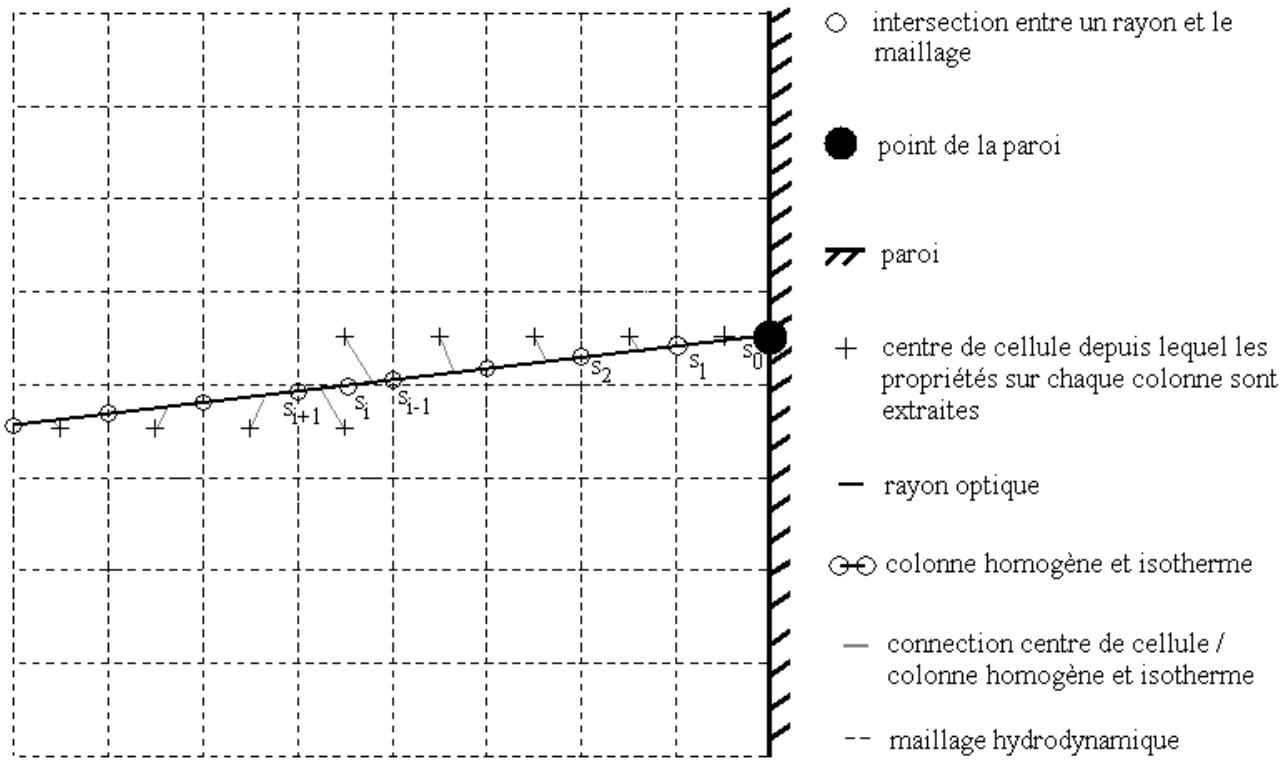
$$0 \leq \phi \leq 2\pi \ , \ 0 \leq \theta \leq \theta_{max} \tag{3.34}$$

L'angle θ_{max} est le demi-angle d'ouverture au sommet du faisceau de rayons. Il est choisi égal à $\pi/2$ pour un calcul portant sur l'hémisphère complet entourant le point d'émission du faisceau optique et délimité par la paroi. Ce choix permet de calculer les grandeurs incidentes à la paroi (luminance monochromatique, flux). Le paramètre θ_{max} est choisi inférieur à $\pi/2$ pour ne prendre en compte qu'une partie du rayonnement incident. Il est ainsi possible de reproduire les conditions de mesures expérimentales à travers un cône de visée.

Pour intégrer l'ETR le long des rayons optiques, chaque rayon est découpé en colonnes homogènes et isothermes (figure 3.3(a)). L'approche retenue consiste à discrétiser le domaine de calcul à l'aide d'un maillage - en pratique, ce maillage est le maillage hydrodynamique. Un rayon optique traverse un certain nombre de cellules du maillage, depuis un point de la



(a) **Découpage des rayons en colonnes homogènes et isothermes dans le cas bidimensionnel**



(b) **Zoom sur la discrétisation d'un rayon en colonnes homogènes et isothermes dans le cas bidimensionnel**

Fig. 3.3: Méthode de lancer de rayons

paroi jusqu'à l'intersection avec une frontière du domaine. Une colonne se définit comme la portion du rayon contenue dans une cellule donnée. Les limites de la colonne correspondent aux points d'entrée et de sortie du rayon dans la cellule. La longueur de la colonne est égale à la distance parcourue dans la cellule. Les propriétés thermodynamiques de la colonne sont égales aux propriétés au centre de la cellule.

On désigne par s_i la distance parcourue depuis le point de la paroi jusqu'au point d'entrée du rayon dans la $i^{ème}$ cellule (figure 3.3(b)). L'intégration de l'ETR (3.3) entre deux points d'abscisses s_i et s_{i-1} conduit à une formule de récurrence simple pour le calcul de la luminance monochromatique du rayonnement incident :

$$I_\lambda^-(s_{i-1}) = \frac{j_{\lambda,i-1}}{\kappa_{\lambda,i-1}} \left(1 - e^{-\kappa_{\lambda,i-1} z}\right) + I_\lambda^-(s_i) e^{-\kappa_{\lambda,i-1} z} \tag{3.35}$$

où $z = s_i - s_{i-1}$. La valeur du coefficient d'absorption $\kappa_{\lambda,i-1}$ ou d'émission $j_{\lambda,i-1}$ est la valeur au centre de la cellule $i-1$. En itérant le calcul de proche en proche, depuis l'infini amont - où, la température étant très faible, on suppose que la luminance est nulle - jusqu'à la paroi, on obtient la luminance monochromatique du rayonnement incident au point de la paroi considéré.

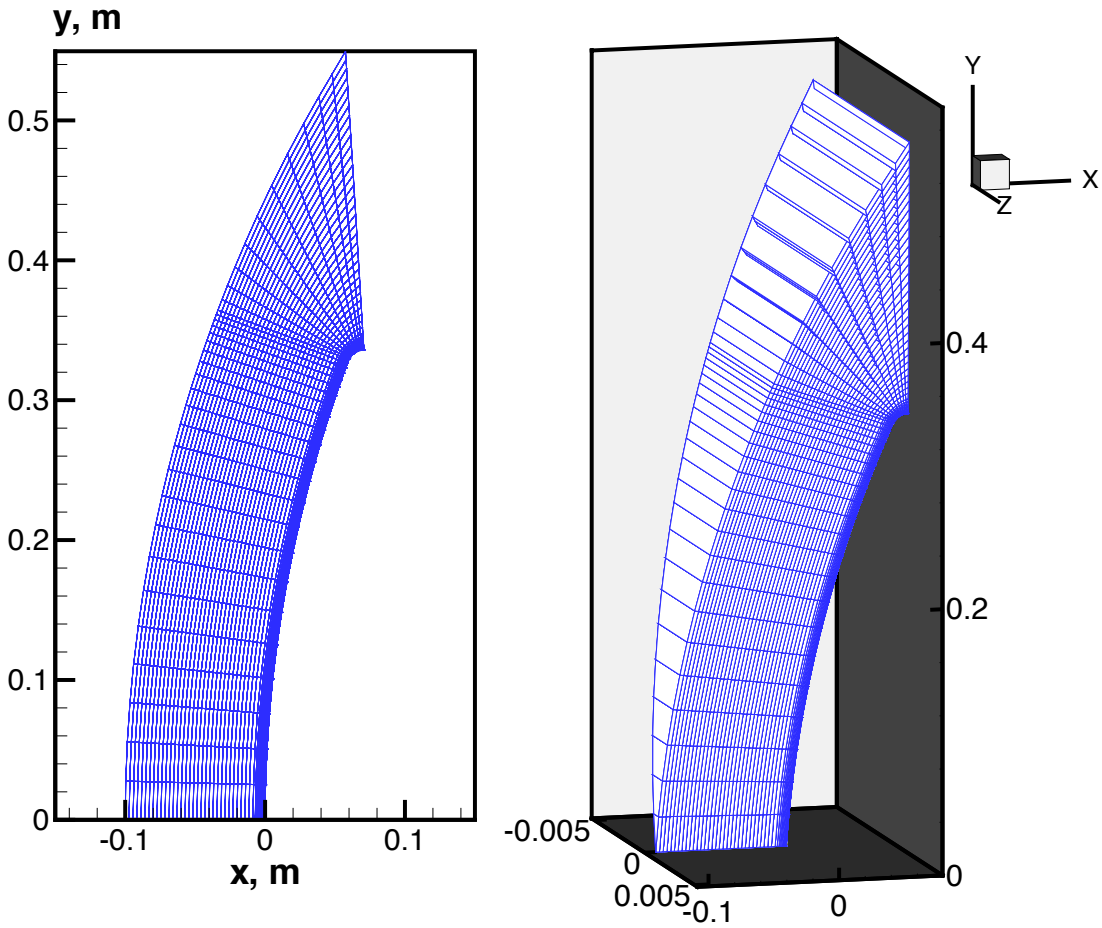


Fig. 3.4: Tranche de maillage 3D (droite) pour une géométrie axisymétrique correspondant à un maillage 2D (gauche), géométrie FIRE II [29, 30, 55]

En pratique, le calcul s'effectue sur un domaine tridimensionnel. Un rayon optique peut rencontrer deux types de conditions limites : une paroi ou une frontière du domaine. Dans les deux cas, le tracé du rayon optique est immédiatement interrompu car la paroi est supposée absorber entièrement le rayonnement incident (corps noir) et à une frontière, le rayon quitte le domaine. On précise que si le corps de rentrée est convexe, un rayon optique issu d'un point de la paroi ne rencontre pas de condition limite de type paroi.

Lorsque le problème possède une géométrie axisymétrique, la symétrie du problème permet de réduire le domaine de calcul à une tranche du domaine d'écoulement. Cette tranche s'obtient à partir d'un maillage bidimensionnel, par rotation autour de l'axe de symétrie. Par exemple, la géométrie de la figure 3.4 correspond à la sonde FIRE II [29, 30, 55]. L'axe de symétrie est l'axe des abscisses x. Le maillage tridimensionnel utilisé pour le calcul de transfert radiatif est obtenu par rotation d'un angle $0,5°$ autour de l'axe de symétrie, dans les sens positif et négatif. Le domaine de calcul correspond donc à une tranche de $1°$ de la géométrie complète.

Dans le cas d'un calcul en configuration axisymétrique, une condition limite supplémentaire apparaît et nécessite un traitement particulier du lancer de rayons. Ce traitement concerne l'intersection d'un rayon optique avec l'une des deux faces latérales du domaine. Ces faces limites traduisent la symétrie du problème par rotation autour de l'axe de symétrie. Par conséquent, lorsqu'un rayon optique atteint une face limite de ce type, il subit une réflexion totale et spéculaire et revient dans le domaine de calcul.

3.3.3 La méthode de Monte-Carlo dans le code ASTRE

Le code de tranfert radiatif ASTRE (Approche Statistique des Transferts Radiatifs dans les Ecoulements) est un solveur de type Monte-Carlo. Il est développé depuis 1998 par l'ONERA avec la collaboration du laboratoire EM2C. Il est dédié à l'étude des transferts radiatifs dans des flammes turbulentes en présence de particules de suie [193, 195, 194].

Par définition de la méthode de Monte-Carlo - dont le nom fait allusion aux jeux de hasard pratiqués dans les casinos de Monte-Carlo - le code ASTRE utilise des techniques statistiques afin de calculer les grandeurs radiatives suivantes : la puissance volumique en tout point du milieu et le flux radiatif surfacique en tout point de la frontière du domaine.

La méthode consiste à simuler un très grand nombre de chemins optiques, statistiquement indépendants, caractérisés chacun par un nombre d'onde, un point de départ et une direction. Ces trois grandeurs sont tirées au sort selon des fonctions densité de probabilité appropriées. Un paquet de photons est transporté le long du rayon optique. L'énergie initiale du paquet de photons correspond à la puissance émise par la cellule de départ divisée par le nombre de paquets de photons partant de la cellule. Ce terme est traité de manière déterministe. Le long du rayon, l'énergie est progressivement absorbée. Le phénomène d'absorption est traité de manière déterministe également. La puissance absorbée par chaque cellule traversée par un chemin optique est calculée selon la loi de Beer [193]. Cette loi relie la puissance absorbée à la puissance incidente par l'intermédiaire de l'absorptivité. Un chemin optique est suivi jusqu'à ce que la valeur de la puissance transportée par le paquet de photons soit inférieure à une valeur seuil. Lorsque tous les chemins optiques ont été construits, les puissances volumiques et les flux pariétaux s'obtiennent en sommant les différentes contributions relatives à chaque chemin optique.

L'erreur introduite par la méthode numérique est d'origine purement statistique. Elle diminue lorsque le nombre de chemins optiques N augmente. La loi d'évolution de l'écart-type est en $1/\sqrt{N}$, ce qui correspond à une évolution relativement lente.

On décrit ci-dessous l'algorithme du code ASTRE. Cette description correspond à une utilisation avec un modèle de propriétés radiatives fournissant les coefficients d'absorption/émission du milieu. On précise qu'à l'origine, le code ASTRE n'est pas adapté à une utilisation avec un modèle de propriétés radiatives fournissant la transmittivité $\overline{\tau}$ du milieu dans l'approche ETL, comme c'est le cas par exemple du modèle MSBE développé par Rivière *et al.* [158].

La première étape de l'algorithme de calcul consiste à calculer la puissance émise par chaque élément de volume :

$$P^e = 4\pi V \int_0^\infty j_{\tilde{\nu}} \mathrm{d}\tilde{\nu} \tag{3.36}$$

et par chaque élément de surface :

$$P^e = \pi S \int_0^\infty \epsilon_{\tilde{\nu}} I^0_{\tilde{\nu}}(T) \mathrm{d}\tilde{\nu} \tag{3.37}$$

où V représente le volume de l'élément, S la surface de l'élément et $\epsilon_{\tilde{\nu}}$ l'émissivité monochromatique de l'élément de surface.

Dans un second temps, on détermine le nombre N_i de chemins optiques ayant pour point de départ un point de la cellule i. Ce nombre est pris soit égal pour toutes les cellules i, soit proportionnel à la puissance émise par la cellule.

L'étape suivante consiste en une double boucle sur toutes les cellules i - supposées homogènes, isothermes et aux propriétés radiatives isotropes - et sur tous les chemins optiques partant d'une cellule i. Le nombre d'onde, le point de départ et la direction initiale caractérisant le chemin optique, sont tirés au sort.

Le nombre d'onde $\tilde{\nu}_n$ se déduit d'un nombre $R_{\tilde{\nu}_n}$ tiré au hasard dans l'intervalle $[0, 1]$, suivant l'expression implicite :

$$R_{\tilde{\nu}_n} = \frac{\int_0^{\tilde{\nu}_n} j_{\tilde{\nu}} \mathrm{d}\tilde{\nu}}{\int_0^\infty j_{\tilde{\nu}} \mathrm{d}\tilde{\nu}} \tag{3.38}$$

pour un élément de volume, et suivant l'expression implicite :

$$R_{\tilde{\nu}_n} = \frac{\int_0^{\tilde{\nu}_n} \epsilon_{\tilde{\nu}} I^0_{\tilde{\nu}}(T) \mathrm{d}\tilde{\nu}}{\int_0^\infty \epsilon_{\tilde{\nu}} I^0_{\tilde{\nu}}(T) \mathrm{d}\tilde{\nu}} \tag{3.39}$$

pour un élément de surface.

Le point de départ du rayon optique est tiré au sort dans la cellule i, quelle que soit sa forme. Pour ce faire, la cellule est découpée en tétraèdres. Un tétraèdre est tiré au sort, selon une loi de probabilité pondérée par le volume. Ensuite, un point est tiré au hasard dans ce tétraèdre selon une loi de probabilité uniforme.

Enfin, la direction du rayon se détermine à l'aide de deux angles θ et ϕ générés aléatoirement. Ces angles s'expriment à partir de fonctions de deux paramètres indépendants R_θ et R_ϕ tirés dans l'intervalle $[0, 1]$ selon une loi de probabilité uniforme. Pour un élément de volume, les fonctions sont les suivantes :

$$\theta = \arccos(1 - 2R_\theta) \tag{3.40a}$$
$$\phi = 2\pi R_\phi \tag{3.40b}$$

Pour un élément de surface opaque à émissivité isotrope, elles s'écrivent :

$$\theta = \arccos(\sqrt{R_\theta}) \tag{3.41a}$$
$$\phi = 2\pi R_\phi \tag{3.41b}$$

Le chemin optique est ensuite construit pas à pas dans la direction déterminée. La puissance initialement transportée par le paquet de photons est égale à la puissance émise par la cellule de départ divisée par le nombre de chemins optiques partant de cette cellule, soit P_i^e/N_i. Dans chaque cellule j traversée par le rayon, une fraction de la puissance transportée est absorbée. Cette fraction est déposée dans la cellule absorbante. Elle s'exprime par la relation :

$$P_{ijn}^{ea} = \frac{P_i^e}{N_i} \tau_{\tilde{\nu}_n}(i \to j) \alpha_{j,\tilde{\nu}_n} \tag{3.42}$$

La transmittivité monochromatique entre les cellules i et j s'écrit à partir de l'équation (3.4) comme :

$$\tau_{\tilde{\nu}_n}(i \to j) = \exp\left(\sum_{k=i}^{j} -\kappa_{k,\tilde{\nu}_n} l_{kn}\right) \tag{3.43}$$

où l_{kn} désigne la longueur du chemin optique parcourue dans la cellule k.

Le terme $\alpha_{j,\tilde{\nu}_n}$ représente l'absorptivité de la cellule j :

$$\alpha_{j,\tilde{\nu}_n} = 1 - \exp(-\kappa_{j,\tilde{\nu}_n} l_{jn}) \tag{3.44}$$

Lorsque la puissance transportée devient inférieure à un certain seuil fixé par l'utilisateur, la puissance résiduelle est supposée totalement absorbée par la cellule suivante traversée.

En outre, lorsque le chemin optique rencontre une paroi, une fraction - égale à l'émissivité monochromatique pariétale - de la puissance transportée est absorbée par la paroi. Ceci revient à remplacer l'absorptivité du milieu $\alpha_{j,\tilde{\nu}_n}$ par l'émissivité de la paroi $\epsilon_{\tilde{\nu}_n}$ dans l'équation (3.42).

Lorsque tous les chemins optiques partant de toutes les cellules ont été construits, la dernière étape consiste à calculer la puissance radiative volumique dans chaque maille volumique j. Elle s'obtient par l'expression :

$$P_j^R = \frac{1}{V_j}\left(\sum_i \sum_{n=1}^{N_i} P_{ijn}^{ea} - P_j^e\right) \tag{3.45}$$

Le code ASTRE calcule les transferts radiatifs sur un domaine géométrique tridimensionnel. Le domaine est discrétisé à l'aide d'un maillage structuré ou non structuré. Lorsque le problème possède une géométrie axisymétrique, le domaine de calcul est réduit à une tranche du domaine. Cette tranche est obtenue à partir d'un maillage bidimensionnel par rotation autour de l'axe de symétrie, comme expliqué au paragraphe 3.3.2.

Outre la méthode de Monte-Carlo classique, nommée Forward Method (FM) et exposée ci-dessus, le solveur ASTRE dispose de deux autres approches basées sur le Principe de Réciprocité [195] : la méthode ERM (Emission-based Reciprocal Method) et la méthode ARM (Absorption-based Reciprocal Method). Dans ces dernières, la génération et la construction des chemins optiques sont identiques mais le chemin optique de la cellule i à la cellule j est utilisé pour calculer la puissance échangée entre les deux points, c'est-à-dire le transport d'énergie radiative dans les directions directe et inverse.

Dans la méthode ERM, la puissance radiative dans la cellule j est estimée par :

$$P_j^R = \frac{1}{V_j}\sum_i P_{ji}^{exch} = \frac{1}{V_j}\sum_i \sum_{n=1}^{N_i} P_{jin}^{ea}\left[\frac{I_{\tilde{\nu}_n}^0(T_i)}{I_{\tilde{\nu}_n}^0(T_j)} - 1\right] \tag{3.46}$$

où le terme P_{ji}^{exch} désigne la puissance échangée entre les cellules j et i.

Dans la méthode ARM, la puissance radiative dans la cellule j est estimée par :

$$P_j^R = \frac{1}{V_j} \sum_i -P_{ij}^{exch} \simeq \frac{1}{V_j} \sum_i \sum_{n=1}^{N_i} P_{ijn}^{ea} \frac{I_{\tilde{\nu}_n}^0 (T_j)}{I_{\tilde{\nu}_n}^0 (T_i)} \tag{3.47}$$

Le terme $-P_{ij}^{exch}$ utilisé dans la méthode ARM devient strictement égal au terme P_{ji}^{exch} utilisé dans la méthode ERM si et seulement si le nombre total de chemins optiques tend vers l'infini.

Il est intéressant de noter que les résultats des trois méthodes sont obtenus simultanément pour chaque calcul effectué avec le code ASTRE. Cette simultanéité n'implique pas de surcoût en temps de calcul par rapport à un calcul avec une seule méthode. En effet, les étapes initiales (calcul de la puissance émise dans chaque cellule, génération stochastique des points source, des directions initiales et des nombres d'onde) et la construction géométrique des chemins optiques sont communes aux trois méthodes et sont les étapes les plus longues en temps de calcul. En d'autres termes, les trois méthodes ne diffèrent que dans l'étape finale, pour laquelle le temps de calcul est négligeable.

Deuxième partie

Chapitre 4

Développement d'une plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement pour les écoulements de rentrée martienne

Dans ce chapitre, on s'intéresse à l'écoulement rencontré par le véhicule MSRO, du programme d'exploration Mars Premier, lors de sa rentrée dans l'atmosphère martienne. A l'avant, le véhicule est protégé par un bouclier thermique. A l'arrière, la charge utile est directement exposée à l'écoulement latéral et aval (sillage). Or, si le flux convectif est trop faible dans cette zone pour endommager la charge utile, il est nécessaire de vérifier que l'échauffement dû au rayonnement l'est également.

Le premier objectif est donc de développer une plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement adaptée aux écoulements de rentrée martienne. Cette plateforme comprend un solveur hydrodynamique, un modèle de propriétés radiatives adapté au rayonnement moléculaire rencontré autour de l'arrière-corps et une méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif. Le développement de la plateforme consiste à choisir, adapter et/ou développer chacune de ces trois modélisations et élaborer une stratégie pour les coupler.

Le second objectif consiste à simuler l'écoulement autour de l'arrière-corps d'une géométrie générique représentative de l'orbiteur MSRO. Ce cas d'épreuve est appelé TC3 [38]. On vérifie dans un premier temps la validité des modélisations implémentées dans la plateforme de calcul, puis on quantifie l'échauffement de la paroi par rayonnement et on le compare à la contribution d'origine convective.

Par ailleurs, des calculs menés par des scientifiques russes montrent que le rayonnement généré par l'écoulement de couche de choc est dominé par des mécanismes moléculaires. De ce fait, un modèle de propriétés radiatives adapté aux conditions d'écoulement de sillage pourrait également s'avérer intéressant au niveau de l'avant-corps. Par conséquent, nous proposons, comme troisième objectif, de tester la plateforme de calcul sur l'écoulement avant-corps du cas d'épreuve TC3 et de confronter nos résultats à ceux obtenus par les scientifiques russes.

4.1 Développement de la plateforme de calcul

Pour développer la plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement, la première étape consiste à définir la modélisation hydrodynamique, choisir un modèle de propriétés radiatives des gaz adapté aux applications en atmosphère martienne et sélectionner la méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif. La seconde étape consiste à adapter la méthode de résolution de l'ETR au modèle de propriétés radiatives retenu. La troisième étape consiste à définir la méthodologie numérique de couplage.

4.1.1 Choix des modèles

4.1.1.1 Modélisation hydrodynamique

On s'intéresse à des écoulements de rentrée dans l'atmosphère martienne à des vitesses modérées, de l'ordre de $5km/s$. L'écoulement est supposé à l'équilibre thermique et le gaz n'est pas ionisé. Le mélange gazeux se compose de cinq espèces : CO_2, CO, C, O et O_2. Le modèle cinq espèces est académique mais déjà intéressant pour étudier ce type de rentrée. A l'amont, on suppose que l'atmosphère martienne est un gaz pur de CO_2. Le modèle de cinétique chimique est défini par Charbonnier [38], sur la base des travaux de Park [152]. Il est présenté au chapitre 2 (§ 2.2.1).

La modélisation hydrodynamique et la méthode numérique associée sont présentées au chapitre 2. Les propriétés de transport s'obtiennent en supposant les nombres de Prandtl et de Lewis constants, égaux respectivement à $0,66$ et $1,0$. Le schéma numérique de calcul des flux de fluide parfait est de type HUS (§ 2.3.1.2).

4.1.1.2 Modèle de propriétés radiatives des gaz

On s'intéresse avant tout au rayonnement rencontré dans la zone de sillage du corps de rentrée. Dans cette zone, les molécules sont en grande partie recombinées. Par conséquent, le rayonnement provient essentiellement des mécanismes moléculaires des espèces CO et CO_2. Nous choisissons donc d'utiliser le Modèle Statistique à Bandes Etroites (MSBE) développé par Rivière *et al.* [186, 158] et présenté au chapitre 3 (§ 3.2.1). Le domaine de validité du modèle en terme de pression et de température est le suivant :

$$1Pa \leq p \leq 500Pa, \quad 1000K \leq T \leq 4000K$$

Le MSBE nécessite la donnée des fractions molaires des espèces CO et CO_2, de la pression et de la température du milieu. Il fournit en sortie la transmittivité du mélange moyennée sur une bande spectrale, pour $N_b = 464$ bandes de largeur $25cm^{-1}$ couvrant la plage spectrale $162,5cm^{-1} - 11762,5cm^{-1}$. Ce domaine couvre à la fois la plage $512,5cm^{-1} - 5162,5cm^{-1}$ de rayonnement du gaz, située dans le domaine infrarouge, et la plage d'émission de la paroi lorsque la température de celle-ci est comprise entre $400K$ et $1500K$ (d'après la loi de Wien (1.25)).

On rappelle que la transmittivité entre les abscisses s_1 et s_2 le long d'un chemin optique, moyennée sur la bande spectrale $k \in [1..N_b]$ de largeur $\Delta\tilde{\nu}_k$, s'écrit :

$$\overline{\tau}_{\tilde{\nu_k}}(s_1 \rightarrow s_2) = \prod_{m=1}^{2} \exp\left[-\beta_{eq,m} E\left(\frac{k_{eq,m} u_{eq,m}}{\beta_{eq,m}}\right)\right] \tag{4.1}$$

avec :

$$u_{eq,m} = \int_{s_1}^{s_2} p_m(s)\, ds \tag{4.2}$$

$$k_{eq,m} = \frac{1}{u_{eq,m}} \int_{s_1}^{s_2} p_m(s)\, \bar{k}_m(s)\, ds \tag{4.3}$$

$$\frac{1}{\beta_{eq,m}} = \frac{1}{k_{eq,m} u_{eq,m}} \int_{s_1}^{s_2} p_m(s)\, \frac{\bar{k}_m(s)}{\bar{\beta}_m(s)}\, ds \tag{4.4}$$

et :

$$E(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y e^{-\xi^2}}{1 + y e^{-\xi^2}}\, d\xi \tag{4.5}$$

Pour les deux espèces $m = CO$ et $m = CO_2$, les paramètres $\bar{k}_m$ et $\bar{\beta}_m$ sont tabulés en fonction de la bande spectrale et de la température [158]. Le terme p_m désigne la pression partielle de l'espèce moléculaire m.

4.1.1.3 Méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif

L'utilisation d'un modèle de propriétés radiatives approché permet, du point de vue du temps de calcul et de l'occupation mémoire, de choisir la méthode de Monte-Carlo implémentée dans le solveur ASTRE [193, 195, 194] et présentée au chapitre 3 (§ 3.3.3).

On rappelle que la méthode consiste à suivre des trajectoires probables de paquets de photons. Chaque paquet, d'indice n, transporte initialement une puissance égale à la puissance émise par la cellule de départ i divisée par le nombre de chemins optiques partant de cette cellule, soit P_i^e/N_i. La caractérisation du paquet de photons se fait de manière stochastique : le nombre d'onde, le point de départ et la direction de propagation initiale sont choisies aléatoirement. Au contraire, l'absorption est traitée de manière déterministe. Lorsque le paquet de photons traverse une cellule absorbante j, il dépose une partie de son énergie suivant la loi de Beer.

A l'issue de la construction de tous les chemins optiques, la puissance radiative volumique dans chaque maille j de volume V_j s'obtient par la relation :

$$P_j^R = \frac{1}{V_j} \left(\sum_i \sum_{n=1}^{N_i} \frac{P_i^e}{N_i} \tau_{\tilde{\nu}_n}(i \to j) \left[1 - \exp(-\kappa_{j,\tilde{\nu}_n} l_{jn})\right] - P_j^e \right) \tag{4.6}$$

$$= \frac{1}{V_j} \left(\sum_i \sum_{n=1}^{N_i} P_{ijn}^{ea} - P_j^e \right) \tag{4.7}$$

où le terme l_{jn} désigne la longueur parcourue dans la cellule j par le $n^{ème}$ paquet de photons et $\kappa_{j,\tilde{\nu}_n}$ le coefficient d'absorption du milieu au nombre d'onde $\tilde{\nu}_n$. Le terme P_{ijn}^{ea} désigne la fraction de la puissance émise par la cellule i, transportée le long du $n^{ème}$ chemin et absorbée dans la cellule j. Cette expression de la puissance radiative est valable dans l'hypothèse où un chemin optique ne traverse qu'une seule fois une maille, c'est-à-dire si le milieu est non diffusant et si les frontières ne sont pas réfléchissantes. Par ailleurs, elle correspond à la formulation classique de la méthode de Monte-Carlo, appelée Forward Method (FM). Pour les méthodes ERM et ARM, qui utilisent le principe de réciprocité, l'expression de la puissance radiative est modifiée. Le lecteur est invité à se reporter au chapitre 3 (§ 3.3.3) pour le détail des expressions de la puissance radiative dans le cadre des méthodes réciproques.

L'équation (4.6) fait intervenir le coefficient d'absorption du gaz $\kappa_{j,\tilde{\nu}_n}$ car la méthode implémentée dans le solveur ASTRE a été initialement développée pour une utilisation avec des modèles de propriétés radiatives formulés en coefficient d'absorption. Or, le modèle MSBE ne fournit que la transmittivité du milieu. Il est donc nécessaire d'adapter le code ASTRE au modèle de propriétés radiatives MSBE.

4.1.2 Adaptation du code ASTRE au modèle de propriétés radiatives MSBE

Pour rendre le solveur ASTRE compatible avec le modèle MSBE, on doit exprimer la puissance radiative en fonction de la transmittivité du gaz.

Dans le code ASTRE, la puissance radiative dans une maille j s'obtient par l'équation (4.7), c'est-à-dire par la donnée de deux grandeurs : la puissance P_j^e émise par la maille j et la puissance P_{ijn}^{ea} émise par une maille i et absorbée par la maille j. On exprime ci-dessous chacune de ces deux grandeurs dans le cadre du modèle MSBE.

Dans l'hypothèse où la fonction de Planck est constante sur chaque bande spectrale k de largeur $\Delta\tilde{\nu}_k$ et égale à la valeur au centre $\tilde{\nu}_k$ de la bande, la puissance émise par un élément de volume s'écrit :

$$P_i^e \;=\; 4\pi V_i \sum_{k=1}^{N_b} \overline{\kappa}_{i,\tilde{\nu}_k}\, I^0_{\tilde{\nu}_k}\left(T_i\right)\, \Delta\tilde{\nu}_k \tag{4.8}$$

La puissance émise par un élément de surface s'écrit :

$$P_i^e \;=\; \pi S_i \sum_{k=1}^{N_b} \epsilon_{i,\tilde{\nu}_k} I^0_{\tilde{\nu}_k}\left(T_i\right)\, \Delta\tilde{\nu}_k \tag{4.9}$$

Dans ces expressions, le terme $\overline{\kappa}_{i,\tilde{\nu}_k}$ désigne le coefficient d'absorption moyenné sur la bande spectrale d'indice k. Il s'obtient à l'aide du paramètre $\bar{k}_m$ du modèle MSBE :

$$\overline{\kappa}_{i,\tilde{\nu}_k} = \sum_{m=1}^{2} p_{m,i} \bar{k}_m(T_i) \tag{4.10}$$

où l'indice m fait référence aux espèces moléculaires CO et CO_2.

Pour exprimer la fraction de puissance transportée le long du chemin optique n depuis la cellule i et absorbée par la cellule j, on distingue quatre cas. On donne le raisonnement seulement pour le premier cas, des raisonnements analogues aboutiraient aux formules données pour les trois autres cas.

1. Dans le premier cas, les cellules i et j sont des cellules volumiques. On se place dans l'hypothèse où un chemin optique ne traverse qu'une fois la maille j. L'extension au cas de frontières réfléchissantes ne pose pas de difficulté.

   Soit un chemin optique sur lequel on repère quatre points d'abscisses s, $s+\delta s$, s' et $s'+\delta s'$.

Dans le cas monochromatique, la puissance émise par la colonne δs vaut :

$$I^0_{\tilde{\nu}}(s)\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s\rightarrow s+\delta s)\right] \tag{4.11}$$

La puissance émise par la colonne δs et transmise en s' vaut :

$$I^0_{\tilde{\nu}}(s)\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s\rightarrow s+\delta s)\right]\tau_{\tilde{\nu}}(s+\delta s\rightarrow s') \tag{4.12}$$

La puissance émise par la colonne δs et absorbée par la colonne $\delta s'$ vaut :

$$I^0_{\tilde{\nu}}(s)\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s\rightarrow s+\delta s)\right]\tau_{\tilde{\nu}}(s+\delta s\rightarrow s')\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s'\rightarrow s'+\delta s')\right] \tag{4.13}$$

Moyennée sur une bande spectrale d'indice k, la puissance émise par la colonne δs vaut :

$$\overline{I^0_{\tilde{\nu}}(s)\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s\rightarrow s+\delta s)\right]} = I^0_{\tilde{\nu}_k}(s)\left[1-\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_k}(s\rightarrow s+\delta s)\right] \tag{4.14}$$

En choisissant la longueur δs suffisamment petite (en pratique $10^{-6}m$) pour se placer dans le régime d'absorption faible, l'approximation suivante est vérifiée :

$$1-\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_k}(s\rightarrow s+\delta s)\simeq\overline{\kappa}_{\tilde{\nu}_k}\delta s \tag{4.15}$$

La puissance émise par la colonne δs et absorbée par la colonne $\delta s'$ vaut :

$$\begin{aligned}
&\overline{I^0_{\tilde{\nu}}(s)\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s\rightarrow s+\delta s)\right]\tau_{\tilde{\nu}}(s+\delta s\rightarrow s')\left[1-\tau_{\tilde{\nu}}(s'\rightarrow s'+\delta s')\right]}\\
= \quad & I^0_{\tilde{\nu}_k}(s)\left[\overline{\tau_{\tilde{\nu}}(s+\delta s\rightarrow s')-\tau_{\tilde{\nu}}(s\rightarrow s')}\right]\left[\overline{1-\tau_{\tilde{\nu}}(s'\rightarrow s'+\delta s')}\right]\\
= \quad & I^0_{\tilde{\nu}_k}(s)\left[\left(\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_k}(s+\delta s\rightarrow s')-\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_k}(s\rightarrow s')\right)\right.\\
& \left.-\left(\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_k}(s+\delta s\rightarrow s'+\delta s')-\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_k}(s\rightarrow s'+\delta s')\right)\right]\\
= \quad & I^0_{\tilde{\nu}_k}(s)\Delta^4\overline{\tau}
\end{aligned} \tag{4.16}$$

On remarque que la différence des quatre transmittivités notée $\Delta^4\overline{\tau}$ correspond au terme $\dfrac{\partial^2\tau_{\tilde{\nu}}\,(s'\rightarrow s)}{\partial s'\,\partial s}$ de l'équation (3.10).

La fraction de la puissance partant de la colonne δs, transmise en s' et absorbée dans la colonne $\delta s'$ vaut alors :

$$\frac{I^0_{\tilde{\nu}_k}(s)\Delta^4\overline{\tau}}{I^0_{\tilde{\nu}_k}(s)\overline{\kappa}_{\tilde{\nu}_k}\delta s}=\frac{\Delta^4\overline{\tau}}{\overline{\kappa}_{\tilde{\nu}_k}\delta s} \tag{4.17}$$

Finalement, dans le code ASTRE, le terme P^{ea}_{ijn} s'exprime en multipliant l'expression ci-dessus par la puissance initialement transportée par le paquet de photons, soit, en utilisant des notations adaptées :

$$\begin{aligned}
P^{ea}_{ijn} = \frac{P^e_i}{N_i}\Bigg[& \frac{\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}(B_n+\delta s\rightarrow F_{j,n})-\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}(B_n\rightarrow F_{j,n})}{\overline{\kappa}_{i,\tilde{\nu}_{k_n}}\,\delta s}\\
- & \frac{\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}(B_n+\delta s\rightarrow F_{j+1,n})-\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}(B_n\rightarrow F_{j+1,n})}{\overline{\kappa}_{i,\tilde{\nu}_{k_n}}\,\delta s}\Bigg]
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Le terme $F_{j,n}$ désigne le point d'entrée du rayon n dans la cellule j et B_n le point de départ dans la cellule i du rayon n. L'indice k_n fait référence à la bande spectrale associée au chemin optique n. Le terme δs désigne la longueur d'une colonne élémentaire contenue dans la cellule source i. La transmittivité entre le point B_n et le point $F_{j+1,n}$ s'écrit :

$$\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}\left(B_n \rightarrow F_{j+1,n}\right) = \prod_{m=1}^{2} \exp\left[-\beta_{eq,m} E\left(\frac{k_{eq,m}\, u_{eq,m}}{\beta_{eq,m}}\right)\right] \prod_{h=1}^{N_r}\left(1 - \epsilon_{h,\tilde{\nu}_{k_n}}\right) \tag{4.19}$$

avec :

$$k_{eq,m}\, u_{eq,m} = \sum_{k=i}^{j} p_{m,k}\, \bar{k}_m\left(T_k\right)\, l_{kn} \tag{4.20}$$

$$\frac{k_{eq,m}\, u_{eq,m}}{\beta_{eq,m}} = \sum_{k=i}^{j} p_{m,k}\, \frac{\bar{k}_m\left(T_k\right)}{\bar{\beta}_m\left(T_k\right)}\, l_{kn} \tag{4.21}$$

Le terme N_r désigne le nombre de réflexions sur les parois le long du chemin optique, $\epsilon_{h,\tilde{\nu}_{k_n}}$ l'émissivité de la paroi à l'origine de la $h^{ème}$ réflexion et l_{kn} la distance parcourue par le chemin optique n dans la cellule k.

2. Si la cellule j est un élément de surface, une fraction $\epsilon_{j,\tilde{\nu}_{k_n}}$ de la puissance transportée est absorbée par la paroi et la puissance P^{ea}_{ijn} devient :

$$P^{ea}_{ijn} = \frac{P^e_i}{N_i} \frac{\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}\left(B_n + \delta s \rightarrow F_{j,n}\right) - \overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}\left(B_n \rightarrow F_{j,n}\right)}{\overline{\kappa}_{i\,,\tilde{\nu}_{k_n}}\, \delta s} \epsilon_{j,\tilde{\nu}_{k_n}} \tag{4.22}$$

3. Si la cellule source i est un élément de surface et la cellule absorbante j un élément de volume, le terme P^{ea}_{ijn} s'écrit :

$$P^{ea}_{ijn} = \frac{P^e_i}{N_i}\left[\overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}\left(B_n \rightarrow F_{j,n}\right) - \overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}\left(B_n \rightarrow F_{j+1,n}\right)\right] \tag{4.23}$$

4. Enfin, si les cellules i et j sont toutes deux des éléments de surface, la puissance P^{ea}_{ijn} s'écrit :

$$P^{ea}_{ijn} = \frac{P^e_i}{N_i} \overline{\tau}_{\tilde{\nu}_{k_n}}\left(B_n \rightarrow F_{j,n}\right)\, \epsilon_{j,\tilde{\nu}_{k_n}} \tag{4.24}$$

4.1.3 Elaboration de la stratégie de couplage

Le rayonnement agit sur le champ hydrodynamique (§ 1.1.3.2). Du point de vue de la modélisation, il modifie le bilan énergétique, l'occupation des niveaux excités des particules ainsi que le bilan de masse des espèces chimiques (§ 1.2.3).

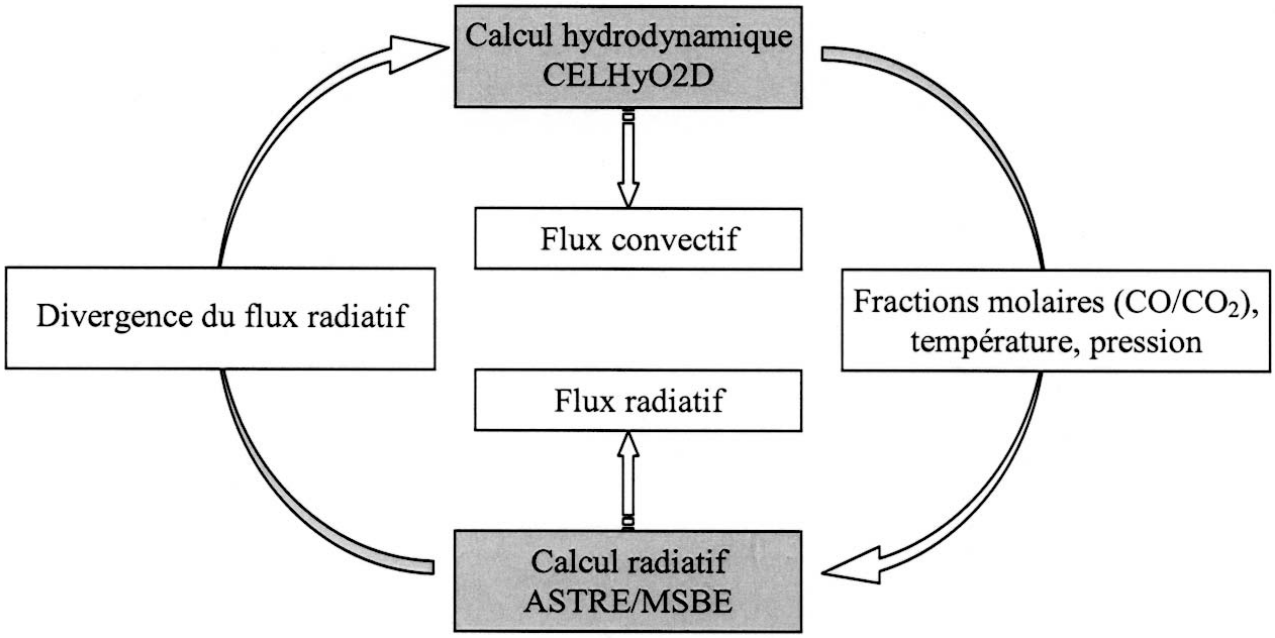
Dans notre étude, on ne tient compte que de l'effet radiatif sur le bilan d'énergie totale. En effet, on se place dans l'hypothèse de l'équilibre thermique. Ceci revient à supposer que le peuplement des modes d'énergie des particules suit une distribution de Boltzmann à la température T du milieu. Cette modélisation n'est donc pas adaptée à la prise en compte du déséquilibre de l'occupation des niveaux excités.

De plus, tenir compte de l'effet radiatif dans les équations de bilan de masse des espèces chimiques nécessite le développement de modèles de type collisionnel-radiatif (§ 1.2.3). Cet effet n'est pas pris en compte dans notre étude.

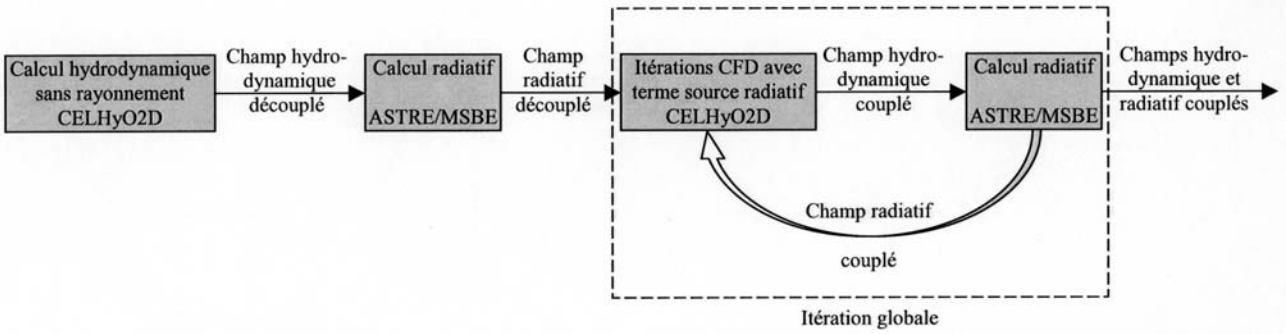
Par conséquent, le couplage entre le champ de rayonnement et le champ hydrodynamique se traduit par un terme source uniquement dans l'équation de bilan d'énergie totale (§ 2.1). Ce terme correspond à la puissance radiative qui s'exprime, au signe près, comme la divergence du flux radiatif : $P^R = -\nabla.\mathbf{q}^R$.

D'un point de vue numérique, on traite le couplage hydrodynamique/rayonnement par l'approche faiblement couplée illustrée sur la figure 4.1.

Dans un premier temps, on calcule le champ hydrodynamique sans tenir compte des effets radiatifs. Le calcul est mené jusqu'à convergence. A l'issue de cette étape, on dispose du champ hydrodynamique découplé. On calcule alors le champ de rayonnement à l'aide du solveur ASTRE et du modèle MSBE. Ce champ est le champ radiatif découplé. Ensuite, on procède à de nouvelles itérations CFD, mais cette fois la contribution radiative est prise en compte. Le terme source est introduit de manière explicite dans l'équation de bilan d'énergie totale.



(a) **Plateforme de calcul**



(b) **Séquence de calcul couplé**

Fig. 4.1: Méthodologie de couplage faible pour les écoulements de rentrée martienne

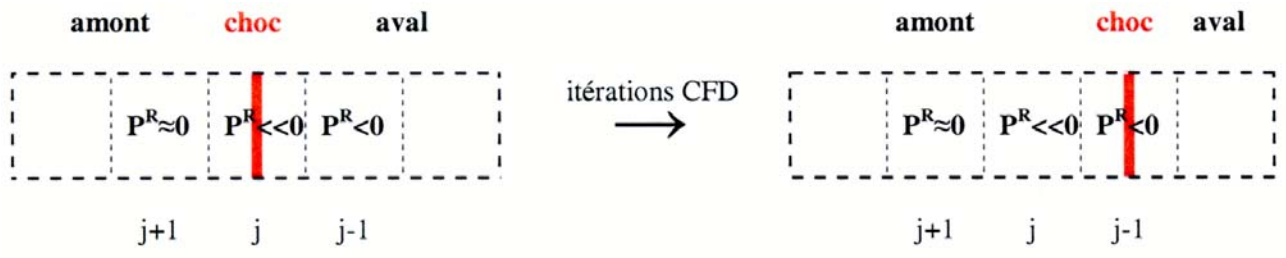


Fig. 4.2: Illustration du déplacement du choc d'une cellule vers l'aval au cours des itérations CFD entre deux calculs radiatifs, et de l'incompatibilité entre le champ hydrodynamique et le champ de puissance radiative P^R qui en résulte dans la cellule j

On définit une itération globale comme un ensemble de plusieurs itérations CFD (typiquement mille itérations) suivies par un calcul radiatif pour mettre à jour le champ de rayonnement (figure 4.1(b)). La convergence du processus de couplage est atteinte après plusieurs itérations globales, lorsque les résidus CFD sont constants et lorsque le champ de rayonnement ne varie plus d'un calcul radiatif à un autre.

Pour favoriser la convergence, on utilise des techniques proposées par Hartung *et al.* [90].

Ainsi, le terme source radiatif est mis à zéro dans les zones où la température est inférieure à $350K$. Ceci permet d'éviter une incompatibilité entre le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement dans la région de choc. En effet, la région de choc est fortement émissive car la température y est élevée. La valeur de la puissance radiative est donc importante dans cette zone. Or, entre deux calculs radiatifs, il est possible qu'au cours des itérations CFD, le choc se déplace vers l'aval. Dans ce cas, la cellule qui contenait initialement l'onde de choc voit sa température décroître jusqu'à une valeur proche de la température à l'infini amont. Cependant, le champ de rayonnement n'ayant pas été mis à jour, le terme source radiatif dans la cellule est très élevé alors qu'il devrait être proche de zéro. Il y a donc incompatibilité entre le terme source radiatif et les conditions thermodynamiques dans la cellule, comme illustré sur la figure 4.2. L'incompatibilité est levée en mettant à zéro le terme source.

On utilise également le procédé de sous-relaxation proposé par Hartung *et al.* [90] pour stabiliser et accélérer la convergence. Dans chaque cellule, le terme source radiatif s'obtient en combinant la puissance radiative à l'itération globale n et la valeur à l'itération précédente $n-1$, selon la relation :

$$(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^{n'} = d_q(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^{n-1} + (1-d_q)(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^n \tag{4.25}$$

Dans notre étude, le facteur de relaxation d_q est égal à $0,5$.

4.2 Description du cas d'épreuve TC3 et de la méthode de calcul du champ hydrodynamique découplé

Dans cette partie, on présente le cas d'épreuve de rentrée martienne ainsi que la méthode de calcul du champ hydrodynamique. Ce calcul s'opère en deux temps : on calcule d'abord l'écoulement autour de l'avant-corps (bouclier thermique) puis autour de l'arrière-corps (charge utile). On présente les deux maillages de calcul puis le champ hydrodynamique découplé ainsi obtenu, dont on vérifie la validité en le comparant à d'autres résultats numériques.

4.2.1 Description du cas d'épreuve TC3

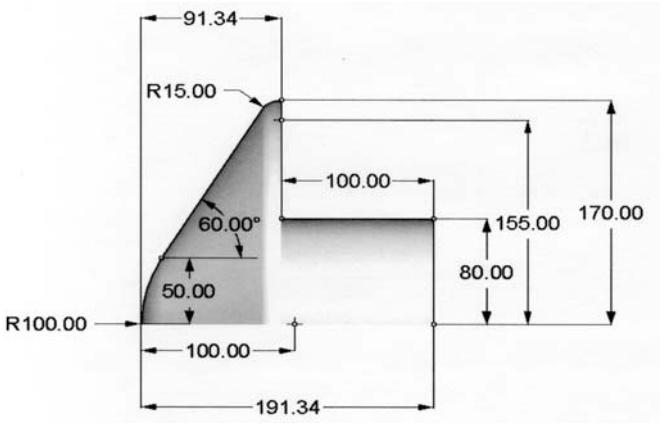
Le cas d'épreuve TC3 [38] est un véhicule générique axisymétrique (figure 4.3). Il s'agit d'un modèle simplifié du véhicule Mars Sample Return Orbiter (MSRO).

Le cas d'épreuve TC3 a été défini dans le cadre d'un groupe de travail piloté par l'ESA et le CNES et dédié à l'étude du rayonnement dans les écoulements de gaz à haute température. Le groupe de travail s'est réuni au cours de sessions de travail, une première fois à Lisbonne (Portugal) en 2003, une seconde fois à Porquerolles (France) en 2004 et dernièrement à Rome (Italie) en 2006. Nous avons contribué à ce groupe de travail au nom de l'ONERA. Parmi les autres participants, on peut citer par exemple l'Ecole Centrale de Paris (France), l'IUSTI (France), le laboratoire d'Aérothermique d'Orléans (France), le CNES (France), le VKI (Belgique), le KAIST (Corée), Fluid Gravity Engineering (Royaume-Uni), l'IPMech RAS (Russie), le NiiMech (Russie), l'ESA/ESTEC (Pays-Bas) ou encore l'IRS (Allemagne).

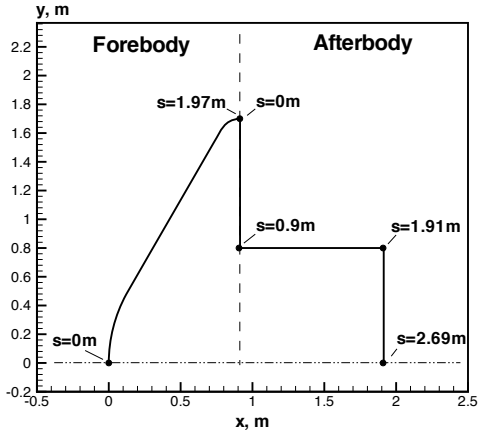
La géométrie du cas d'épreuve TC3 se décompose en deux parties (figure 4.3(b)). La partie avant-corps de la géométrie correspond au bouclier thermique. On repère l'abscisse curviligne s ayant pour origine le point d'arrêt. Elle vaut $s = 1,97m$ au niveau de l'épaulement du bouclier.

La partie arrière-corps correspond à la face arrière du bouclier thermique et à la charge utile. Cette dernière est modélisée par un cylindre. On repère une nouvelle origine pour l'abscisse curviligne s le long de la paroi de l'arrière-corps, située au niveau de l'épaulement du bouclier thermique. La face arrière du bouclier s'étend de l'abscisse $s = 0m$ à l'abscisse $s = 0,9m$, la génératrice du cylindre de l'abscisse $s = 0,9m$ à l'abscisse $s = 1,91m$ et le culot de l'abscisse $s = 1,91m$ à l'abscisse $s = 2,69m$.

La vitesse de l'écoulement amont est de $5223m/s$. Les température et pression amont sont égales à $140K$ et $7,87Pa$. On suppose que la paroi est non-catalytique et qu'elle se comporte comme un corps noir. Sa température vaut $1500K$ au niveau du bouclier thermique et $500K$ sur le reste du véhicule.



(a) **Cotes en centimètres**



(b) **Définition des abscisses curvilignes pour l'avant-corps et l'arrière-corps**

Fig. 4.3: Description géométrique du cas d'épreuve TC3

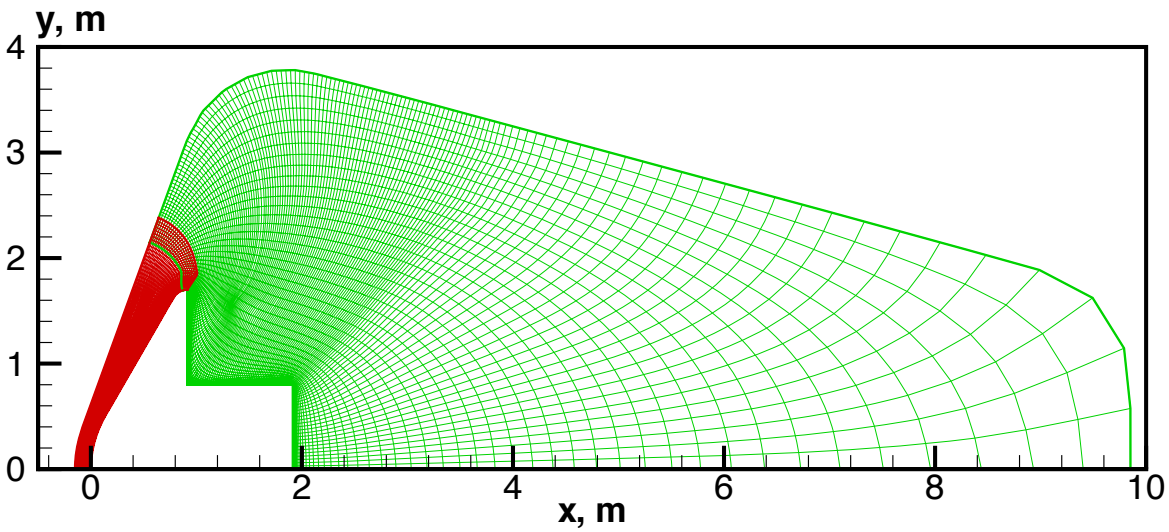
4.2.2 Description des maillages de calcul

Rouzaud *et al.* [162] ont défini deux maillages de calcul, présentés sur la figure 4.4(a). Le premier maillage porte sur la partie avant-corps uniquement. Il contient 98 mailles dans la direction normale à la paroi et 65 mailles dans la direction longitudinale. Il est raffiné au niveau de la paroi (figure 4.4(b)). La taille de première maille est de $10^{-6}m$ dans la direction normale et $0,0188m$ dans la direction longitudinale.

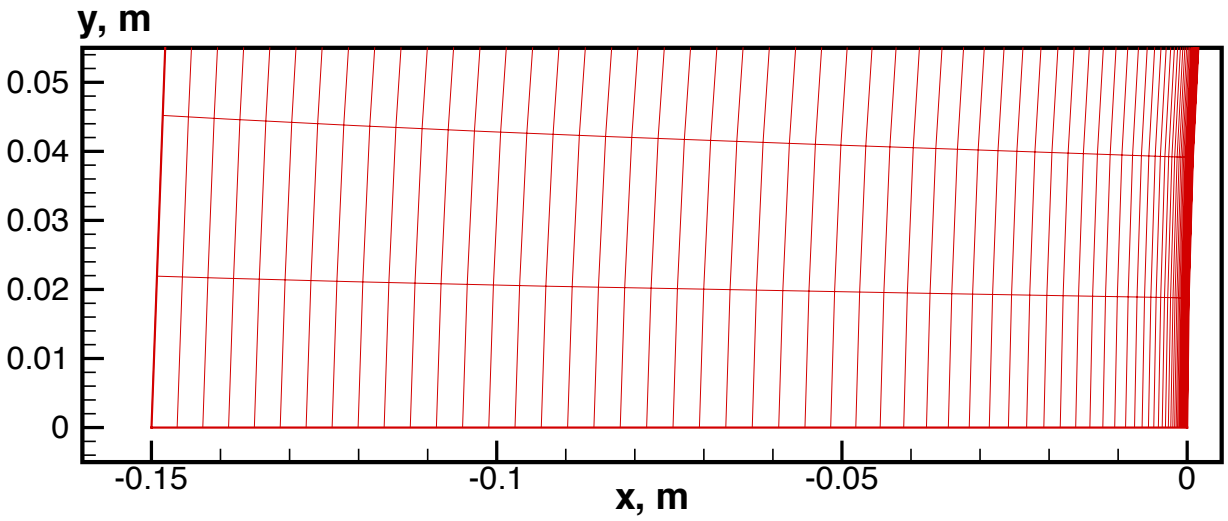
Le second maillage porte sur la partie arrière-corps uniquement. Il contient 137 mailles le long de la paroi et 98 dans la direction normale.

Les deux maillages contiennent huit rangées de cellules communes, situées au niveau de l'épaulement du bouclier thermique.

Dans la suite, ces deux maillages sont référencés comme les "maillages ONERA".



(a) **Maillages avant-corps (rouge) et arrière-corps (vert)**



(b) **Maillage avant-corps, zoom sur la région d'arrêt**

Fig. 4.4: Cas d'épreuve TC3, maillages de calcul ONERA

4.2.3 Description de la méthode de calcul du champ hydrodynamique découplé

La construction des deux maillages a permis à Rouzaud *et al.* [162] de mener le calcul hydrodynamique en deux temps. Dans un premier temps, les auteurs ont calculé le champ hydrodynamique autour de l'avant-corps. La convergence est atteinte au bout de 200000 itérations. Le nombre CFL en fin de calcul est égal à 5.

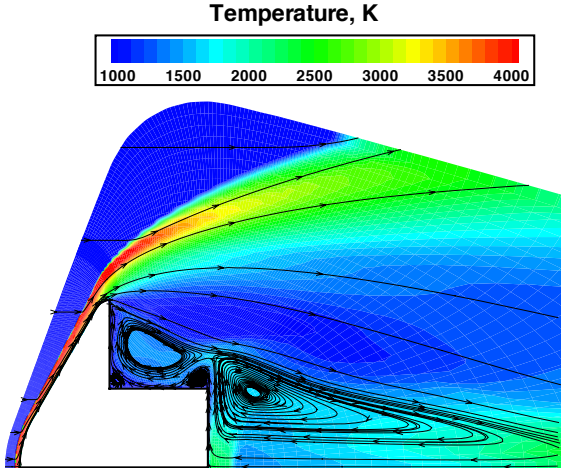
Dans un deuxième temps, Rouzaud *et al.* [162] ont calculé le champ hydrodynamique autour de l'arrière-corps. Dans les huit rangées de cellules communes aux deux maillages, les variables sont prises égales à la solution obtenue à l'issue du calcul avant-corps. La convergence est atteinte après 30000 itérations.

On présente sur la figure 4.5 le champ hydrodynamique découplé. La figure 4.5(a) présente le champ de température. La température varie entre $140K$ et $7200K$. Dans la majeure partie de l'écoulement autour de l'arrière-corps, la température ne sort pas du domaine de validité du modèle de propriétés radiatives MSBE, soit $1000K - 4000K$.

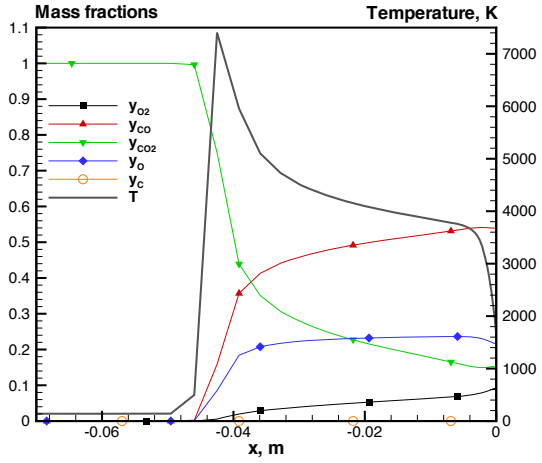
La figure 4.5(a) présente également les lignes de courant. Elle met ainsi en évidence deux zones de recirculation importantes : l'une derrière le bouclier thermique et l'autre derrière le culot.

La figure 4.5(b) présente les distributions de fraction massique et de température le long de la ligne d'arrêt. Le choc est positionné à $42mm$ de la paroi. A la traversée de l'onde de choc, la température croît jusqu'à $7200K$ et les molécules de CO_2 se dissocient à 80% pour former les espèces CO, O et O_2. La fraction d'atome C est est quasiment nulle dans la couche de choc.

La figure 4.5(c) présente le champ de pression. La pression varie de $8Pa$ à $8000Pa$ dans l'écoulement. De même que pour la température, on vérifie que, dans la majeure partie de l'écoulement autour de l'arrière-corps, la pression reste dans les limites de validité du modèle MSBE, soit $1Pa - 500Pa$. Dans le choc, au niveau de l'arrière-corps, la pression ne dépasse pas $2500Pa$.



(a) **Champ de température et lignes de courant**

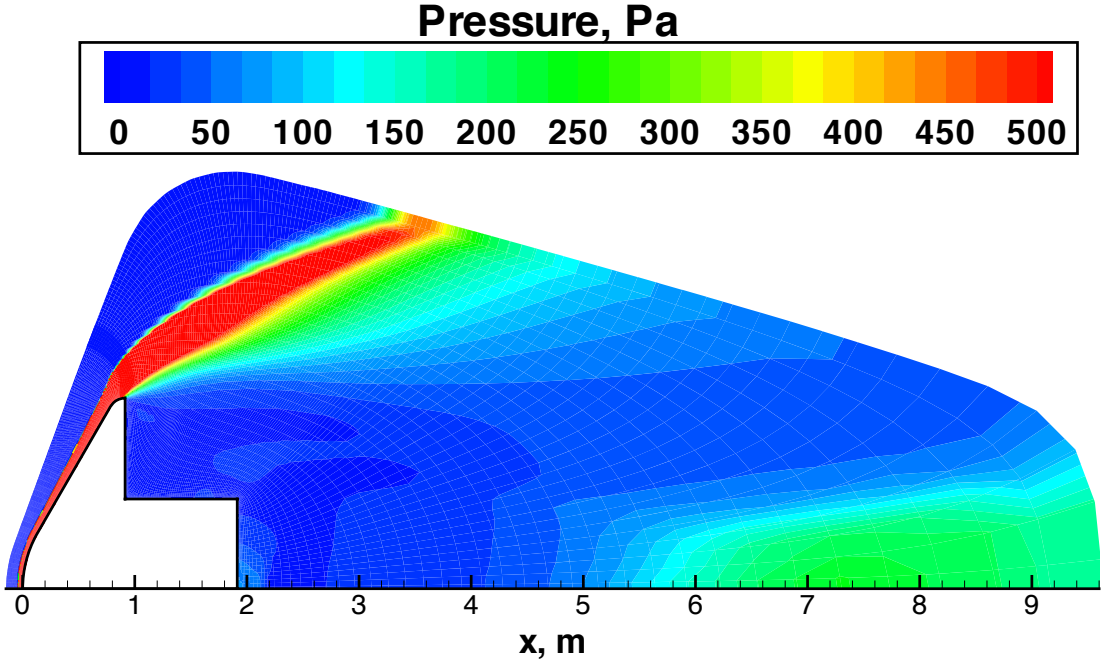


(b) **Fractions massiques et température le long de la ligne d'arrêt**

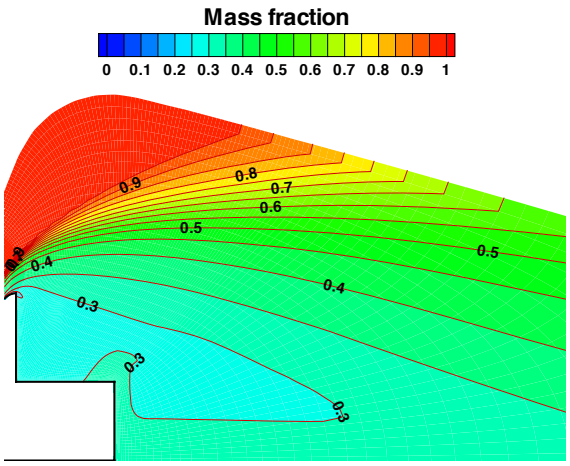
Fig. 4.5: Cas d'épreuve TC3, champ hydrodynamique découplé ONERA, partie 1/2

Les figures 4.5(d) et 4.5(e) présentent les champs de fraction massique des espèces CO_2 et CO au niveau de l'arrière-corps. Dans le sillage, le mélange gazeux se compose d'au moins 30% de molécules de dioxyde de carbone et 45% de molécules de monoxyde de carbone. Ces espèces chimiques correspondent aux espèces prises en compte dans le modèle MSBE. On vérifie ainsi que ce sont bien les espèces majoritairement présentes dans l'écoulement autour de l'arrière-corps. Les autres espèces prépondérantes sont les atomes d'oxygène, à hauteur de 15%, et les molécules de dioxygène, à hauteur de 10%.

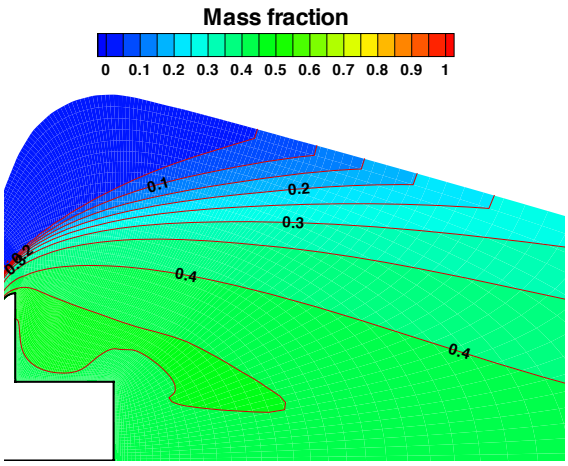
Dans la suite, le champ hydrodynamique découplé décrit ci-dessus est référencé comme le "champ hydrodynamique ONERA".



(c) **Champ de pression**



(d) **Champ de fraction massique du dioxyde de carbone CO_2**



(e) **Champ de fraction massique du monoxyde de carbone CO**

Fig. 4.5: Cas d'épreuve TC3, champ hydrodynamique découplé ONERA, partie 2/2

4.2.4 Comparaison du champ hydrodynamique découplé avec d'autres résultats numériques

Afin d'évaluer la qualité du champ hydrodynamique ONERA, on le compare aux résultats publiés dans la littérature. Ces derniers correspondent aux différentes contributions apportées dans le cadre du groupe de travail européen [37, 143]. Ils proviennent des laboratoires NiiMech (Russie), VKI (Belgique), ESA/ESTEC (Pays-Bas), IPMech RAS (Russie) et de la société RTech (France).

Les paramètres de calcul pouvant influer sur le résultat sont la méthode numérique et le maillage. Les laboratoires VKI et ESTEC ont utilisé les maillages monodomaines ONERA. Les laboratoires NiiMech et IPMech RAS ont employé chacun leur propre maillage multidomaine. La société RTech a utilisé les maillages monodomaines ONERA ainsi qu'un maillage multidomaine propre. Pour tous les résultats présentés, la condition de catalycité de paroi, le modèle chimique et les conditions aux limites sont identiques et conformes à ceux que Rouzaud *et al.* [162] ont employés, à l'exception de l'ESTEC qui a utilisé un modèle de cinétique chimique propre et du laboratoire NiiMech qui a utilisé un modèle chimique plus complet, incluant notamment les espèces N_2 et Ar dans la composition chimique de l'atmosphère amont. On rappelle que dans tous les cas, NiiMech mis à part, l'atmosphère amont est composée uniquement de dioxyde de carbone et que le modèle chimique se compose des cinq espèces : CO_2, CO, C, O et O_2.

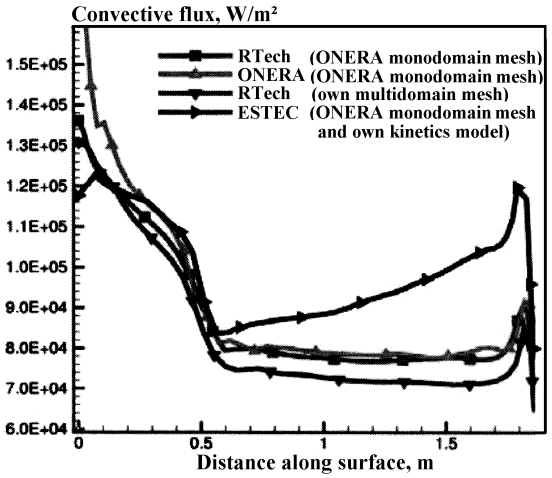
Les figures 4.6(a) et 4.6(b) présentent l'évolution du flux de chaleur le long de l'avant-corps. Elles sont tirées de Omaly *et al.* [143]. Les auteurs constatent que la plupart des codes hydrodynamiques ne parviennent pas à capturer correctement le choc et conduisent à des comportements erratiques au niveau du point d'arrêt. En conséquence, on observe un surflux local dans la zone d'arrêt, représentatif d'un problème de type carbuncle.

Rouzaud *et al.* [162] ont montré qu'il est possible de pallier cette instabilité numérique en raffinant le maillage ONERA dans la région de choc et en allongeant les mailles dans la direction longitudinale. Cette distribution permet de mieux aligner le maillage avec le choc. Le maillage raffiné contient 25 points le long de la paroi et 88 points dans la direction normale. La figure 4.7(a) montre la distribution des points de maillage dans la région d'arrêt, le maillage initial étant présenté sur la figure 4.4(b). Sur la figure 4.7(b) compare les distributions de flux convectif données par le maillage ONERA et le maillage raffiné. Dans la région d'arrêt, on n'observe plus le surflux, signe que le maillage raffiné capture correctement le choc. L'échauffement convectif au point d'arrêt décroît d'environ 30% pour atteindre la valeur de $120 kW/m^2$.

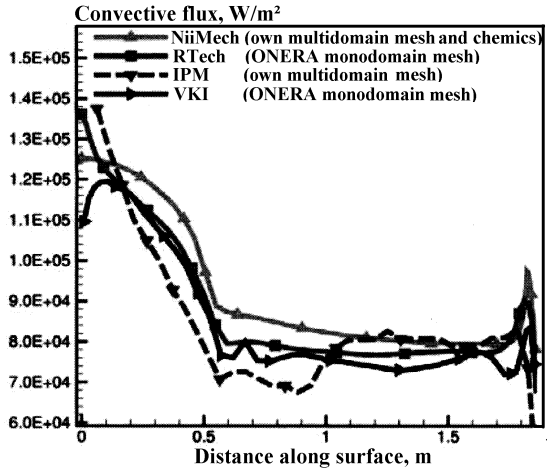
La figure 4.6(c) présente l'évolution du flux de chaleur convectif le long de l'arrière-corps. Les trois contributions sont obtenues avec trois maillages distincts. L'étude de convergence en maillage réalisée par Dieudonné *et al.* [60] a mis en évidence deux effets du raffinement de maillage sur les résultats.

D'une part, la vorticité de l'écoulement augmente, ce qui affecte la topologie de l'écoulement au niveau des zones de recirculation et accroît le niveau de flux convectif. Or la figure 4.6(c) montre que les niveaux de flux sont proches pour les trois contributions. L'analyse de Dieudonné *et al.* [60] tend donc à prouver que les trois maillages - dont le maillage ONERA - permettent de capter correctement l'écoulement dans cette région.

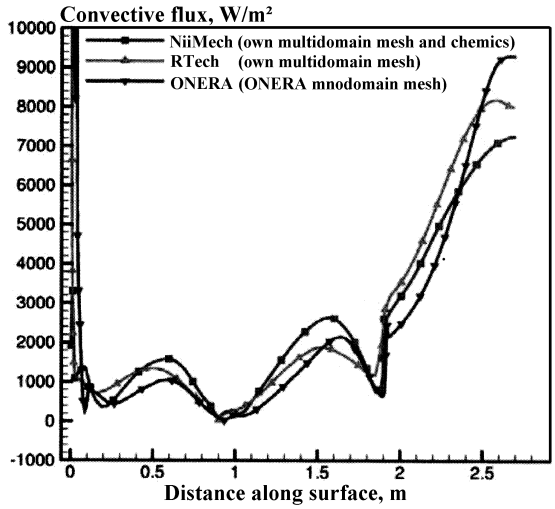
D'autre part, la position du point de fermeture de l'écoulement varie avec le maillage. Ce point, situé dans la région de sillage, est le point où les lignes de courant deviennent parallèles à l'axe de symétrie du problème. Il correspond à un pic de température et de pression, visible sur la figure 4.5(c) à l'abscisse $x = 7,3m$. Pour illustrer l'effet du maillage sur la position du point de fermeture, on compare le champ hydrodynamique ONERA au champ hydrodynamique



(a) **Avant-corps**

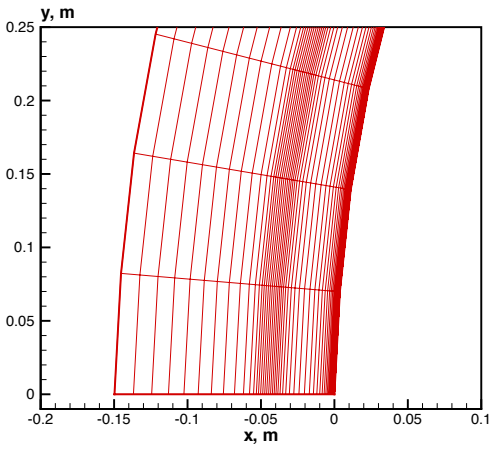


(b) **Avant-corps**

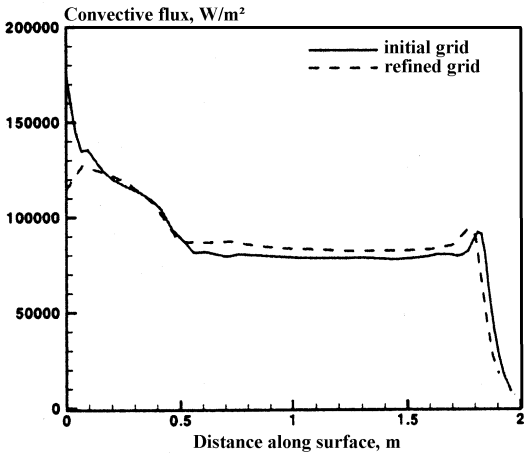


(c) **Arrière-corps**

Fig. 4.6: Flux de chaleur convectif le long du bouclier thermique, Omaly *et al.* [143]



(a) **Maillage avant-corps raffiné**



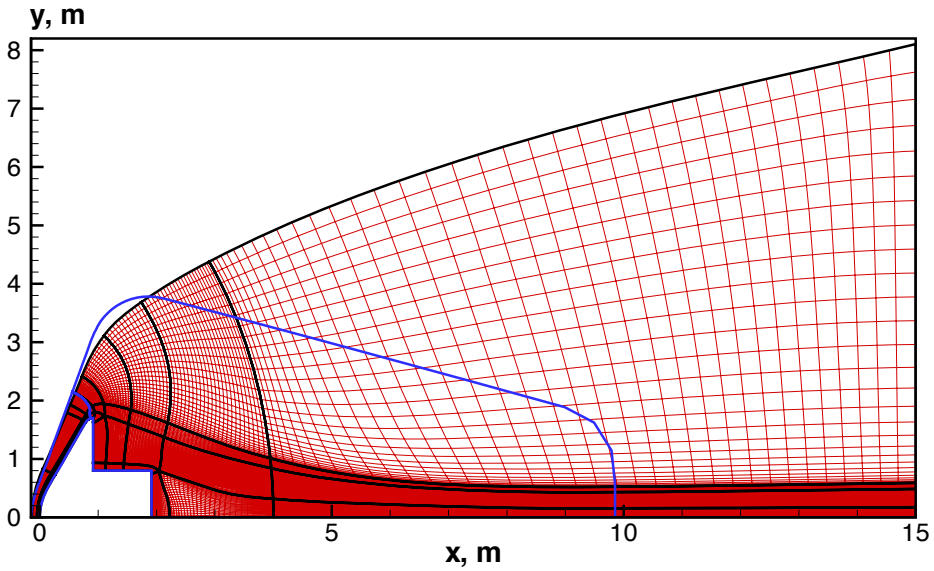
(b) **Flux convectif le long du bouclier thermique**

Fig. 4.7: Effet du raffinement du maillage avant-corps sur la prédiction du flux convectif, Rouzaud *et al.* [162]

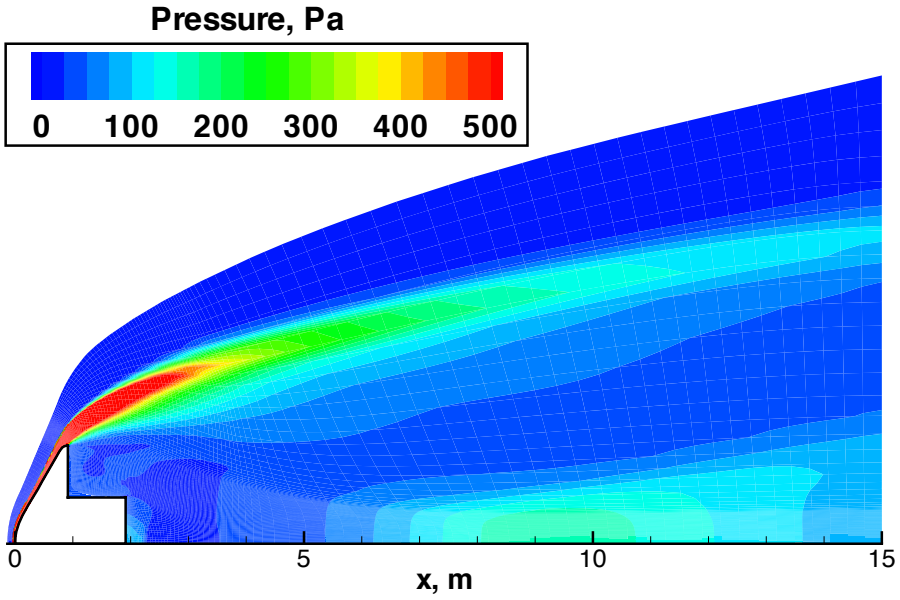
obtenu par Dieudonné et Walter, de la société RTech [59].

On présente sur la figure 4.8(a) le maillage RTech. Il s'agit d'un maillage multibloc composé de 34 blocs. On trace également sur la figure 4.8(a) les frontières des maillages ONERA. Le maillage RTech couvre un domaine de calcul beaucoup plus vaste que les maillages ONERA, en particulier dans la zone de sillage. De plus, les mailles sont plus fines dans cette région.

La figure 4.8(b) présente le champ de pression obtenu par la société RTech. En comparaison du champ ONERA (figure 4.5(c)), le point de fermeture est décalé de $2m$ vers l'aval. De plus, le niveau de pression est plus faible de 17% au point de fermeture.

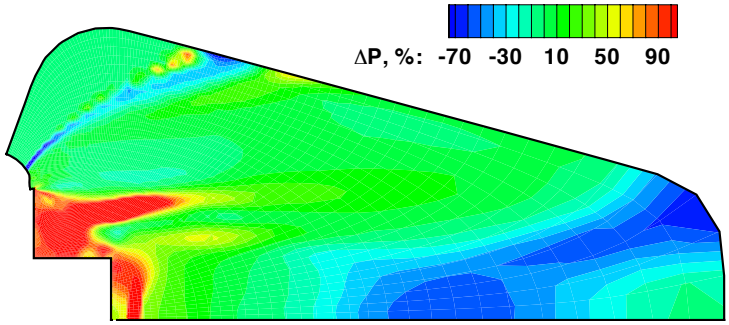


(a) **Maillage multidomaine RTech (rouge) et frontières du domaine de calcul ONERA (bleu)**

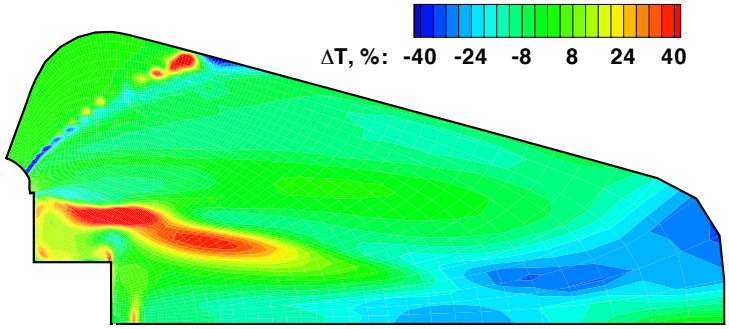


(b) **Champ de pression RTech**

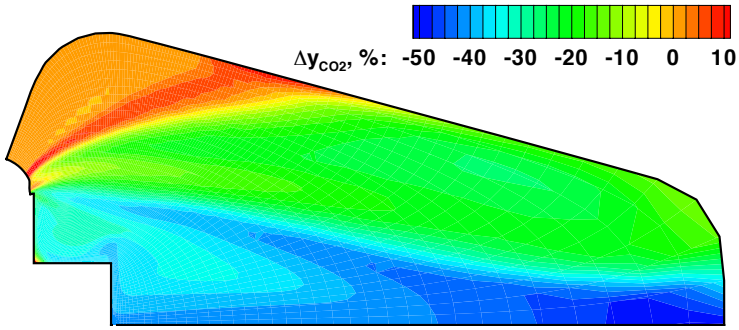
Fig. 4.8: Maillage et champ hydrodynamique découplé RTech [59]



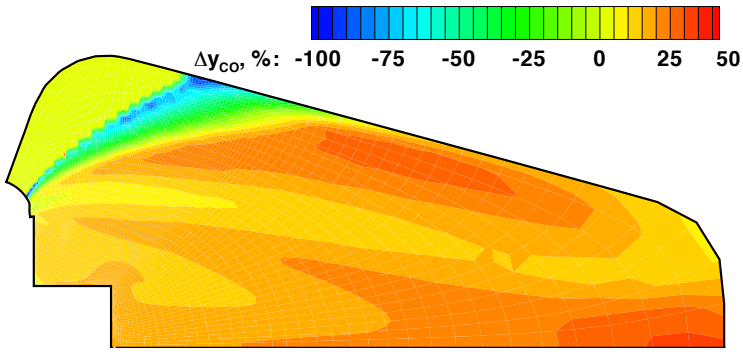
(a) **Champ de pression**



(b) **Champ de température**



(c) **Champ de fraction massique du dioxyde de carbone**



(d) **Champ de fraction massique du monoxyde de carbone**

Fig. 4.9: Ecarts entre les données hydrodynamiques RTech et ONERA, maillage ONERA

La figure 4.9 présente les écarts relatifs du champ RTech par rapport au champ ONERA. L'écart relatif s'obtient par la relation :

$$\Delta X,\ \% = \frac{X_{\text{RTech}} - X_{\text{ONERA}}}{X_{\text{ONERA}}} \times 100 \tag{4.26}$$

où le terme X désigne une grandeur du problème. Sur la figure 4.9, on présente les écarts relatifs pour la pression, la température et les fractions massiques de dioxyde de carbone et de monoxyde de carbone. On précise que ces quatre grandeurs correspondent aux paramètres d'entrée du modèle de propriétés radiatives MSBE. Les écarts sont relativement importants, notamment au niveau des zones de recirculation et au niveau du sillage. Ceci confirme les conclusions des études comparatives de Dieudonné *et al.* [60] et Omaly *et al.* [143].

Toutefois, la figure 4.6(c) tend à montrer que le champ ONERA prédit correctement l'échauffement pariétal par convection sur l'arrière-corps du cas d'épreuve TC3. D'autre part, les zones de recirculation, où la topologie de l'écoulement est la plus sensible au maillage, ne sont pas des zones fortement émissives car la température y est relativement faible (figure 4.5(a)). Les écarts importants observés dans cette zone ne devraient donc avoir qu'une influence limitée sur la prédiction de l'échauffement par rayonnement. Par conséquent, on estime que le champ ONERA est de qualité satisfaisante.

4.3 Paramétrisation et validation du code de transferts radiatifs

On désire valider l'implémentation du modèle de propriétés radiatives MSBE dans le solveur ASTRE. Pour cela, on étudie d'abord l'influence de certains paramètres de la méthode de Monte-Carlo : le nombre de chemins optiques et l'utilisation ou non du principe de réciprocité. Une fois que l'on a optimisé ces paramètres numériques, on valide la méthode en comparant le résultat à une solution de référence. L'application porte sur l'arrière-corps du cas d'épreuve TC3. On utilise le maillage et le champ hydrodynamique ONERA.

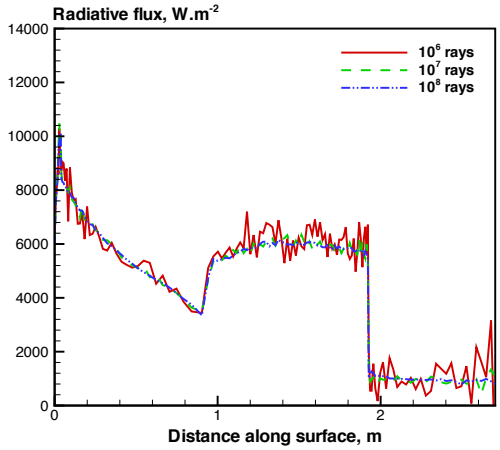
4.3.1 Etude de l'influence du nombre de chemins optiques

Dans la méthode de Monte-Carlo, l'erreur est d'origine purement statistique. Elle est d'autant plus faible que le nombre de chemins optiques N est grand. La loi d'évolution de l'écart-type est en $1/\sqrt{N}$. Afin d'évaluer le nombre de chemins optiques nécessaire pour obtenir une bonne précision du résultat, on calcule le champ radiatif découplé autour de l'arrière-corps du cas d'épreuve TC3 en faisant croître le nombre de chemins optiques. On pose $N = 10^n$ et on fait varier l'entier n de 6 à 8. On utilise la méthode FM du solveur ASTRE.

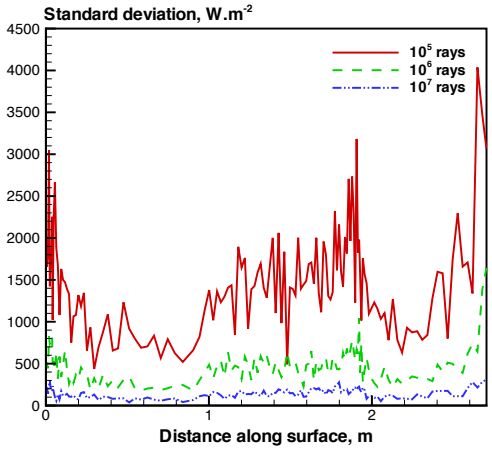
D'un point de vue algorithmique, chaque calcul utilisant 10^n chemins optiques est découpé en dix sous-calculs indépendants utilisant 10^{n-1} chemins. Ces sous-calculs ne différent entre eux que par les tirages aléatoires des paramètres qui caractérisent les chemins optiques - position du point d'émission, nombre d'onde et direction de propagation initiale. Le résultat du calcul à 10^n chemins optiques est la moyenne arithmétique des dix sous-calculs. On définit alors un écart-type sur les résultats des sous-calculs. Cet écart-type correspond à l'écart moyen entre les flux calculés avec 10^{n-1} chemins optiques et le flux calculé avec 10^n chemins. Un écart-type important signifie que dix réalisations de la même expérience numérique conduisent à des résultats dispersés, et donc peu fiables. Au contraire, un écart-type faible signifie que les dix

réalisations conduisent à des résultats très proches, et donc fiables d'un point de vue statistique. Par conséquent, par cette méthode, l'écart-type pour un calcul utilisant au total 10^n chemins optiques détermine en fait la précision statistique d'un calcul avec 10^{n-1} chemins optiques. L'erreur statistique s'obtient en divisant localement l'écart-type associé à une variable donnée - le flux radiatif ou la puissance radiative - par la valeur de cette variable.

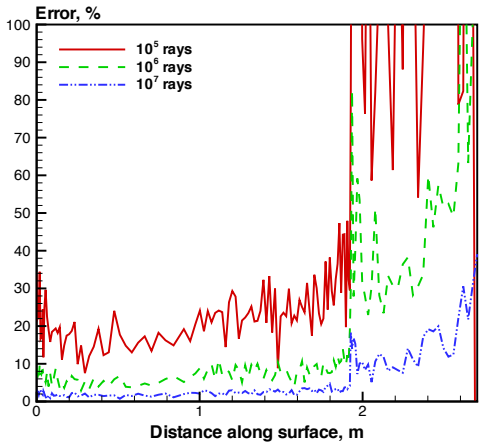
Les figures 4.10(a) et 4.10(b) présentent l'évolution le long de la paroi du flux radiatif et de l'écart-type associé. Augmenter le nombre de chemins optiques améliore clairement la solution en lissant les courbes de flux et en diminuant le niveau des écarts-type. L'écart-type mesuré sur le calcul avec 10^8 chemins optiques montre que l'erreur commise en utilisant 10^7 chemins est inférieure à 4% sur la face arrière du bouclier thermique et sur la génératrice du cylindre (figure 4.10(c)). Sur le culot, l'erreur croît jusqu'à 25% au niveau de l'axe de symétrie car la surface des mailles diminue de plus en plus lorsqu'on se rapproche de cet axe. Par conséquent, cette région de la paroi est atteinte par un nombre plus faible de rayons, d'où une précision



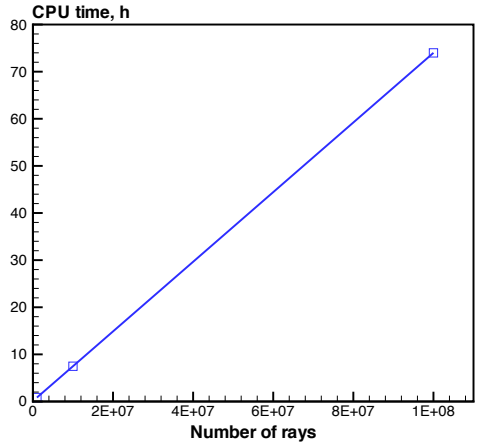
(a) **Flux radiatif en fonction du nombre de chemins optiques**



(b) **Ecarts-type sur le flux radiatif**



(c) **Erreur statistique sur le flux radiatif**



(d) **Temps de calcul**

Fig. 4.10: Influence du nombre de chemins optiques sur les résultats obtenus avec la méthode FM

statistique moindre. Par ailleurs, d'après la figure 4.10(a), le niveau de flux radiatif est nettement plus faible sur le culot que sur le reste de la paroi.

La figure 4.10(c) permet de vérifier que l'erreur statistique évolue bien en $1/\sqrt{N}$. En effet, plaçons-nous par exemple au niveau de la face arrière du bouclier thermique. Lorsqu'on multiplie par 10 le nombre de chemins optiques, l'erreur passe de 20% à 6%. Elle est donc divisée par 3,33, ce qui correspond au rapport $\frac{1}{\sqrt{10^{n-1}}} \Big/ \frac{1}{\sqrt{10^n}} = \sqrt{10}$. De même, lorsqu'on multiplie par 100 le nombre de chemins optiques, l'erreur passe de 20% à 2%. Elle est donc divisée par 10, ce qui correspond au rapport $\frac{1}{\sqrt{10^{n-2}}} \Big/ \frac{1}{\sqrt{10^n}} = 10$. Par conséquent, il est clair que le calcul avec 10^8 chemins optiques donne une solution satisfaisante puisque l'erreur statistique sur le flux moyen peut être estimée inférieure à $25/\sqrt{10} = 7,5\%$ sur le culot et à $4/\sqrt{10} = 1,2\%$ sur le reste de la paroi.

La figure 4.10(d) présente l'évolution du temps de calcul en fonction du nombre de chemins optiques. La machine est une Silicon Graphics Origin 3400 de 64 Go de mémoire avec un processeur de type R14000A@600MHz. Le temps CPU varie linéairement avec le nombre de chemins optiques. Pour 10^8 chemins optiques, le temps CPU est de $74h$.

La figure 4.11 présente le champ de puissance radiative obtenu avec 10^8 chemins optiques. Comme attendu, la région la plus émissive se situe au niveau du choc car cette région est la plus chaude. Un deuxième pic d'émission, bien que beaucoup plus faible, est localisé dans la région de fermeture du sillage en aval du culot. La figure 4.12 présente le champ d'écart-type associé à la puissance radiative pour 10^7 chemins optiques. Les niveaux d'écart-type sont relativement faibles, confirmant qu'un calcul avec 10^8 chemins optiques fournit un résultat d'une grande précision d'un point de vue statistique.

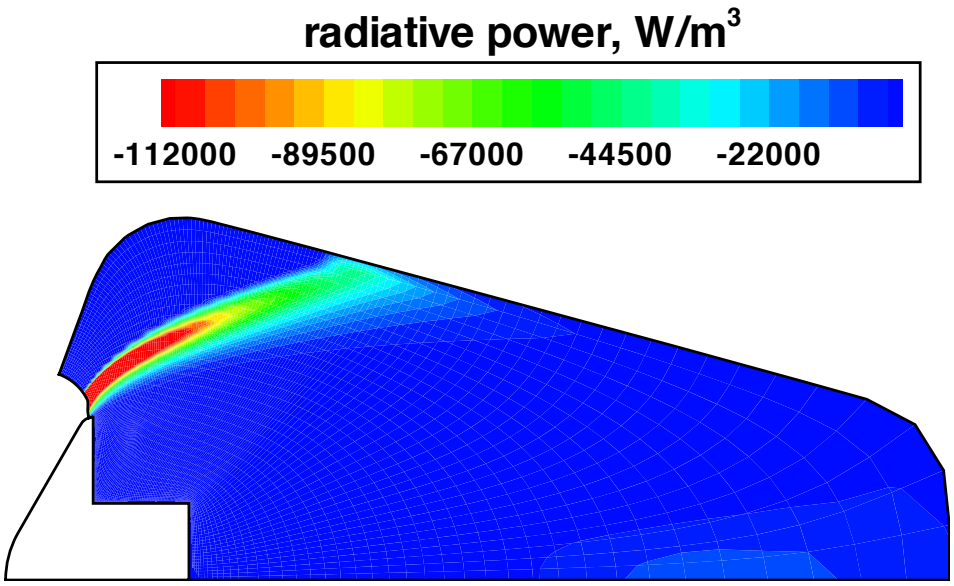


Fig. 4.11: Champ de puissance radiative pour un calcul avec 10^8 chemins optiques

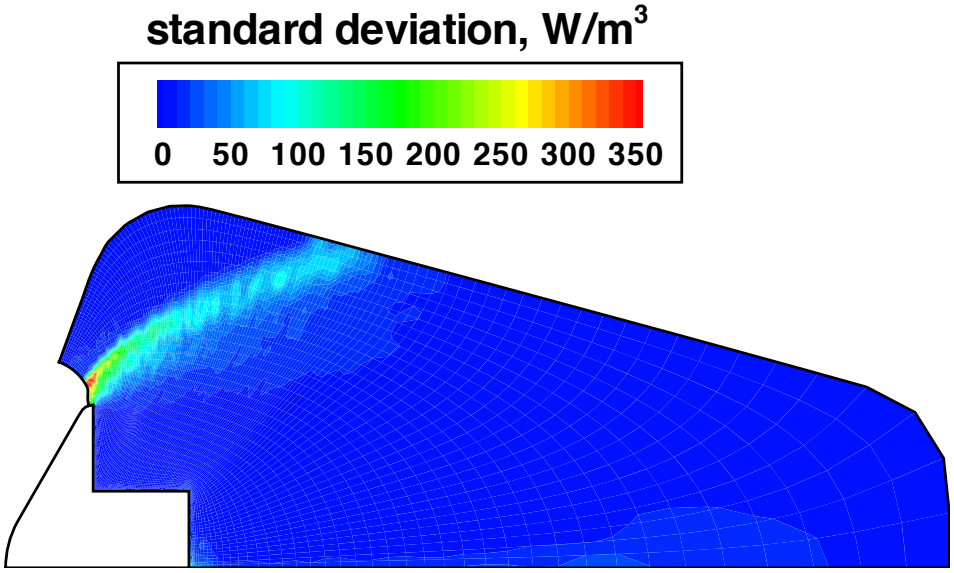


Fig. 4.12: Champ d'écart-type sur la puissance radiative, 10^7 chemins optiques

4.3.2 Choix de la méthode de Monte-Carlo

Comme il a déjà été dit plus haut, le solveur ASTRE calcule les transferts radiatifs selon trois approches différentes : l'approche FM (Forward Method), l'approche ERM (Emission-based Reciprocal Method) et l'approche ARM (Absorption-based Reciprocal Method). La première approche correspond à la formulation classique de la méthode de Monte-Carlo. Dans cette approche, un chemin optique partant d'un point B jusqu'à un point G n'est utilisé que pour calculer le transport de l'énergie radiative du point B vers le point G, c'est-à-dire dans le sens direct. Dans les approches ERM et ARM, basées sur le principe de réciprocité, le chemin optique est utilisé pour calculer directement la puissance échangée entre les points B et G, c'est-à-dire le transport d'énergie radiative à la fois dans le sens direct et inverse.

Afin de comparer les trois approches, on calcule le champ radiatif découplé autour de l'arrière-corps du cas d'épreuve TC3 en utilisant 10^8 chemins optiques.

La figure 4.13(a) présente la distribution de flux radiatif le long de la paroi. Les approches FM et ERM conduisent à des niveaux de flux semblables. Toutefois, la courbe obtenue avec l'approche ERM présente un comportement oscillant.

A l'opposé, le niveau prédit par l'approche ARM est nettement supérieur. La raison de cet écart est la suivante. Dans l'approche ARM, le bilan de flux dans une maille se calcule à partir de la puissance échangée par l'intermédiaire des chemins optiques qui atteignent cette maille (figure 4.14(a)). Si la maille est un élément de surface, la majorité de ces chemins optiques est générée depuis le milieu gazeux. Dans ce cas, par construction de la méthode (chapitre 3, équation (3.38)), le nombre d'onde associé à chacun de ces chemins optiques appartient à la plage de rayonnement du gaz. Par conséquent, dans l'approche ARM, la puissance émise par un élément de la paroi prend en compte certaines contributions dans la plage de rayonnement du gaz mais ne prend pas en compte les contributions dans le reste du spectre. En particulier, elle ne prend pas en compte entièrement la plage d'émission de la paroi puisque celle-ci n'est

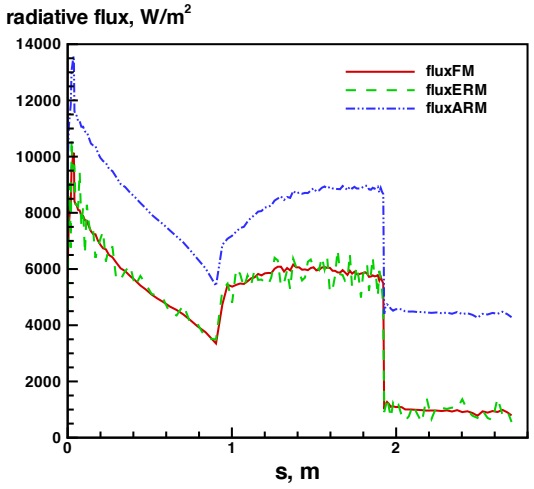
pas incluse dans la plage de rayonnement du gaz. En effet, la plage de rayonnement du gaz définie par le modèle MSBE correspond au domaine de nombre d'onde (exprimé en cm^{-1}) :

$$[512,5;1112,5] \cup [1637,5;2437,5] \cup [3237,5;4362,5] \cup [4737,5;5162,5]$$

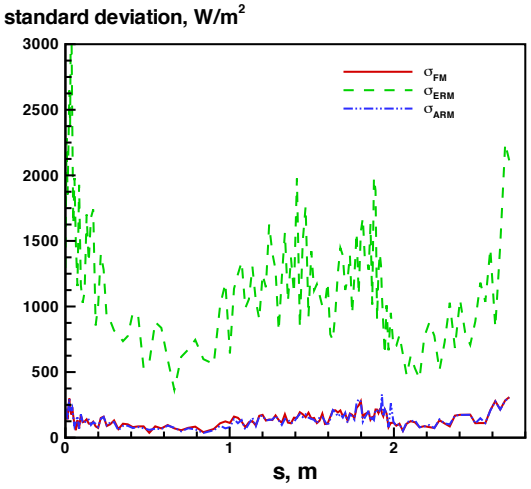
Pour sa part, la paroi est supposée se comporter comme un corps noir à la température de $500K$. D'après la loi de Wien (chapitre 1, équation (1.25)), elle émet principalement dans la plage $200cm^{-1} - 3500cm^{-1}$. La plage de rayonnement du gaz ne couvre donc pas complètement la plage d'émission de la paroi.

On en déduit que l'approche ARM sous-estime le flux émis par la paroi. Or le bilan de flux s'écrit comme la différence entre le flux incident et le flux émis*. Par conséquent, l'approche ARM surestime le flux radiatif à la paroi.

*On rappelle que la paroi est supposée absorber la totalité du flux incident (émissivité égale à 1). Le flux réfléchi est donc nul et le flux partant est égal au flux émis.

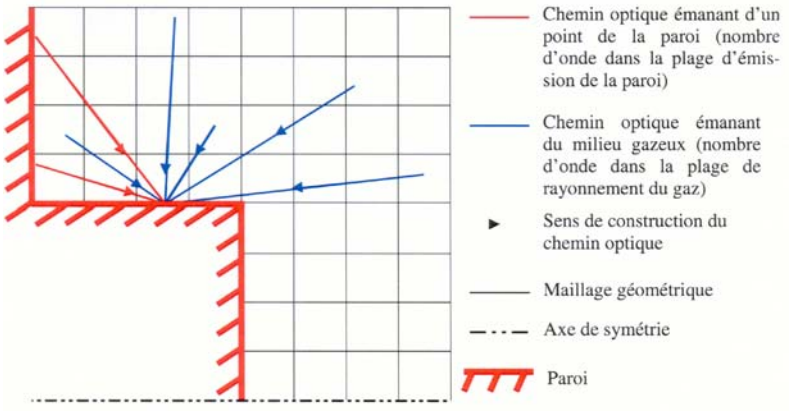


(a) **Flux radiatif**

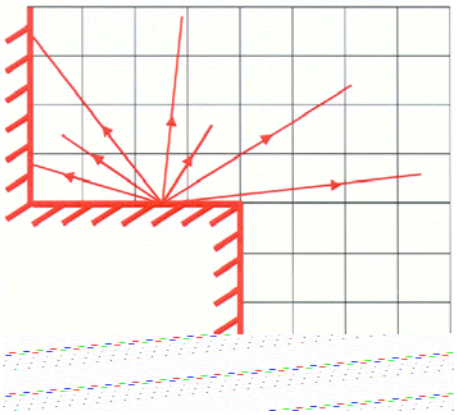


(b) **Ecart-type sur le flux radiatif**

Fig. 4.13: Comparaison des méthodes de Monte-Carlo - 10^8 chemins optiques



(a) **Approche ARM**



(b) **Approche ERM**

Fig. 4.14: Schéma de construction des chemins optiques en fonction de l'approche Monte-Carlo

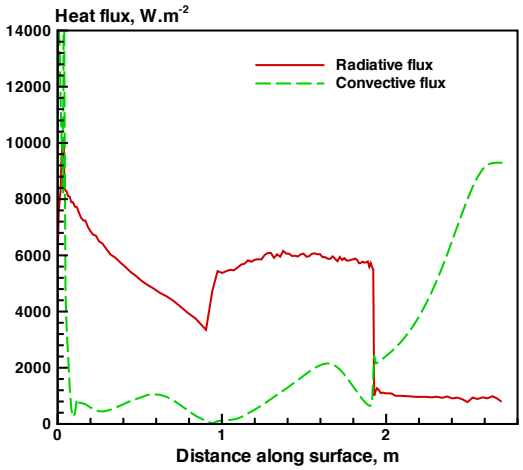


Fig. 4.16: Comparaison des flux convectif et radiatif découplés le long de l'arrière-corps du cas d'épreuve TC3

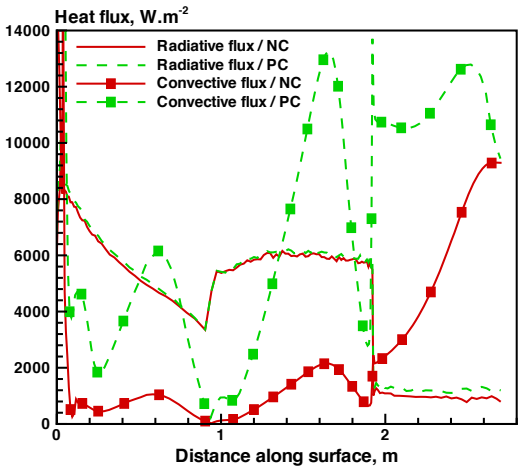


Fig. 4.17: Influence de la catalycité de paroi (NC = non-catalytique, PC = pseudo-catalytique)

4.4.1.2 Etude de l'influence de la condition de catalycité de paroi

On s'intéresse à l'influence de la condition de catalycité de paroi sur les flux de chaleur. Jusqu'à présent, nous avons supposé que la paroi est non-catalytique. On effectue ici des calculs hydrodynamique et radiatif découplés en supposant que la paroi est pseudo-catalytique, c'est-à-dire en imposant qu'à la paroi, les concentrations des espèces chimiques sont égales aux concentrations à l'infini amont. Plus précisément, on impose que la seule espèce présente à la paroi est le dioxyde de carbone. Cette condition n'est pas une condition réaliste. En effet, un traitement plus correct de la catalycité de paroi nécessiterait de prendre en compte la recombinaison des molécules O_2.

La figure 4.17 montre que la condition de catalycité a peu d'influence sur les niveaux de flux radiatifs. Par contre, la distribution de flux convectif est fortement modifiée. En effet, la recombinaison des molécules est un processus chimique exothermique. Par conséquent, imposer la recombinaison des molécules CO_2 conduit à augmenter fortement l'échauffement de la paroi.

Toutefois, les deux contributions de flux conservent des ordres de grandeur comparables, démontrant à nouveau l'importance des processus radiatifs dans l'échauffement de la paroi.

Dans toute la suite, on suppose de nouveau que la paroi est non-catalytique.

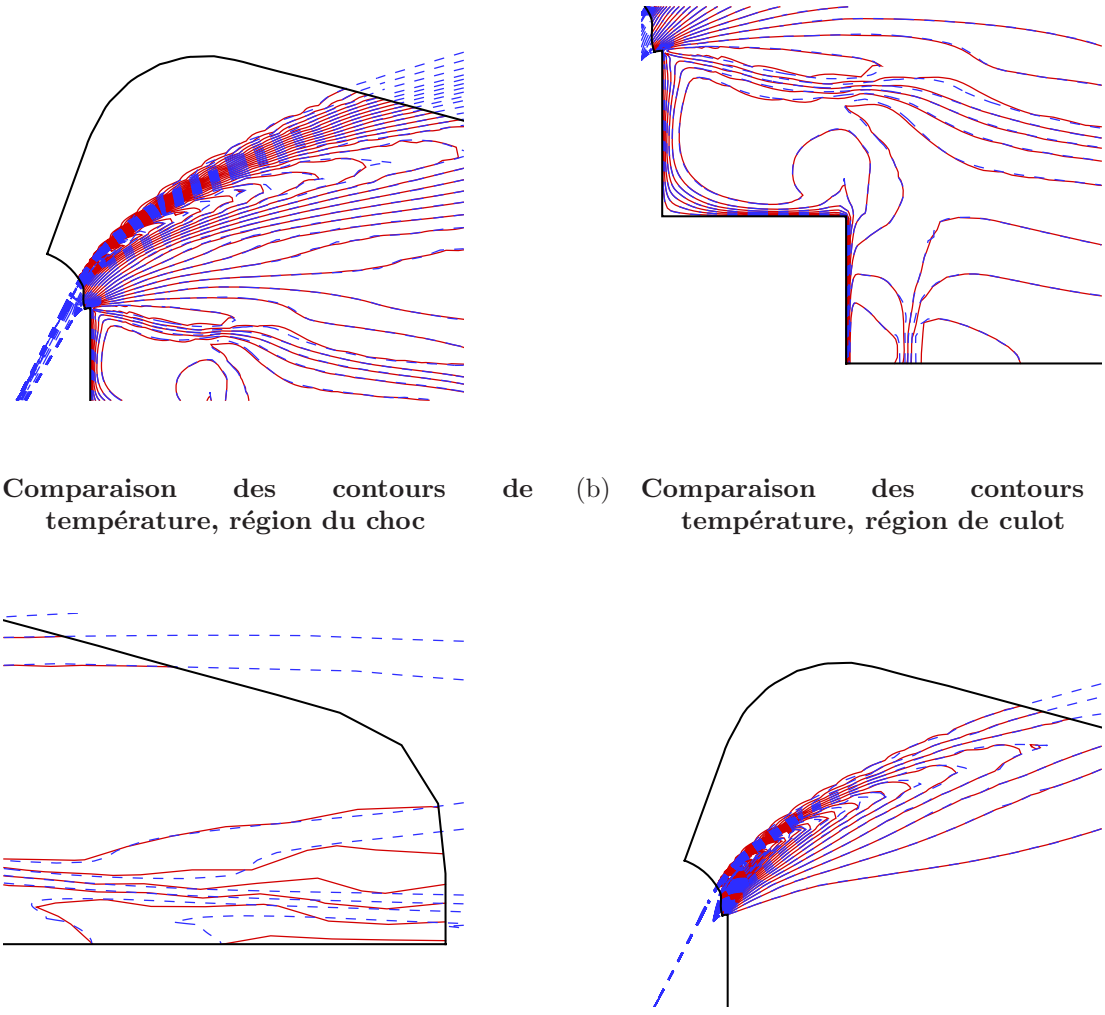
4.4.1.3 Influence du champ hydrodynamique sur le champ de rayonnement

Dans cette partie, on s'intéresse à l'influence du champ hydrodynamique sur le champ de rayonnement. Pour analyser cet effet, on calcule le champ radiatif à partir du champ hydrodynamique RTech [59] et on le compare à celui que nous avons obtenu précédemment à partir du champ hydrodynamique ONERA.

Avant de calculer le champ de rayonnement, on interpole les données hydrodynamiques RTech sur le maillage ONERA. On s'assure ainsi qu'il n'y a pas d'effet de maillage sur les résultats et surtout que le domaine de calcul est identique. En effet, on rappelle que le maillage RTech est beaucoup plus étendu que le maillage ONERA (figure 4.8(a)).

La figure 4.18 présente les contours de température et de pression avant et après l'opération d'interpolation. Les comparaisons entre les contours sont satisfaisantes bien que certains écarts soient visibles, par exemple, dans le sillage et dans la zone de choc. Ces écarts sont inhérents à la méthode d'interpolation et aux caractéristiques géométriques des cellules composant les deux maillages.

La figure 4.19 présente les distributions de flux radiatif le long de l'arrière-corps pour les champs hydrodynamiques RTech et ONERA. Le flux radiatif obtenu à partir du champ RTech est inférieur d'environ $750 W/m^2$ à celui obtenu avec le champ ONERA. Cet écart peut s'expliquer par le fait que le niveau de pression et de température dans le sillage est inférieur dans le cas du champ RTech (figure 4.9). Toutefois, l'ordre de grandeur du flux radiatif n'est pas modifié, et ce dernier reste significatif par rapport au flux convectif.



(a) **Comparaison des contours de température, région du choc**

(b) **Comparaison des contours de température, région de culot**

(c) **Comparaison des contours de température, région de sillage**

(d) **Comparaison des contours de pression, région du choc**

Fig. 4.18: Données de champ hydrodynamique RTech [59] avant (traits discontinus) et après (traits pleins) interpolation sur le maillage ONERA

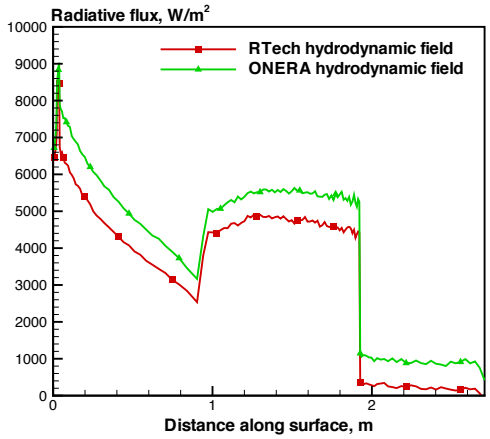
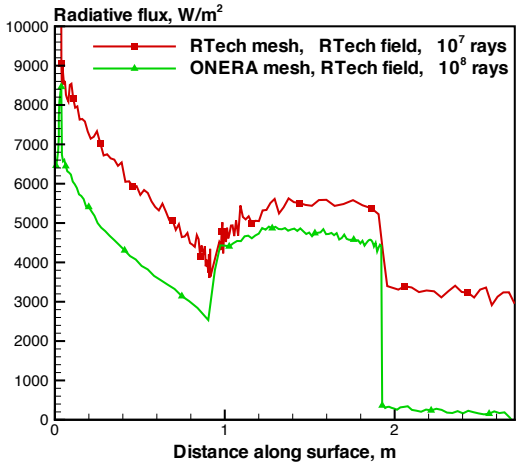


Fig. 4.19: Flux radiatif découplé le long de la paroi, maillage ONERA, 10^8 chemins optiques, méthode FM

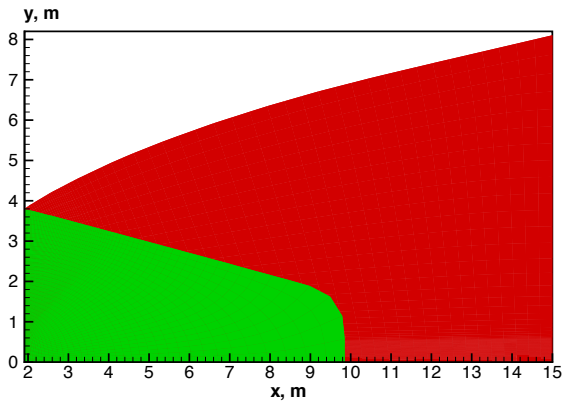
4.4.1.4 Influence du maillage sur la prédiction de l'échauffement pariétal

On étudie maintenant à l'influence du maillage sur la prédiction du flux radiatif. Pour cela, on calcule le champ de rayonnement à partir du champ hydrodynamique RTech et du maillage RTech d'une part, et à partir du champ hydrodynamique RTech interpolé sur le maillage ONERA d'autre part.

La figure 4.20(a) présente l'évolution comparée du flux radiatif le long de la paroi de l'arrière-corps. Le maillage ONERA conduit à des niveaux de flux plus faibles que le maillage RTech. On attribue cet effet non pas au raffinement des mailles, mais au fait que le domaine de calcul soit plus étendu dans le cas du maillage RTech et que le milieu soit optiquement mince. En effet, plaçons-nous par exemple au niveau du culot (abscisse curviligne $s = 1,9m \ldots 2,69m$). La figure 4.20(b) présente le domaine d'écoulement vu par un point du culot. Dans le cas du



(a) **Flux radiatif découplé le long de l'arrière-corps**



(b) **Champ d'écoulement vu par le culot pour le maillage ONERA (vert) et le maillage RTech (vert+rouge)**

Fig. 4.20: Influence du maillage sur la prédiction de l'échauffement pariétal

maillage ONERA, le point voit le domaine colorié en vert. Dans le cas du maillage RTech, il voit en plus le domaine colorié en rouge. Ce dernier contribue au flux radiatif pariétal si le rayonnement n'est pas absorbé sur son trajet, c'est-à-dire si le milieu est suffisamment optiquement mince. Le calcul des volumes de révolution correspondant aux surfaces verte et rouge montre que dans le cas du maillage RTech, le point voit un domaine huit fois plus grand que dans le cas du maillage ONERA. Or le niveau de flux radiatif obtenu à partir du maillage RTech est de l'ordre de dix fois plus élevé que le niveau obtenu à partir du maillage ONERA. On en déduit que l'écart constaté sur la figure 4.20(a) est essentiellement dû à la différence d'extension entre les domaines de calcul. On ajoute qu'une étude de Rivière *et al.* [158] a également montré l'influence de l'extension du domaine de calcul sur le flux radiatif, notamment au niveau du culot.

On conclut de cette étude que si l'objectif est de prédire au mieux le niveau de flux radiatif sur la paroi, il est important de couvrir un domaine d'écoulement suffisamment étendu. Cependant, nous n'avons pas poursuivi cette étude sur l'effet de l'extension du domaine de calcul et dans la suite, nous utilisons le maillage ONERA. On ajoute que le solveur hydrodynamique CELHyO2D n'est pas adapté au traitement de maillages multiblocs. Nous ne pouvons donc pas utiliser le maillage RTech.

4.4.2 Couplage des champs hydrodynamique et radiatif

On couple maintenant le champ hydrodynamique et le champ radiatif au niveau de l'arrière-corps du cas d'épreuve TC3. Le champ hydrodynamique initial est le champ ONERA. Le maillage est le maillage ONERA. On utilise la méthode FM du solveur ASTRE, avec 10^7 chemins optiques pour les premières itérations globales et 10^8 pour les dernières itérations.

On atteint la convergence du processus de couplage au bout de cinq itérations globales, comme le montre la figure 4.21. Cette figure présente l'évolution, au cours des itérations CFD, des résidus correspondant aux variables conservatives ρu, ρv et ρE, respectivement liées à la vitesse axiale, la vitesse normale et l'énergie totale. En fin de calcul, les résidus ont atteint un plateau. Il n'évoluent plus lorsque le champ de rayonnement est réactualisé. On vérifie par ailleurs qu'à la dernière itération globale, le champ de rayonnement est inchangé par rapport à l'itération précédente.

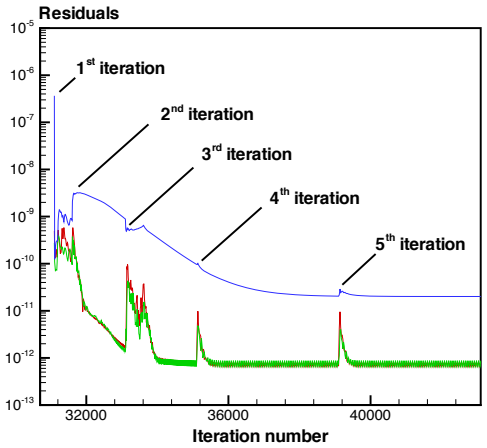
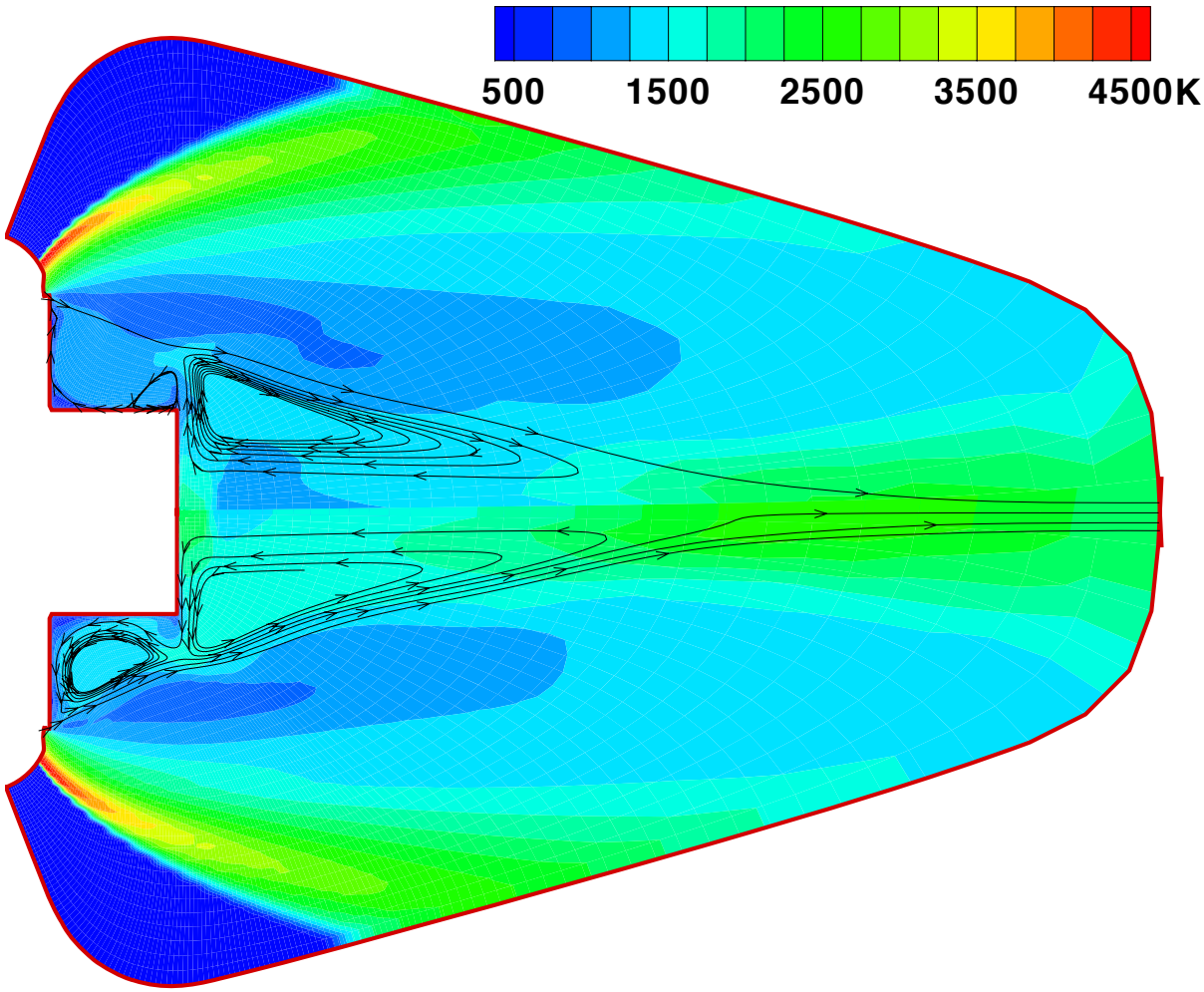
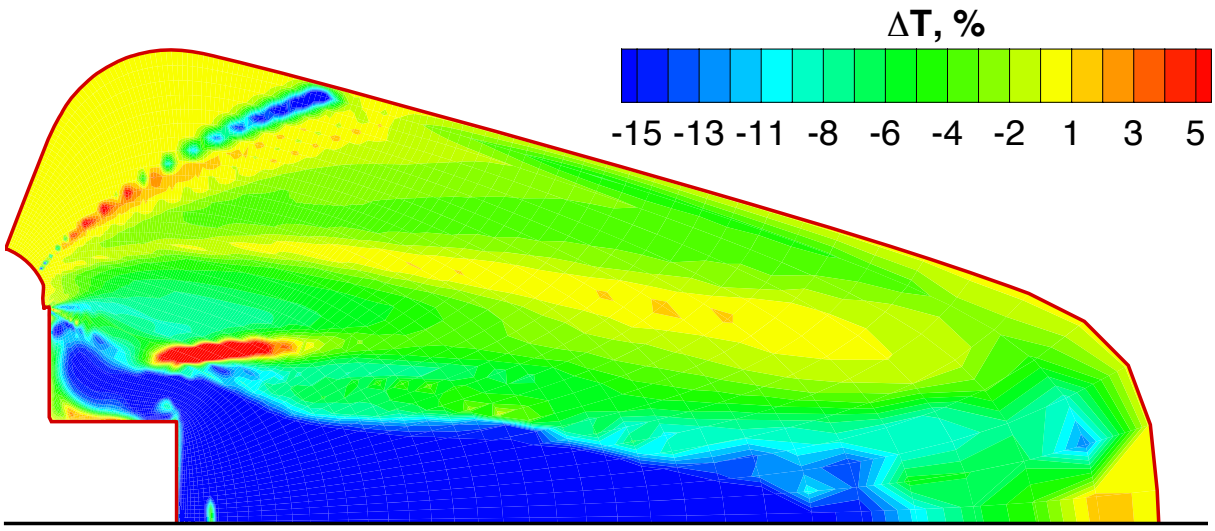


Fig. 4.21: Cas d'épreuve TC3 arrière-corps, historique de convergence du calcul couplé. Résidus pour l'énergie totale (courbe supérieure) et les composantes de la vitesse (courbes inférieures)



(a) **Champ de température découplé (moitié inférieure) et couplé (moitié supérieure)**



(b) **Ecart relatif de température du champ couplé par rapport au champ découplé**

Fig. 4.22: Cas d'épreuve TC3 arrière-corps, influence du couplage hydrodynamique/rayonnement sur le champ de température

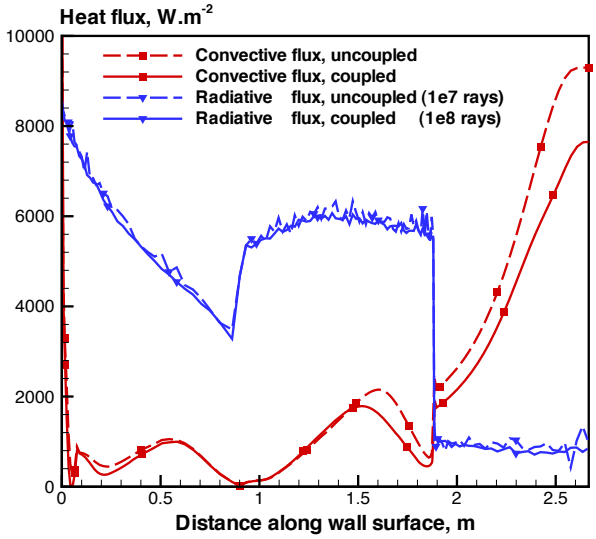


Fig. 4.23: Cas d'épreuve TC3 arrière-corps, flux de chaleur couplés et découplés le long de la paroi

Sur les figures 4.22(a) et 4.22(b), on compare le champ de température avec et sans la contribution radiative. Les principaux écarts sont situés dans les zones de recirculation de l'écoulement où la température décroît de près de $500K$, soit 25%. La topologie de l'écoulement dans ces zones semble être très sensible à l'introduction du terme source radiatif puisque les écarts passent de +5% à -15% sur de très courtes distances. Dans la région du choc, l'émission radiative modifie légèrement la position de l'onde de choc, et donc le champ de température. On vérifie qu'après le couplage, la température ne dépasse pas $4000K$ afin que la limite du domaine de validité du modèle de propriétés radiatives MSBE ne soit pas atteinte.

Sur la figure 4.23, on compare les distributions de flux le long de la paroi pour les calculs découplé et couplé. Le refroidissement des zones de recirculation entraîne une diminution de la valeur du flux convectif sur le cylindre et le culot. Cependant, les écarts dus au couplage restent faibles par rapport au niveau général des flux. On peut donc en conclure que le couplage hydrodynamique/rayonnement est faible dans ce cas.

4.4.3 Comparaison avec d'autres résultats numériques

On compare maintenant la distribution de flux radiatif incident à la paroi donnée par le calcul couplé avec d'autres résultats numériques publiés dans la littérature. On dispose des contributions de l'IPMech RAS publiée par Surzhikov [179], du MAB/CEA/CESTA publiée par Turpault [198, 39] et du laboratoire NiiMech publiée par Omaly *et al.* [143].

Le laboratoire IPMech RAS utilise le code RGDSV-2 [177, 178, 179, 180, 181]. Le modèle de propriétés radiatives est un modèle multigroupe. Comme le modèle MSBE, ce dernier prend en compte l'émission engendrée par les transitions vibro-rotationnelles des espèces CO et CO_2, mais dans la plage légèrement plus restreinte $1000 - 5000cm^{-1}$, située dans la partie infrarouge du spectre. En revanche, contrairement au modèle MSBE, le modèle de l'IPMech RAS prend également en compte l'émission radiative de l'espèce CO dans la plage $50000 - 100000cm^{-1}$, située dans la partie UV du spectre. Le nombre de groupes spectraux est de 91. Le champ de

rayonnement est calculé avec l'approximation P_1 de la méthode des harmoniques sphériques. Il est couplé au champ hydrodynamique par une méthode de résolution numérique implicite. Le flux radiatif incident est ensuite calculé à l'aide d'une méthode de lancer de rayons.

Le laboratoire MAB/CEA/CESTA utilise le code ARES [198]. Le modèle de propriétés radiatives est un modèle multigroupe. Pour les espèces monoatomiques (C, N, O), les données spectroscopiques proviennent du code raie-par-raie PARADE [172]. Pour les espèces diatomiques (N_2, CO, CO_2, NO, O_2), le modèle prend en compte les transitions rotationnelles, vibrationnelles et électroniques. Le coefficient d'absorption est tabulé en fonction de la température, de la pression et de deux paramètres radiatifs. Les champs hydrodynamique et radiatif sont couplés par une méthode numérique implicite.

Le laboratoire NiiMech utilise un code appelé HIGHTEMP [3]. Le modèle de propriétés radiatives est le modèle de l'IPMech RAS. Les champs hydrodynamique et radiatif ne sont pas couplés.

Pour des détails supplémentaires concernant la modélisation utilisée par les différents auteurs, le lecteur pourra se référer à l'étude bibliographique présentée au chapitre 1 (§ 1.3.2).

Les résultats sont obtenus avec des maillages distincts (figure 4.24). Le domaine de calcul couvert par le maillage du MAB/CEA/CESTA est le domaine le plus restreint parmi les quatre contributions, la nôtre incluse. Si l'on classe les contributions par ordre croissant de la surface couverte par le maillage axisymétrique, après le MAB/CEA/CESTA vient l'ONERA ($x_{\max} = 10m$, $y_{\max} = 4m$), puis l'IPMech RAS et enfin le laboratoire NiiMech.

Dans notre cas, le flux radiatif incident s'obtient en ajoutant le flux émis par la paroi au bilan de flux donné par le solveur ASTRE, soit :

$$q^{R-} = q^R + q_e^R = q^R + 3544W/m^2 \tag{4.28}$$

La relation ci-dessus est exacte dans la mesure où la paroi est supposée se composer comme un corps noir (le flux partant est alors égal au flux émis).

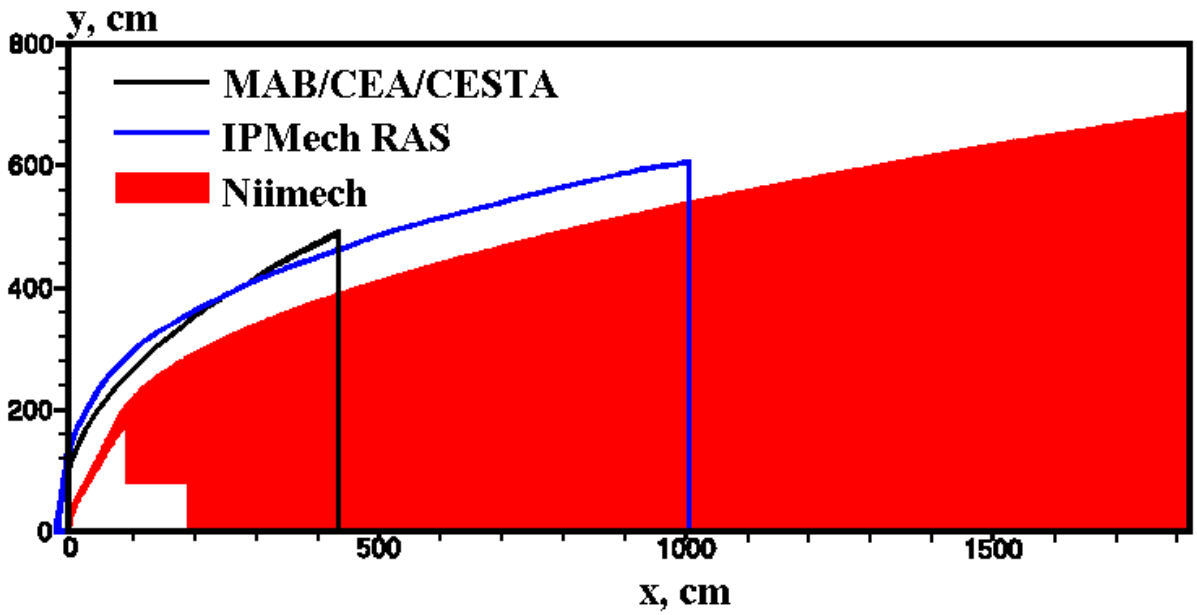
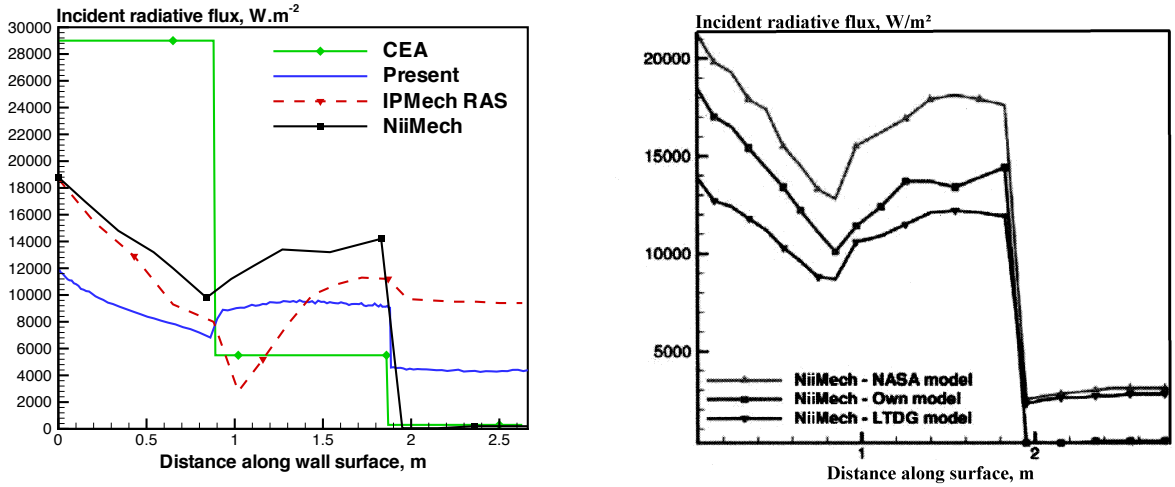


Fig. 4.24: Frontières des domaines de calcul de l'IPMech RAS [179], du NiiMech [3] et du MAB/CEA/CESTA [198]

La figure 4.25(a) présente les distributions de flux radiatif incident à la paroi obtenues par les différents auteurs. Bien que les distributions soient comparables d'un point de vue qualitatif, on constate une large dispersion sur les niveaux de flux. On remarque que les écarts ne sont pas dus uniquement à l'extension du domaine de calcul. En effet, le laboratoire NiiMech prédit par exemple un flux radiatif quasiment nul sur le culot alors que leur maillage couvre le domaine de calcul le plus vaste.

Pour justifier ces écarts, on peut invoquer principalement le raffinement du maillage, la topologie du champ hydrodynamique, la méthode de résolution de l'ETR et le modèle de propriétés radiatives. Les trois premiers critères ont nécessairement une large influence. En effet, les deux laboratoires russes IPMech RAS et NiiMech utilisent le même modèle de propriétés radiatives et obtiennent pourtant des niveaux de flux très différents. De plus, nous avons montré précédemment que le champ RTech projeté sur le maillage ONERA conduit à des flux radiatifs plus faibles que le champ ONERA (§ 4.4.1.3). La topologie du champ hydrodynamique influe donc bien sur le niveau de flux radiatif ; elle dépend elle-même du raffinement du maillage. D'autre part, le modèle de propriétés radiatives joue également un rôle très influent. En effet, le laboratoire NiiMech a comparé les résultats obtenus avec trois modèles de propriétés radiatives différents, à partir d'un même champ hydrodynamique. Les résultats sont présentés sur la figure 4.25(b). Le modèle initial est référencé par l'étiquette "Own model". Les auteurs ont obtenu des écarts importants, entre autres au niveau du culot.

Malgré la large dispersion des résultats, on peut néanmoins affirmer, à l'issue de cette étude, que la contribution radiative à l'échauffement pariétal doit être étudiée avec attention dans la préparation des missions d'exploration martienne avec aérocapture, dont le cas d'épreuve TC3 est représentatif.



(a) **Comparaison du résultat couplé avec les résultats de l'IPMech RAS [179], du MAB/CEA/CESTA [198] et du NiiMech [143]**

(b) **Influence du modèle de propriétés radiatives sur le flux radiatif incident, résultats du laboratoire NiiMech [143]**

Fig. 4.25: Cas d'épreuve TC3 arrière-corps, flux radiatif incident le long de la paroi

4.5 Test de la méthode pour la prédiction du flux radiatif sur le bouclier thermique du cas d'épreuve TC3

Dans la couche de choc d'un véhicule de rentrée martienne, les molécules de dioxyde de carbone se dissocient à la traversée de l'onde de choc pour former entre autres les espèces chimiques CO, O et O_2. Le rayonnement de couche de choc est émis selon deux types de mécanismes. Le premier type correspond aux transitions entre deux niveaux électroniques. Le rayonnement associé à ces transitions se situe plutôt dans la partie ultraviolet (UV) du spectre. Le deuxième type de mécanisme radiatif correspond aux transitions moléculaires entre deux niveaux rovibrationnels. Le rayonnement associé à ces transitions se situe plutôt dans le domaine infrarouge (IR) du spectre.

Seulement une partie du rayonnement IR est calculé par le modèle MSBE. Ce dernier ne tient pas compte par exemple du rayonnement de la molécule O_2. De plus, il ne tient pas compte du tout du rayonnement dans la plage UV. Par conséquent, le modèle MSBE n'est a priori pas adapté au calcul des propriétés radiatives du gaz dans la couche de choc, autour de l'avant-corps.

Cependant, des études réalisées par les laboratoires russes NiiMech [72, 143] et IPMech RAS [180, 179] ont montré que, même dans la couche de choc, le rayonnement est principalement dominé par les transitions dans la partie IR du spectre, et ce d'autant plus qu'on s'éloigne de la ligne d'arrêt. Les figures 4.26 et 4.27(a) illustrent ce propos.

Sur la figure 4.26, Omaly *et al.* [143] ont tracé les distributions de flux radiatif incident le long du bouclier thermique du cas d'épreuve TC3. Ces distributions sont obtenues à l'aide de différents modèles de propriétés radiatives. Le modèle utilisé par le laboratoire IPMech RAS couvre les domaines UV et IR du spectre. Le modèle référencé "Model 4(IR)" prend en compte le rayonnement des espèces CO et CO_2 dans la plage IR $1000 - 5000 cm^{-1}$. Le modèle référencé "Model 1(CO4+)" suppose que le peuplement des niveaux électroniques excités s'écarte de la condition d'équilibre. Il prend en compte le rayonnement du quatrième positif du monoxyde

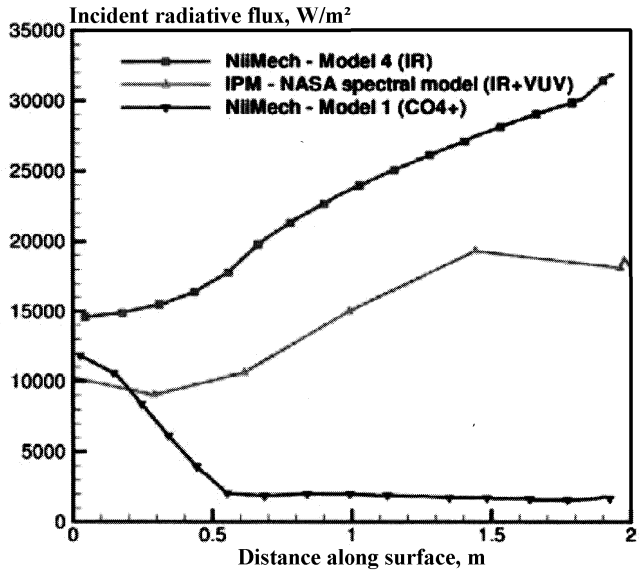


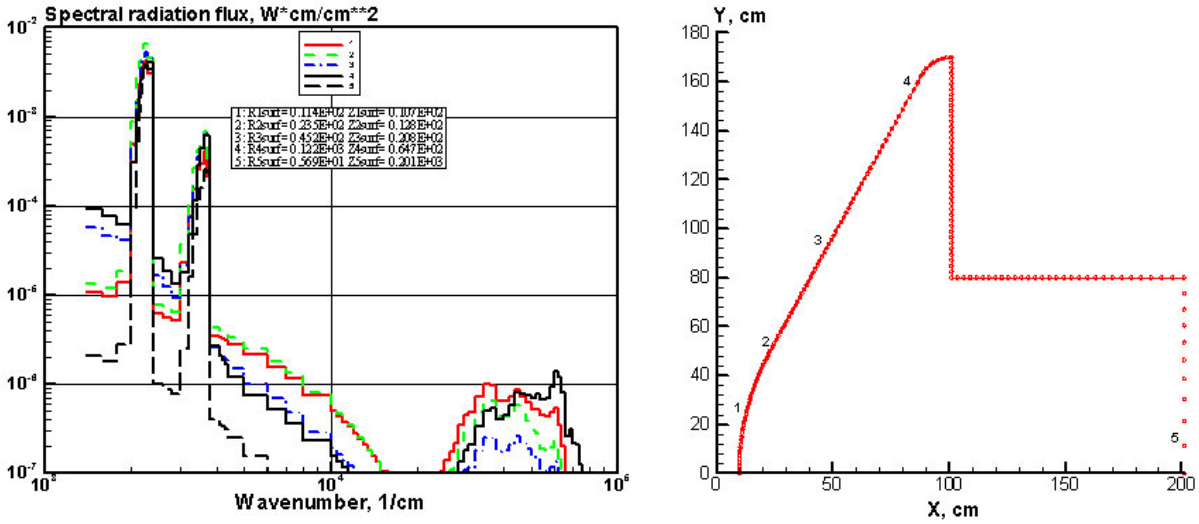
Fig. 4.26: Cas d'épreuve TC3, flux radiatif incident le long de la paroi avant-corps, résultats de calculs radiatifs menés par les laboratoires russes NiiMech et IPMech RAS publiés par Omaly *et al.* [143]

Espèce	Système moléculaire	Domaine de nombre d'onde, cm^{-1}
CO	Angström	500 -5000
	3+	18000-58000
	4+	35000-85000
	Birge-Hopfield	74000-104000
CN	Red	1000 -31000
N_2	1+	1000 -26000
C_2	Swan	17700-19500

Tab. 4.1: Systèmes moléculaires pris en compte par le laboratoire NiiMech

de carbone $CO(4+)$, situé dans le domaine UV. Le laboratoire NiiMech a montré qu'au point d'arrêt, parmi les contributions radiatives données dans le tableau 4.1 (soit $CO(4+)$, $CO(3+)$, $CO(B-H)$, $CO(Angström)$, $CN(Red)$, $N_2(1+)$ et $C_2(Swan)$), 99% du flux radiatif provient du quatrième positif de l'espèce CO. A ce point, la figure 4.26 montre que l'échauffement par rayonnement IR ("Model 4") est de l'ordre de $14500 W/m^2$ et l'échauffement par rayonnement UV ("Model 1") est de l'ordre de $11500 W/m^2$. On a donc un rapport de 80% entre la contribution UV et la contribution IR. Ce rapport diminue jusqu'à la valeur de 6% lorsqu'on s'écarte du point d'arrêt. La contribution dans l'UV devient donc négligeable.

La figure 4.27(a), extraite de Surzhikov [179], présente le spectre de flux radiatif monochromatique incident en cinq points de la paroi du cas d'épreuve TC3. Seuls les quatre premiers points sont localisés sur le bouclier thermique, le cinquième point étant situé sur le culot (figure 4.27(b)). Les résultats sont obtenus avec le code RGDSV-2 [177, 178, 179, 180, 181] (voir chapitre 1, § 1.3.2). Surzhikov [179] a mené deux calculs, en supposant la paroi soit non-catalytique soit pseudo-catalytique. La figure 4.27(a) correspond au résultat du calcul supposant une paroi pseudo-catalytique. Le spectre de flux radiatif monochromatique est calculé à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo. Dans la partie infrarouge du spectre, les pics autour des



(a) **Flux radiatif monochromatique en différents points de la paroi**

(b) **Position des points sur la paroi**

Fig. 4.27: Cas d'épreuve TC3, avant-corps, résultats de calculs radiatifs menés par Surzhikov [179]

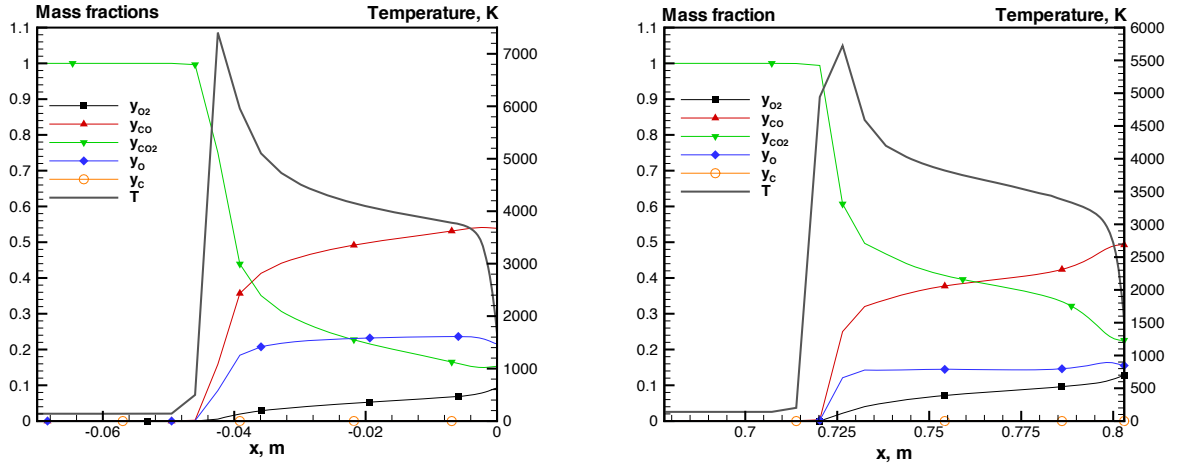
nombres d'onde $2325cm^{-1}$ et $3700cm^{-1}$ correspondent à des transitions radiatives du dioxyde de carbone.

Le flux radiatif incident à la paroi s'obtient par intégration du flux monochromatique incident sur l'ensemble du spectre. On propose de quantifier ce flux à partir de la figure 4.27(a), en calculant approximativement l'aire sous la courbe de flux monochromatique. On précise que le domaine IR correspond aux nombres d'onde inférieurs à la valeur $12800cm^{-1}$ et que le domaine UV correspond aux nombres d'onde supérieurs à la valeur $26300cm^{-1}$ (entre les deux se trouve le domaine du visible). Ainsi, l'aire sous la portion de courbe limitée aux abscisses inférieures à la valeur $12800cm^{-1}$ nous donne le flux incident intégré sur la partie IR du spectre. L'aire sous la portion de courbe limitée aux abscisses supérieures à la valeur $26300cm^{-1}$ nous donne le flux incident intégré sur la partie UV du spectre.

Pour le point n° 1, situé à proximité du point d'arrêt, on estime à $0,05W/cm^2$ la contribution dans la partie UV du spectre et à $0,2W/cm^2$ la contribution dans la partie IR. On a donc un rapport 1/4 entre les deux contributions. Au point n° 4, situé à proximité du coude du bouclier thermique, le flux radiatif incident intégré sur le domaine UV est de l'ordre de $0,04W/cm^2$ et le flux radiatif incident intégré sur le domaine IR est de l'ordre de $0,5W/cm^2$. Le rapport entre les deux n'est plus que de 1/12. Cette valeur est proche de celle déduite ci-dessus à partir des résultats du laboratoire NiiMech [143].

Par conséquent, on peut penser que les principaux processus radiatifs agissant dans la couche de choc correspondent aux mécanismes de la plage IR pris partiellement en compte par le modèle MSBE. D'où l'idée de tester la plateforme de calcul couplé CELHyO2D/ASTRE/MSBE pour estimer l'échauffement au niveau du bouclier thermique du cas d'épreuve TC3.

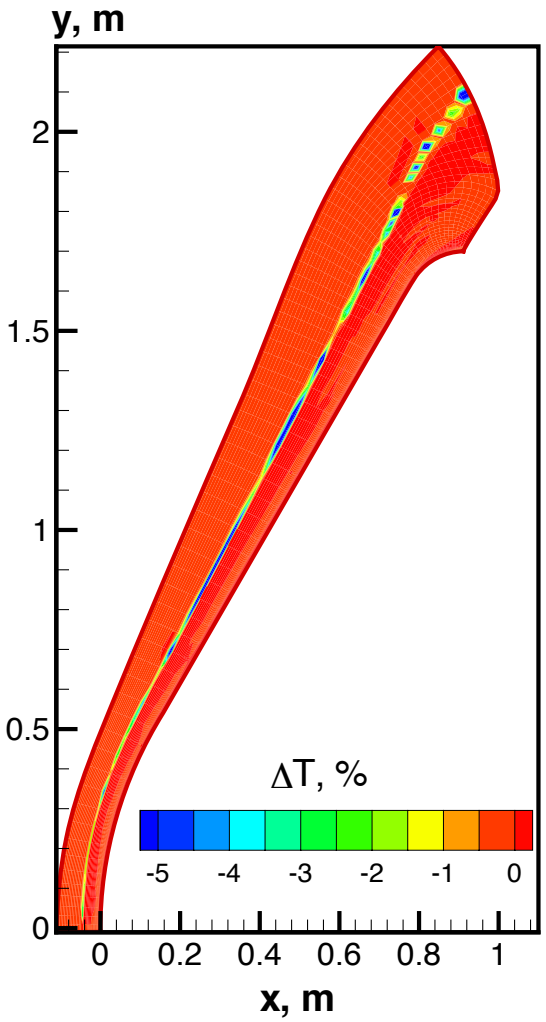
Comme le modèle MSBE ne tient compte que du rayonnement des espèces CO et CO_2, on vérifie d'abord que ces espèces sont prépondérantes dans l'ensemble de la couche de choc. Les figures 4.28(a) et 4.28(b) présentent les distributions de température et de fractions massiques, respectivement le long de la ligne d'arrêt et le long de la normale à la paroi au niveau du point n° 4. La somme des fractions massiques des espèces CO et CO_2 est supérieure à 75% dans la totalité de la couche de choc. La fraction massique de l'espèce moléculaire O_2 est d'environ 10%.



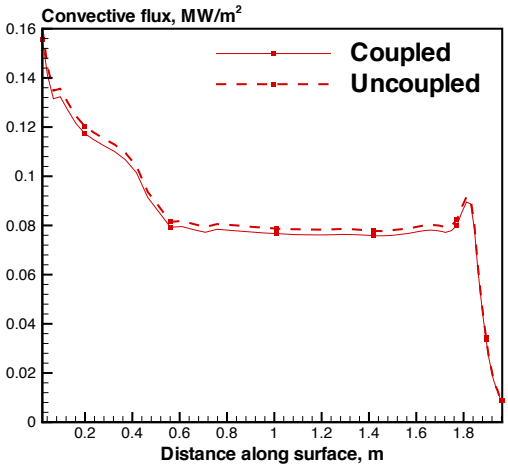
(a) **Distribution le long de la ligne d'arrêt**

(b) **Distribution le long de la normale à la paroi à l'abscisse** $x = 0,8m$

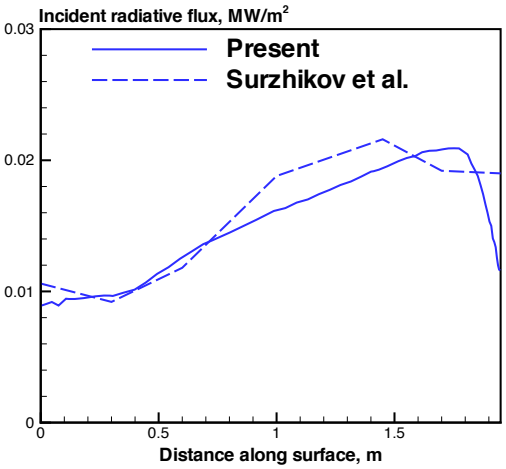
Fig. 4.28: Cas d'épreuve TC3, avant-corps, fractions massiques et température



(a) **Ecart relatif de température entre les calculs couplé et découplé**



(b) **Flux de chaleur convectif le long de la surface du bouclier thermique**



(c) **Flux radiatif incident le long du bouclier thermique, comparaison avec le résultat de Surzhikov [179], paroi non-catalytique**

Fig. 4.29: Cas d'épreuve TC3, avant-corps, résultats du calcul couplé

Néanmoins, la température dépasse la borne supérieure du domaine de validité du modèle MSBE, fixée par construction à $4000K$ (§ 3.2.1). En effet, le long de la ligne d'arrêt, la température est supérieure à $4000K$ sur plus de la moitié de l'épaisseur de couche de choc et le pic de température est de $7200K$. Au niveau du coude du bouclier thermique, cette proportion est réduite à 25% et le pic de température à $5800K$.

On ne peut donc pas garantir la précision du modèle MSBE et l'incertitude est d'autant plus grande que l'on se rapproche du point d'arrêt.

On propose malgré tout de calculer le champ de rayonnement dans la couche de choc du cas d'épreuve TC3 à l'aide du modèle MSBE et de comparer le flux radiatif ainsi obtenu à celui prédit par Surzhikov [179].

On utilise le maillage avant-corps ONERA et la méthode de Monte-Carlo FM avec 10^8 chemins optiques. On obtient une solution couplée convergée après trois itérations globales.

La figure 4.29(a) présente l'écart relatif du champ de température couplé par rapport au champ découplé, soit :

$$\Delta T,\ \% = \frac{T_{\text{couplé}} - T_{\text{découplé}}}{T_{\text{découplé}}} \times 100 \tag{4.29}$$

L'écart est globalement très faible et le champ de température est quasiment inchangé. L'émission radiative entraîne une légère perte d'énergie au niveau du choc, diminuant la température de quelques pour cent dans cette région. L'effet de l'émission radiative est également visible au niveau du flux de chaleur convectif. Sur la figure 4.29(b), on compare les distributions de flux convectif le long du bouclier thermique données par le calcul découplé et le calcul couplé. Le couplage engendre une diminution de l'échauffement convectif de 2% à 3%. Cet effet correspond à l'effet de "radiation cooling" décrit au chapitre 1 (§ 1.1.2).

La figure 4.29(c) présente l'évolution du flux radiatif incident couplé le long du bouclier thermique. Le résultat est comparé à celui obtenu par Surzhikov [179] dans le cas où la paroi est supposée non-catalytique. Les résultats sont en bon accord, bien que, comme il a été dit plus haut, on ne puisse garantir la validité du modèle MSBE.

La comparaison entre le flux radiatif et le flux convectif (figure 4.30) montre que la contribution radiative est négligeable dans la région du point d'arrêt. En effet, au point d'arrêt, le

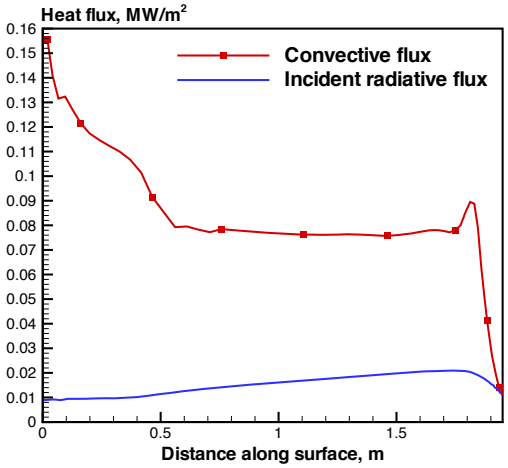


Fig. 4.30: Cas d'épreuve TC3, avant-corps, flux convectif et radiatif couplés le long de la paroi

rapport entre les deux contributions est de l'ordre de 5%. Cependant, en aval de ce point, la contribution radiative atteint 15% à 30% du flux convectif entre les abscisses $s = 0,6m$ et $s = 1,8m$. Au niveau de l'épaulement du bouclier thermique, la figure 4.30 indique des niveaux de flux radiatif et convectif du même ordre de grandeur. On précise toutefois que le flux radiatif est sous-évalué dans cette région car le maillage avant-corps ne prend pas en compte l'ensemble du domaine d'écoulement vu par la paroi. Ainsi, le rayonnement provenant de l'écoulement aval n'est pas inclus dans le calcul du flux.

Dans ce chapitre, on a développé une plateforme pour coupler le champ hydrodynamique et le champ radiatif dans le but d'évaluer numériquement l'échauffement de la paroi au niveau de l'arrière-corps d'un véhicule de rentrée martienne. Le modèle de propriétés radiatives est un modèle approché, de type statistique à bandes étroites. La méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif est une méthode de type Monte-Carlo, tridimensionnelle et précise.

Après avoir paramétré le modèle radiatif (nombre de chemins optiques, méthode FM, ARM ou ERM), nous avons appliqué la méthode au cas d'épreuve TC3, défini dans le cadre d'un groupe de travail international piloté par l'ESA et le CNES. Nous avons montré que sur cette configuration, la contribution radiative à l'échauffement pariétal ne peut pas être négligée, ni au niveau de l'arrière-corps, ni au niveau de l'avant-corps, du moins si l'on s'écarte suffisamment du point d'arrêt.

La comparaison de nos résultats avec les résultats numériques obtenus par les différents participants au groupe de travail met cependant en évidence une grande incertitude quant à la prédiction du flux radiatif. Au niveau de l'arrière-corps, où l'on s'accorde à dire que le rayonnement provient principalement des contributions dans la plage infrarouge du spectre, les écarts entre les différents auteurs sont larges. Ces écarts sont imputables à la fois au domaine de calcul pris en compte, à la topologie du champ hydrodynamique et donc au raffinement du maillage, à la méthode de calcul des transferts radiatifs, et enfin au modèle de propriétés radiatives.

Dans notre cas, on peut éliminer certaines causes. En effet, nous utilisons une méthode de transferts radiatifs précise et éprouvée dans d'autres contextes [193, 195, 194]. De même, le modèle MSBE a été validé par rapport à un modèle raie-par-raie. De plus, nous avons validé l'implémentation du modèle MSBE dans le solveur de transferts radiatifs ASTRE. Par ailleurs, le couplage entre les champ hydrodynamique et radiatif est très faible. Par conséquent, dans notre cas, l'incertitude porte sur l'extension du domaine de calcul, sur le raffinement du maillage et sur les contributions radiatives prises en compte. En effet, on a vu que le maillage n'est pas suffisamment étendu pour prédire correctement le flux radiatif, notamment au niveau du culot. On a vu également que la topologie du champ hydrodynamique a une influence plus marquée sur les niveaux de flux radiatif que sur les niveaux de flux convectif. Enfin, il est possible que d'autres contributions radiatives, comme le quatrième positif du monoxyde de carbone, jouent un rôle important dans l'écoulement de sillage.

Concernant le calcul sur l'avant-corps, il est clair que le modèle MSBE n'est pas bien adapté à ce type de problèmatique. Cependant, on a pu vérifier les conclusions des laboratoires russes IPMech RAS et NiiMech qui concordent à dire que le rayonnement dans le domaine ultraviolet n'est pas prépondérant dans la couche de choc.

Chapitre 5

Validation de la modélisation hydrodynamique des écoulements faiblement ionisés associée à un schéma de Roe

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la modélisation hydrodynamique des écoulements de rentrée terrestre, les effets radiatifs n'étant pas pris en compte. L'objectif est d'étendre la modélisation du déséquilibre thermique des électrons proposée par Coquel et Marmignon [124] aux écoulements contenant plusieurs espèces ionisées et de la valider pour des vitesses d'écoulement allant jusqu'à $11km/s$. Pour cela, on reprend les développements de Coquel et Marmignon [51, 54] relatifs au schéma numérique de Roe. On cherche ensuite un moyen de s'affranchir des phénomènes d'instabilités numériques de type carbuncle, susceptibles d'apparaître lorsqu'on utilise un schéma de type Roe. Dans un troisième temps, on applique la méthode à différents cas d'épreuve pour lesquels on possède des données expérimentales. On retient trois cas d'épreuve : la sphère de Lobb, la sonde RAM-C II et la sonde FIRE II. D'un cas à l'autre, la vitesse amont est de plus en plus élevée, soit respectivement 5, 8 et $11km/s$. Par conséquent, on s'attend à ce que l'ionisation du gaz soit de plus en plus forte et donc contraignante. On étudie l'influence du maillage et de la modélisation physico-chimique, en particulier du modèle de cinétique chimique et de la condition de catalycité de paroi. Enfin, on vérifie la validité des hypothèses portant sur le gaz d'électrons qui ont été introduites dans le modèle (voir chapitre 2).

5.1 Présentation du schéma de Roe

On s'intéresse à la résolution du système monodimensionnel du premier ordre issu du système (2.63), que l'on rappelle ci-dessous :

$$\partial_t \mathbf{u} + \nabla.\mathbf{f}(\mathbf{u}) = 0$$

L'inconnue $\mathbf{u}$ et la fonction de flux $\mathbf{f}$ du problème monodimensionnel ont pour expression :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (\rho_s, \rho u, \rho v, \rho_m e_{v,m}, \rho s_e, \rho E) \\ \mathbf{f} &= (\rho_s u, \rho u^2 + p + p_e, \rho uv, \rho_m e_{v,m} u, \rho s_e u, (\rho E + p + p_e)u) \end{aligned}$$

Le lecteur est invité à se reporter au chapitre 2 pour de plus amples détails sur le système (2.63) et sur la méthodologie générale de résolution numérique.

Dans ce chapitre, le schéma numérique de calcul des flux convectifs est basé sur une linéarisation de type Roe. La méthode consiste à linéariser le système (2.63) pour ensuite calculer la solution exacte du problème de Riemann associé au système linéarisé. La méthode a été initialement développée par Roe [160] pour résoudre les équations de la dynamique d'un gaz idéal. Elle a été étendue aux mélanges de gaz neutres en déséquilibre par Shuen *et al.* [169] et Abgrall [1], puis adaptée par Coquel et Marmignon [52, 51, 54, 124] pour inclure les effets de l'ionisation et du déséquilibre thermique du gaz d'électrons. Nous présentons ci-dessous la linéarisation de type Roe proposée par Coquel et Marmignon [52, 51, 54, 124].

Considérons une interface séparant deux états gauche L et droit R. Le flux numérique de Roe à l'interface s'écrit :

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R) = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{u}_L)+\mathbf{f}(\mathbf{u}_R)}{2} - \frac{1}{2}|\overline{A}\,(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R)\,|(\mathbf{u}_R-\mathbf{u}_L) \tag{5.1}$$

La matrice $\overline{A}\,(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R)$ est appelée matrice de Roe. Elle doit satisfaire les trois conditions suivantes :

- $\overline{A}(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R)$ est diagonalisable à valeurs propres réelles (5.2a)
- $\overline{A}(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R).(\mathbf{u}_R-\mathbf{u}_L) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_R)-\mathbf{f}(\mathbf{u}_L)$ (5.2b)
- $\overline{A}(\mathbf{u},\mathbf{u}) = \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{f}(\mathbf{u})$ (5.2c)

La matrice de Roe est directement liée à la matrice jacobienne du système (2.63). En effet, la matrice jacobienne $\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{f}(\mathbf{u})$ s'exprime en fonction des paramètres suivants :

$$\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{f}(y_s,u,v,y_m e_{v,m},s_e,H,\nabla_{\mathbf{u}}p,\nabla_{\mathbf{u}}p_e) \tag{5.3}$$

La matrice de Roe s'écrit à partir de la matrice jacobienne en introduisant un ensemble de moyennes entre les états gauche et droit :

$$\overline{A}\,(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R) = \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{f}(\overline{y_s},\overline{u},\overline{v},\overline{y_m e_{v,m}},\overline{s_e},\overline{H},\widetilde{\nabla_{\mathbf{u}}p},\widetilde{\nabla_{\mathbf{u}}p_e}) \tag{5.4}$$

L'opérateur de moyenne $\overline{\cdot}$ correspond à la moyenne classique de Roe [160] :

$$\overline{X} \;=\; \frac{\sqrt{\rho_L}X_L \;+\; \sqrt{\rho_R}X_R}{\sqrt{\rho_L}\;+\;\sqrt{\rho_R}} \tag{5.5}$$

Le terme moyenné $\widetilde{\nabla_{\mathbf{u}}p}$ suit la définition adoptée dans le cas des mélanges de gaz neutres [1]. L'opérateur de moyenne portant sur le gradient de la pression du gaz d'électrons, noté $\widetilde{\nabla_{\mathbf{u}}p_e}$, a été défini par Coquel et Marmignon [52].

Dans la lignée des travaux de Larrouturou [112] dédiés à la linéarisation de type Roe pour les gaz calorifiquement parfaits, Coquel et Marmignon [124] expriment le flux numérique de Roe sous la forme suivante :

$$F_{\rho u}(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R) = \frac{1}{2}\Big\{ f_{\rho u}(\mathbf{u}_L)+f_{\rho u}(\mathbf{u}_R) - (\overline{u}-\overline{c})\Phi^- - \overline{u}\Phi^0 - (\overline{u}+\overline{c})\Phi^+ \Big\} \tag{5.6a}$$

$$\begin{aligned} F_{\rho E}(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R) &= \frac{1}{2}\Big\{ f_{\rho E}(\mathbf{u}_L)+f_{\rho E}(\mathbf{u}_R) - |\overline{u}|\left(\Delta E - \underline{\rho}\Delta\frac{u^2}{2} - \overline{H}\frac{\Delta(p+p_e)}{\overline{c}^2}\right) \\ &- (\overline{H}-\overline{u}\,\overline{c})\Phi^- - (\overline{H}+\overline{u}\,\overline{c})\Phi^+ \Big\} \end{aligned} \tag{5.6b}$$

$$F_{\rho X}(\mathbf{u}_L,\mathbf{u}_R) = \Psi^+X_L + \Psi^-X_R, \qquad X = y_s, v, y_m e_{v,m}, s_e \tag{5.6c}$$

Dans ces expressions, on a posé :

$$\underline{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \tag{5.7a}$$
$$\Delta X = X_R - X_L \quad \text{pour toute variable X} \tag{5.7b}$$

On a introduit les expressions suivantes :

$$\Phi^{\pm} = \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta(p+p_e)}{\overline{c}^2} \pm \underline{\rho}\frac{\Delta u}{\overline{c}}\right)|\overline{u} \pm \overline{c}| \tag{5.8a}$$
$$\Phi^{0} = \left(\Delta\rho - \frac{\Delta(p+p_e)}{\overline{c}^2}\right)|\overline{u}| \tag{5.8b}$$
$$\Psi = \Phi^{-} + \Phi^{0} + \Phi^{+} \tag{5.8c}$$
$$\Psi^{+} = \frac{1}{2}\left(\rho_L u_L + \underline{\rho}|\overline{u}| - \frac{\sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}}\Psi\right) \tag{5.8d}$$
$$\Psi^{-} = \frac{1}{2}\left(\rho_R u_R - \underline{\rho}|\overline{u}| - \frac{\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}}\Psi\right) \tag{5.8e}$$

Le terme $\overline{c}$ correspond à une moyenne de la vitesse du son définie par la relation :

$$\overline{c}^2 = \sum_s \breve{\chi}_s \overline{y_s} + \breve{\kappa}\left(\overline{H} - \frac{1}{2}(\overline{u}^2+\overline{v}^2) - \sum_m \overline{y_m e_{v,m}}\right) + (\kappa_e - \breve{\kappa})\widehat{h(s_e)}\frac{\rho_R^{\gamma_e} - \rho_L^{\gamma_e}}{\rho_R - \rho_L} \tag{5.9}$$

Les termes moyennés additionnels sont définis comme suit :

$$\breve{\kappa} = \overline{Z}\frac{R}{\displaystyle\sum_s \overline{y_s}\left(\overline{Cv_{tr,s}} + \frac{\Delta e_{i,s}(T)}{\Delta T}\right)} \tag{5.10a}$$
$$\breve{\chi}_s = Cv_{tr,s}(\kappa_{tr,s} - \breve{\kappa})\overline{T} - \breve{\kappa}(\overline{h^0_{f,s} + e_{i,s}(T)}) \tag{5.10b}$$
$$\widehat{h(s_e)} = \frac{k(\rho_R)h(s_{eR}) + k(\rho_L)h(s_{eL})}{k(\rho_R)+k(\rho_L)} \tag{5.10c}$$

où l'on a posé :

$$Z = \sum_s y_s/M_s \tag{5.11a}$$
$$k(\rho) = \rho^{\gamma_e - 1/2} \tag{5.11b}$$
$$\kappa_{tr,s} = Cp_{tr,s}/Cv_{tr,s} - 1 \tag{5.11c}$$

Le terme $e_{i,s}(T)$ désigne, pour l'espèce chimique s, l'énergie des modes internes qui sont à l'équilibre avec le mode de translation. Le terme $Cv_{tr,s}$ (resp. $Cp_{tr,s}$) représente la capacité calorifique à volume (resp. pression) constant de l'espèce s pour les modes de translation-rotation.

Pour stabiliser la méthode numérique, on utilise la correction entropique de Harten [84] qui consiste à modifier localement l'amplitude des valeurs propres du système de manière à ce qu'elles ne s'annulent pas. Les valeurs propres sont au nombre de trois et ont pour valeur : $\overline{u} - \overline{c}$, $\overline{u}$, $\overline{u} + \overline{c}$. Elle apparaissent dans les expressions du flux numérique de Roe. Avec la correction de Harten [84], la valeur propre $\overline{\lambda}$ est remplacée par l'expression suivante :

$$\overline{\lambda}_H = \begin{cases} |\overline{\lambda}| & \text{si } |\overline{\lambda}| - \overline{\varrho} \geq 0 \\ \frac{1}{2}(\overline{\lambda}^2/\overline{\varrho} + \overline{\varrho}) & \text{si } |\overline{\lambda}| - \overline{\varrho} < 0 \end{cases} \tag{5.12}$$

où :

$$\overline{\varrho} = k_H(\|\overline{U}\| + \overline{c}) \tag{5.13}$$

Le terme $\|\overline{U}\|$ désigne la norme euclidienne de la vitesse moyennée, soit $\|\overline{U}\| = \sqrt{\overline{u}^2 + \overline{v}^2}$. Le paramètre k_H doit être proche de zéro dans la couche limite afin de limiter la dissipation numérique introduite par la méthode. Typiquement, la valeur $0,001$ est choisie. Dans la région du choc, le paramètre k_H est pris égal à $0,2$.

5.2 Traitement curatif du carbuncle par adaptation de maillage

Le carbuncle est une pathologie de certains schémas numériques à capture de choc. Ainsi, Gressier et Moschetta [76] suggèrent que le phénomène de carbuncle affecte les schémas numériques qui conservent exactement les ondes résultant des discontinuités de contact. Le schéma de Roe rentre dans cette catégorie.

Le carbuncle se traduit par une protubérance anormale pointant dans la direction amont et incluant une zone de recirculation au niveau du point d'arrêt [61]. L'instabilité prend son origine dans l'écoulement amont et est ensuite convectée vers l'aval. Il s'agit d'une solution stable, satisfaisant le principe d'entropie.

Plusieurs études ont été menées afin de pallier à l'apparition de ce défaut numérique, par exemple en ajoutant de la dissipation numérique de manière locale [119] ou en modifiant l'expression du flux numérique de Roe [107]. D'autre part, une étude de stabilité [61, 40] a mis en évidence l'existence d'un lien entre la distorsion du maillage et l'apparition du carbuncle. En effet, Dumbser *et al.* [61] ont étudié la stabilité d'un champ stationnaire soumis à de petites perturbations numériques, dans le cadre des écoulements eulériens de gaz parfait. L'évolution temporelle de ces perturbations s'écrit sous la forme :

$$\delta\mathbf{u}(t) = e^{St} \cdot (\delta\mathbf{u})_{t=0} \tag{5.14}$$

La matrice S est appelée matrice de stabilité. Au vu de l'équation (5.14), la solution reste bornée si toutes les valeurs propres λ_S de la matrice de stabilité sont à partie réelle négative. On en déduit le critère de stabilité suivant :

$$\max[\mathcal{R}e(\lambda_S)] \leq 0 \tag{5.15}$$

Par ce critère de stabilité, Dumbser *et al.* [61] ont mis en exergue un lien entre l'allongement des cellules du maillage et l'apparition du carbuncle. L'allongement, noté δ, se définit comme le rapport des tailles de cellule dans la direction longitudinale ξ et dans la direction normale à la paroi η, soit :

$$\delta = \Delta\xi/\Delta\eta \tag{5.16}$$

La figure 5.1 montre que l'instabilité apparaît pour un allongement supérieur à une valeur comprise entre 10 et 30. La valeur critique augmente avec le nombre de Mach.

A la lumière de ces travaux, nous cherchons un critère empirique portant sur l'allongement des cellules du maillage, dans le cadre de la résolution des écoulements hypersoniques à l'aide du schéma de Roe. Pour faciliter l'étude, nous nous limitons aux écoulements non-visqueux de mélanges de gaz neutres à l'équilibre thermique. Nous choisissons le cas d'épreuve FIRE II [55, 30, 29], que l'on présentera en détail au paragraphe 5.3.3. Le point de vol est le

Tab. 5.1: Données de maillages utilisés pour l'étude du carbuncle

$\Delta\eta$ / $\Delta\xi$	$0,74mm^*$	$1,41mm$	$1,89mm$	$2,86mm$
$19mm$			$\times$	$\times$
$43mm$	$\times$	$\times$	$\times$	$\times$
$65mm$	$\times$			$\times$

* Valeur dans le choc, $\Delta\eta = 2,86mm$ en dehors

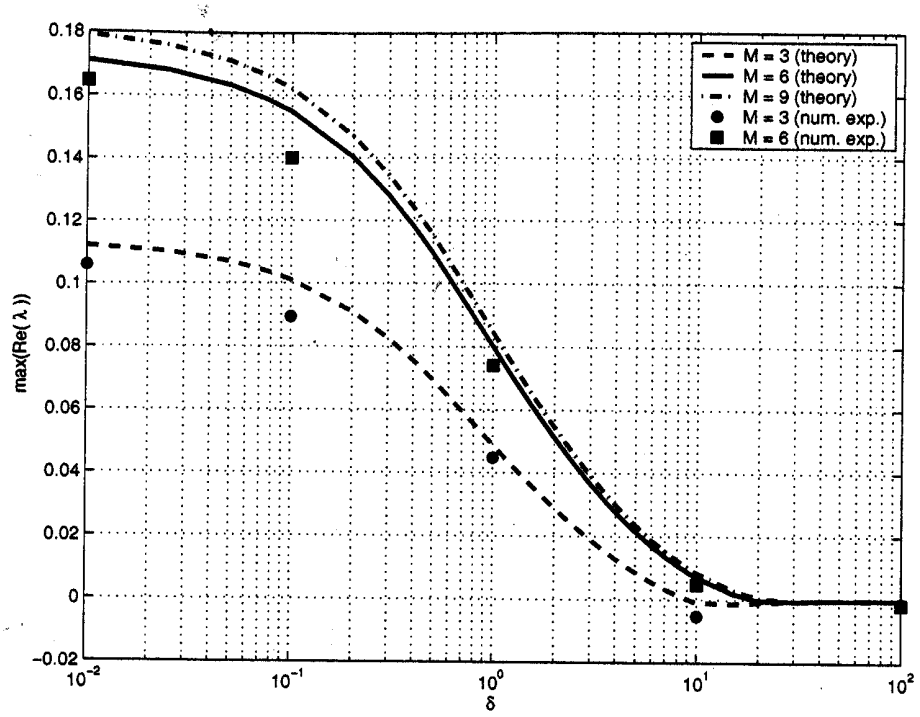


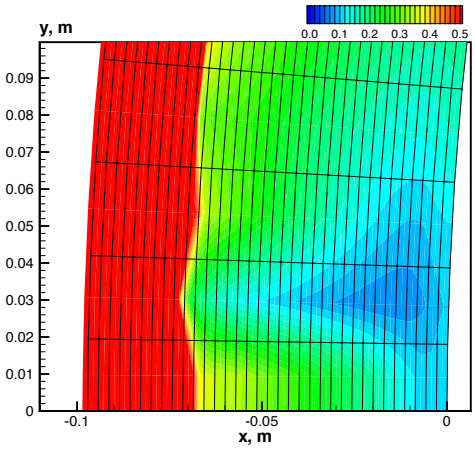
Fig. 5.1: Influence de la distorsion de maillage et du nombre de Mach sur l'instabilité (schéma de Osher, maillage 11×11, $\Delta\eta$=1), figure extraite de Dumbser *et al.* [61]

point $t = 1640,5s$. Le nombre de Mach est élevé (de l'ordre de 34), ce qui favorise l'apparition du carbuncle.

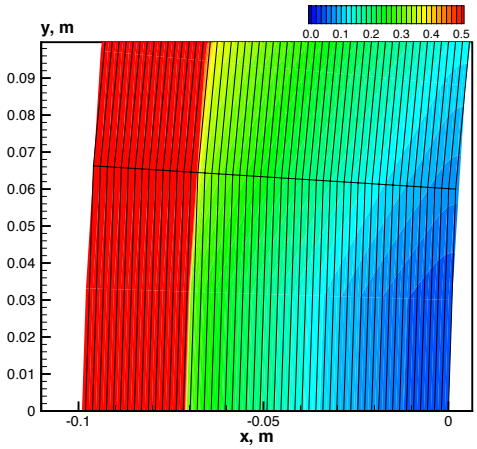
La recherche du critère conduit à la construction de différents maillages.

Dans un premier temps, la discrétisation dans la direction η est uniforme. La taille de cellule $\Delta\eta$ est prise égale à $1,41mm$, $1,89mm$ ou $2,86mm$. Au niveau de la ligne d'arrêt, la taille de cellule $\Delta\xi$ est prise égale à $19mm$, $43mm$ ou $65mm$. L'allongement des cellules est par conséquent compris entre 5 et 35. Les données de maillage sont indiquées dans le tableau 5.1. On ne teste pas toutes les configurations géométriques car certaines ne s'avèrent pas pertinentes pour déterminer le critère d'apparition du carbuncle (voir figure 5.2(f)).

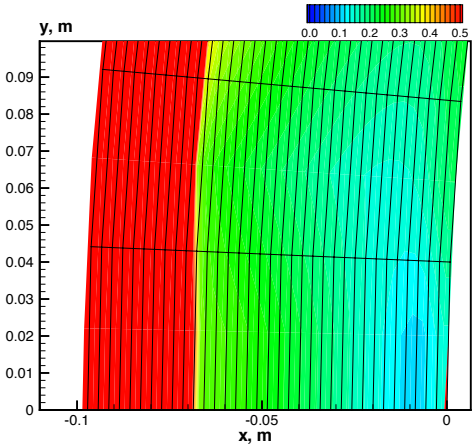
Dans un deuxième temps, on désire vérifier si le critère porte sur l'ensemble du maillage ou uniquement sur les cellules situées au niveau du choc. Dans ce but, on construit un maillage raffiné au niveau du choc dans la direction normale. La taille de cellule $\Delta\eta$ vaut $0,74mm$ dans la zone du choc et $2,86mm$ en dehors.



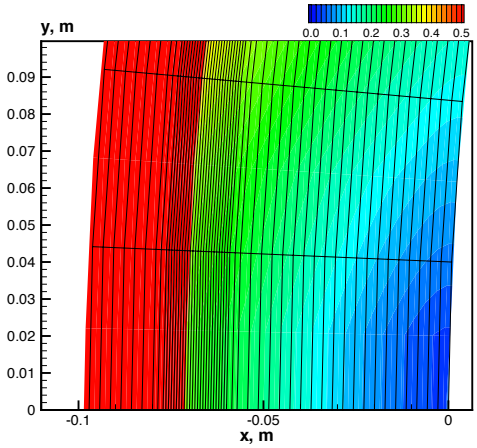
(a) $\Delta\eta = 2,86mm$, $\Delta\xi = 19mm$



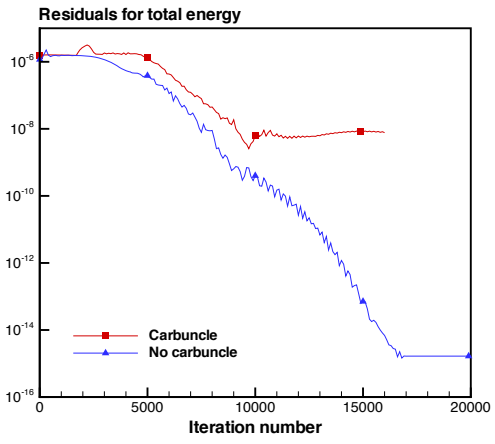
(b) $\Delta\eta = 1,89mm$, $\Delta\xi = 65mm$



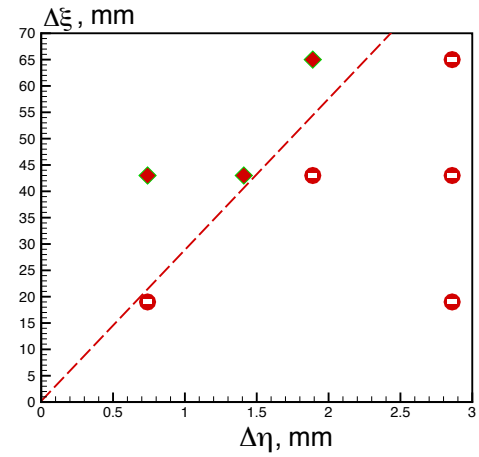
(c) $\Delta\eta = 2,86mm$, $\Delta\xi = 43mm$



(d) $\Delta\eta = 2,86mm$ **raffiné à** $0,74mm$ **dans le choc,** $\Delta\xi = 43mm$



(e) **Historique de convergence pour les résidus de la variable énergie totale**



(f) **Lien entre le maillage et l'apparition (disque rouge) ou non (diamant vert) du carbuncle**

Fig. 5.2: Etude du carbuncle : champs de nombre de Mach, maillages et historique de convergence, configuration FIRE II $1640,5s$ [55, 30, 29]

La figure 5.2 présente les résultats de l'étude. On a tracé les champs de nombre de Mach obtenus avec les différents maillages. Le champ attendu correspond aux figures 5.2(b) et 5.2(d). A l'opposé, le champ tracé sur la figure 5.2(a) (et dans une moindre mesure sur la figure 5.2(c)) présente clairement une protubérance anormale en forme de pointe dirigée vers l'amont du choc. Cette protubérance est caractéristique du carbuncle.

La comparaison entre les figures 5.2(c) et 5.2(d) montre que raffiner le maillage au niveau du choc est suffisant pour faire disparaître le carbuncle.

La figure 5.2(e) montre l'influence du carbuncle sur l'évolution des résidus. Dans le cas où la solution présente une pathologie, les résidus ne diminuent que de deux ordres de grandeur et n'atteignent pas un niveau strictement constant.

La figure 5.2(f) présente un bilan des résultats : les points rouges (disques) correspondent aux maillages qui conduisent à l'apparition du carbuncle, les points verts (diamants) à ceux qui en sont exempts. On peut s'affranchir du carbuncle soit en augmentant $\Delta\xi$ à $\Delta\eta$ fixé, soit en diminuant $\Delta\eta$ à $\Delta\xi$ fixé. Le critère déterminant est donc bien l'allongement $\delta = \Delta\xi/\Delta\eta$. La ligne discontinue séparant les deux zones sur la figure 5.2(f) permet de donner une valeur d'allongement critique de l'ordre de 28 en-deçà de laquelle le carbuncle apparaît. Cette valeur est en bon accord avec les résultats de l'étude de stabilité de Dumbser *et al.* [61].

En conclusion, l'étude montre que, moyennant certaines précautions relatives à l'allongement des cellules dans la zone de choc, on peut s'affranchir simplement de l'apparition du phénomène de carbuncle. Dans la suite, on prendra garde à ce que les maillages vérifient le critère empirique de stabilité $\delta > 28$.

5.3 Validation de la modélisation hydrodynamique par application à trois cas d'épreuve

Dans cette partie, l'objectif est de valider la modélisation hydrodynamique proposée par Coquel et Marmignon [53, 54, 124] dans le cadre d'écoulements contenant plusieurs espèces ionisées et pour des vitesses allant jusqu'à $11km/s$.

Le premier cas d'épreuve correspond aux expériences de Lobb [121] réalisées sur un corps de type sphère-cône. La vitesse de l'écoulement est relativement faible, de l'ordre de $5km/s$. Par conséquent, l'ionisation du gaz est quasiment négligeable dans ce cas. Cependant, les calculs sur la sphère de Lobb permettent d'éprouver la méthode numérique. L'approche consiste à comparer la solution obtenue avec un modèle chimique à cinq espèces (N_2, O_2, NO, N et O) à celle obtenue avec un modèle chimique à sept espèces (N_2, O_2, NO, N, O, NO^+ et e^-). On rappelle que l'espèce NO est l'espèce susceptible de s'ioniser le plus facilement lorsque la vitesse d'un écoulement d'air augmente (chapitre 1, figure 1.7).

Le second cas d'épreuve correspond à l'essai en vol RAM-C II [166, 56]. La vitesse de l'écoulement est plus élevée, de l'ordre de $8km/s$. Pour ce cas, on réalise une étude plus complète. Le modèle chimique se compose de onze espèces (N_2, O_2, NO, N, O, N_2^+, O_2^+, NO^+, N^+, O^+ et e^-). On s'intéresse en particulier à la convergence en maillage du calcul, ainsi qu'à l'influence sur les résultats du modèle de cinétique chimique et de la condition de catalycité de paroi.

Le troisième cas d'épreuve correspond à l'essai en vol FIRE II [55, 30, 29]. Les calculs portent sur quatre points de vol. En début de rentrée ($t = 1634s$), la vitesse de l'écoulement est de l'ordre de $11km/s$. Pour ce cas, on s'intéresse à l'effet du raffinement de maillage et à l'influence sur les résultats du modèle de cinétique chimique et de la modélisation physico-chimique.

Tab. 5.2: Paramètres des cas d'application numérique

Cas d'épreuve	Point de vol, s	Altitude, km	Densité, kg/m^3	Vitesse, km/s	Nombre de Mach
Sphère de Lobb	-	$\simeq$35	$7,89 \cdot 10^{-3}$	5,263	15,35
RAM-C II	-	61	$2,69 \cdot 10^{-4}$	7,650	23,9
	-	71	$7,65 \cdot 10^{-5}$	7,659	25,9
FIRE II	$1634,0s$	76	$3,72 \cdot 10^{-5}$	11,36	40,5
	$1640,5s$	59,26	$3,86 \cdot 10^{-4}$	10,97	34,3
	$1643,0s$	53,04	$7,80 \cdot 10^{-4}$	10,48	31,4
	$1648,5s$	41,23	$3,40 \cdot 10^{-3}$	7,96	24,6

Le tableau 5.2 résume les conditions de vitesse et d'altitude de chaque cas d'épreuve. D'un cas à un autre, on rencontre des vitesses d'écoulement plus élevées et des densités du milieu plus faibles. Par conséquent, l'effet de l'ionisation est de plus en plus important et l'on s'écarte de plus en plus des conditions d'équilibre thermique.

Par ailleurs, pour les deux premiers cas d'épreuve, la modélisation physico-chimique utilisée correspond au modèle simplifié décrit dans le chapitre 2. Pour le cas FIRE II, on compare les solutions obtenues avec les modèles simplifié et complet décrits dans le tableau 2.1.

5.3.1 Sphère de Lobb

Aux cours d'expériences réalisées dans l'air sur une demi-sphère prolongé par un cylindre, Lobb [121] a mesuré la distance de détachement du choc. Le rayon de la sphère est de $R = 6,35mm$ et la longueur du cylindre est de $1,3m$. Les pression et température amont valent respectivement $664Pa$ et $293K$, le nombre de Mach étant de $15,35$. La température moyenne de la paroi est de $1000K$. La paroi est supposée non-catalytique.

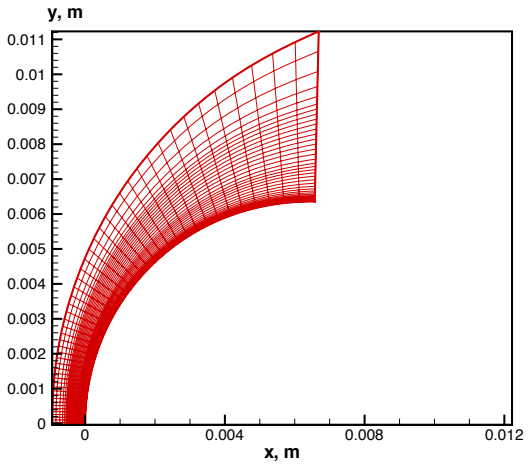
Dans un premier temps, on considère un mélange gazeux à 5 espèces (N_2, O_2, NO, N, O) que l'on nomme modèle "air-5". Puis on ajoute à ce mélange les ions NO^+ et les électrons. Le modèle chimique ainsi obtenu est appelé "air-7". Dans les deux cas, on utilise le modèle de cinétique chimique de Park [153, 148]. La paroi est supposée non catalytique. La modélisation physico-chimique utilisée est la modélisation simplifiée présentée au chapitre 2 (tableau 2.1). Les calculs portent sur la partie sphérique du corps uniquement. Le maillage, présenté sur la figure 5.3(a), contient 50 mailles dans chaque direction. Il est raffiné à la paroi pour représenter correctement la couche limite. La taille de première maille est de $10^{-6}m$ dans la direction normale et $7 \times 10^{-5}m$ dans la direction longitudinale.

Le choc détaché est clairement apparent sur le champ de pression (figure 5.3(b)). Sur la ligne d'arrêt, le choc est positionné à une distance de $0,535mm$ ($x/R = 0,084$) de la paroi. Le tableau 5.3 montre que ce résultat est en bon accord avec la valeur mesurée expérimentalement [121] et avec les résultats numériques trouvés dans la littérature [100, 167, 190].

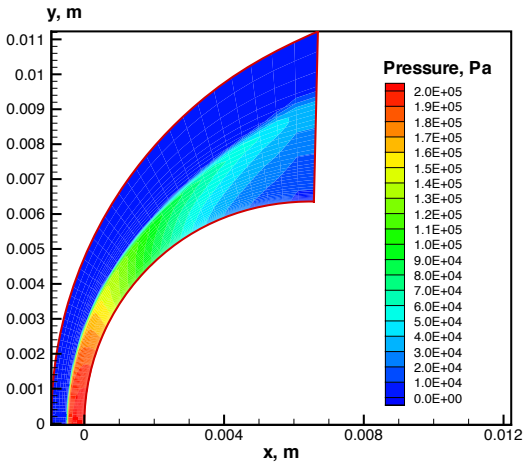
La figure 5.3(c) présente les distributions de températures le long de la ligne d'arrêt. Le déséquilibre thermique est clairement apparent. Comme mentionné précédemment, l'influence de l'ionisation est très limitée. En effet, les solutions obtenues en utilisant les modèles chimiques "air-5" ou "air-7" sont très proches. La figure 5.3(d) présente les fractions massiques des espèces le long de la ligne d'arrêt. Conformément aux prévisions, la fraction massique de l'espèce ionisée NO^+ est très faible en comparaison des fractions massiques des espèces neutres puisqu'elle ne

Tab. 5.3: Position du choc et flux de chaleur au point d'arrêt de la sphère de Lobb

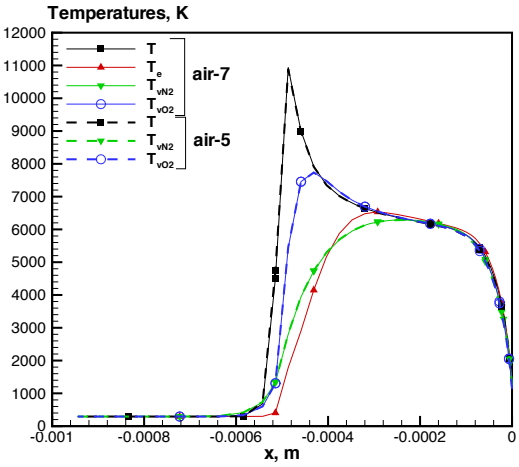
Source	Position du choc, mm	Flux de chaleur, MW/m^2
Présent	$0,535$	$24,0$
Tchuen [190]	$0,531$	$26,3$
Joly *et al.* [100]	$0,598$	$25,3$
Séror [167]	$0,557$	$23,2$
Lobb [121]	$0,552 \pm 0,032$	-



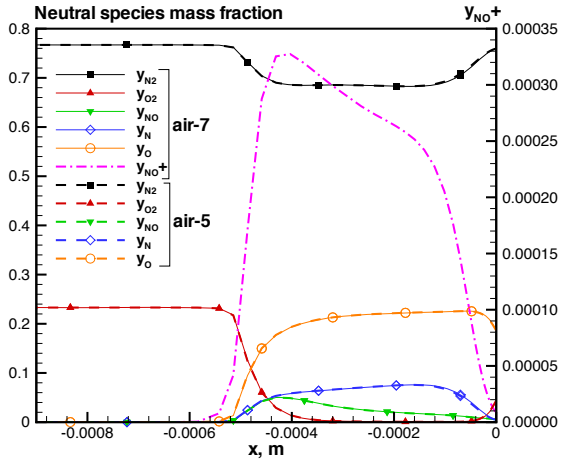
(a) **Maillage**



(b) **Champ de pression, modèle chimique "air-7"**



(c) **Températures le long de la ligne d'arrêt**



(d) **Fractions massiques le long de la ligne d'arrêt**

Fig. 5.3: Sphère de Lobb

dépasse pas $0,03\%$.

Le flux de chaleur au point d'arrêt est de l'ordre de $24,5 MW/m^2$ pour le modèle "air-5" et $24 MW/m^2$ pour le modèle "air-7". Le tableau 5.3 montre que ces valeurs sont en bon accord avec les autres résultats numériques [100, 167, 190].

5.3.2 Sonde RAM-C II

Au cours de la rentrée d'un véhicule dans l'atmosphère terrestre, on constate parfois des dégradations du signal radio utilisé lors des échanges de communication entre le sol et le véhicule (phénomène de *"black out"*). L'expérience en vol RAM-C II (Radio Attenuation Measurement) [166, 56] réalisée dans les années soixante avait pour but d'étudier les phénomènes à l'origine de ces dégradations, liées à l'ionisation de l'écoulement, en mesurant entre autres la densité en électrons dans l'écoulement autour de la sonde. Ces données en vol sont parmi les seules existantes actuellement pour la validation des codes de calcul.

La sonde a une configuration de type sphère-cône (figure 5.4) avec un rayon de nez de $R = 0,1524m$, un demi-angle de cône de 9° et une longueur totale de $1,295m$.

Plusieurs auteurs ont réalisé des simulations numériques sur le cas d'épreuve RAM-C II. Parmi ces derniers, Candler et MacCormack [26], Josyula et Bailey [102] et Tchuen (code CARBUR) [190] ont utilisé le modèle "air-7" et supposé que l'écoulement est en déséquilibre thermique. Barbante [15] a supposé l'écoulement à l'équilibre thermique mais a inclus plusieurs espèces ionisées dans son modèle chimique. Walpot (code LORE) [205] a tenu compte du déséquilibre thermique et inclus plusieurs espèces ionisées. Il a mené une étude de convergence en maillage et une analyse de l'influence du modèle de cinétique chimique. Le lecteur est invité à se reporter à l'étude bibliographique présentée au chapitre 1 (§ 1.3.1) pour connaître le détail des modélisations retenues par chacun de ces auteurs.

Les calculs portent sur deux points de la trajectoire de la sonde : d'une part à l'altitude $61km$ pour laquelle la couche de choc est proche des conditions d'équilibre thermochimique, d'autre part à l'altitude $71km$ qui correspond à un écoulement "modérément" réactif.

5.3.2.1 Altitude 61km : étude de la convergence en maillage et de l'influence du modèle de cinétique chimique

La vitesse, le nombre de Mach, la température et la pression à l'infini amont valent respectivement $7650m/s$, $23,9$, $254K$ et $19,7Pa$. La paroi est supposée non-catalytique et sa température est fixée à $1500K$. Concernant la condition de paroi pour la température des électrons, nous avons testé les deux conditions limites suivantes : dans un premier temps,

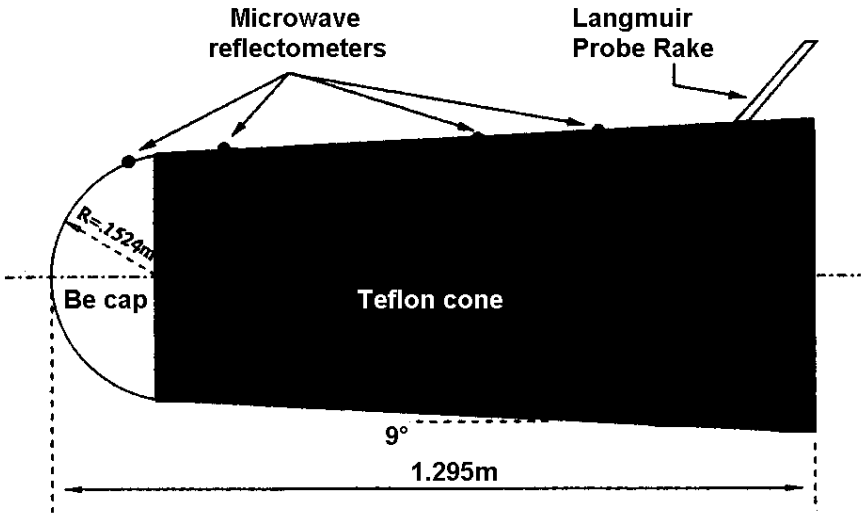


Fig. 5.4: Géométrie de la sonde RAM-C II

la condition d'isotempérature $(T_e)_w = T_w$, dans un second temps la condition d'adiabaticité $(\nabla T_e)_w = 0$ proposée par Park [149]. Cette dernière condition n'a pas d'influence significative par rapport à la précédente sur la distribution de température des électrons. Par conséquent, on présente uniquement les résultats obtenus avec la condition de paroi isotherme.

Le mélange gazeux se compose de onze espèces chimiques (N_2, O_2, NO, NO^+, O_2^+, N_2^+, N, O, N^+, O^+, e^-). Le modèle de cinétique chimique est soit le modèle de Park [153, 148] soit le modèle de Dunn et Kang [62]. La modélisation physico-chimique utilisée est la modélisation simplifiée présentée au chapitre 2 (tableau 2.1).

Nous utilisons quatre maillages. Le premier maillage couvre l'ensemble de la géométrie. Il contient 100×52 cellules (figure 5.5(a)) et il est raffiné dans la couche limite. La taille de première maille est de $10^{-5}m$ dans la direction normale à la paroi et $5 \cdot 10^{-4}m$ dans la direction longitudinale. Par la suite, pour limiter les coûts en temps de calcul, le maillage est tronqué pour ne couvrir que la partie avant de la géométrie, jusqu'à l'abscisse $x = 0,14m$ environ. Ce second maillage contient 52×52 cellules. Ce dernier est ensuite raffiné en doublant le nombre de cellules dans chaque direction. On obtient ainsi deux nouveaux maillages contenant 104×104 et 208×208 cellules. Les tailles de première maille valent respectivement $5 \cdot 10^{-6}m$ et $2.5 \cdot 10^{-6}m$. On note en outre que pour le maillage le plus fin, le nombre de Reynolds de cellule est de l'ordre de $1,0$ dans la couche limite. Les calculs sont menés d'abord sur le maillage le plus grossier, puis la solution est projetée sur le maillage raffiné. Les trois maillages portant sur l'avant-corps permettent une étude de convergence en maillage.

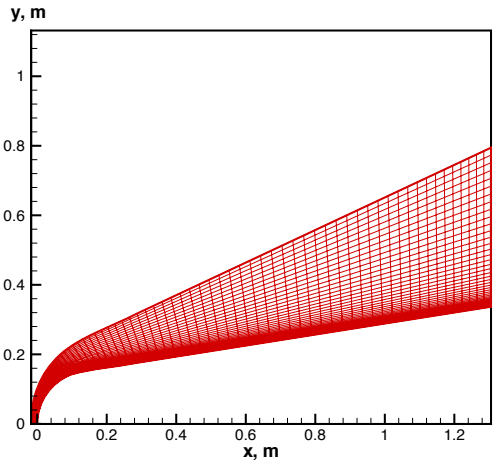
Les résultats présentés correspondent à une solution stationnaire obtenue après décroissance des résidus quadratiques moyens de huit à neuf ordres de grandeur. En fin de calcul, les résidus sont constants. En partant d'un champ uniforme, environ 50000 itérations sont nécessaires pour atteindre la solution convergée. Le nombre CFL en fin de calcul est égal à 30. La machine utilisée est une Silicon Graphics Origin 3400 de 64 Go de mémoire. Le processeur est de type R14000A@600MHz. Le temps de calcul par cellule et par pas de temps est de l'ordre de $0,5ms$.

La figure 5.5(b) présente le champ de pression obtenu avec le modèle de cinétique chimique de Dunn et Kang [62] et le maillage 208×208. Le choc est positionné à $10mm$ de la paroi ($x/R = 0,0065$). Cette valeur est similaire à celle obtenue avec le modèle "air-7" [124].

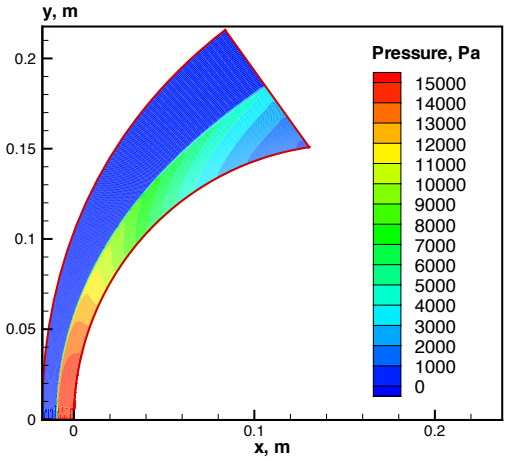
La figure 5.5(c) présente les distributions de températures le long de la ligne d'arrêt. Il existe un fort déséquilibre thermique au niveau du choc, mais les températures s'équilibrent rapidement en aval du choc. Le pic de température de translation se situe autour de $17000K$ pour le maillage grossier tandis que les maxima pour les températures de vibration et du gaz d'électrons n'atteignent que la moitié de cette valeur. Lorsqu'on raffine le maillage, le choc s'affine et le pic de température de translation croît jusqu'à la valeur de $19400K$. La même tendance a été observée par Walpot [205]. La température des électrons T_e est soumise à un fort gradient au passage du choc. Josyula et Bailey [102] ont obtenu un comportement similaire. En revanche, Candler et MacCormack [26], Walpot [205] et Tchuen [190] ont obtenu une croissance lente et progressive de la température du gaz d'électrons, qui s'équilibre avec les autres températures uniquement à proximité de la paroi.

La figure 5.5(d) présente les distributions de fractions massiques des espèces neutres le long de la ligne d'arrêt. En aval du choc, l'oxygène diatomique est complètement dissocié tandis que seule la moitié de l'azote diatomique est dissociée. Le modèle de Park [153, 148] conduit à une distance de détachement du choc plus faible par rapport au modèle de Dunn et Kang [62]. D'autre part, le modèle de Park [153, 148] prévoit une dissociation plus forte de l'azote N_2 dans la couche de choc.

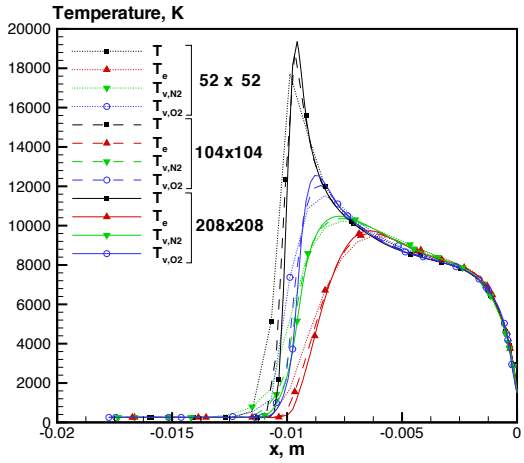
Les figures 5.5(e) et 5.5(f) présentent les distributions de températures et de fractions mas-



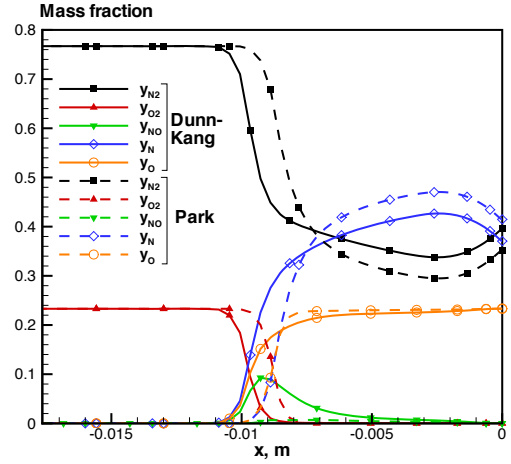
(a) **Maillage** 100×52



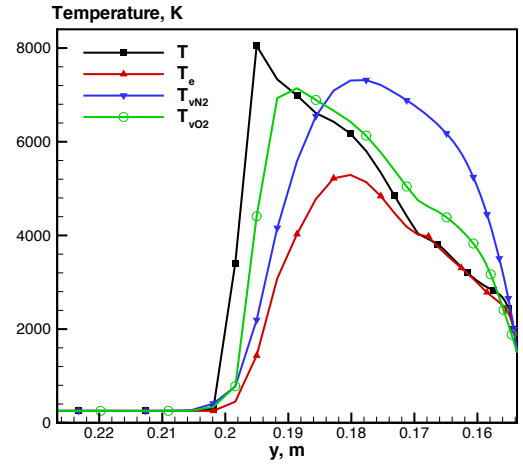
(b) **Champ de pression, modèle de Dunn et Kang, maillage** 208×208



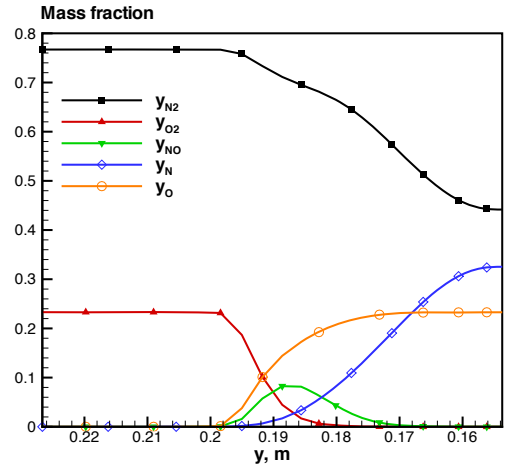
(c) **Convergence en maillage des profils de températures le long de la ligne d'arrêt, modèle de Dunn et Kang**



(d) **Fractions massiques des espèces neutres le long de la ligne d'arrêt, maillage** 104×104

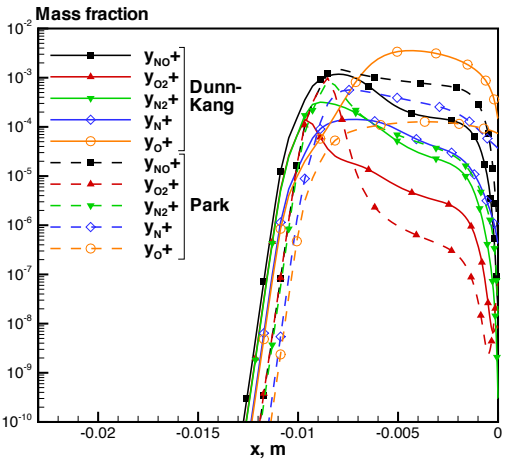


(e) **Températures à la position** $x/R = 1$**, modèle de Dunn et Kang, maillage** 100×52

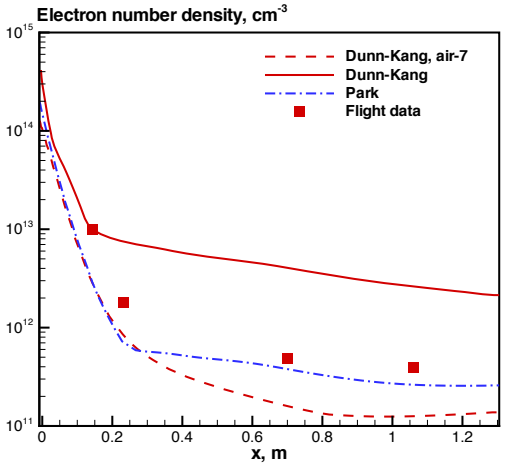


(f) **Fractions massiques à la position** $x/R = 1$**, modèle de Dunn et Kang, maillage** 100×52

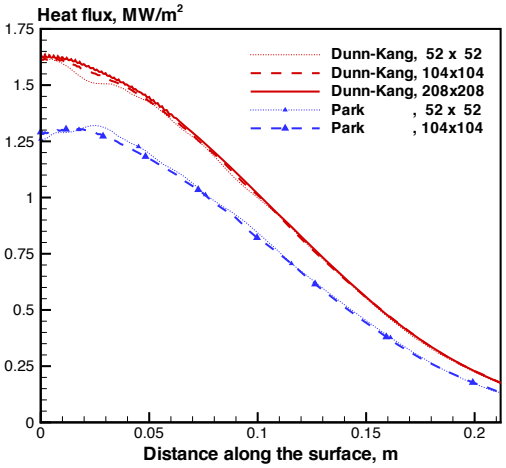
Fig. 5.5: RAM-C II 61km, partie 1/2



(g) **Fractions massiques des espèces ionisées le long de la ligne d'arrêt, maillage** 104×104



(h) **Pic de densité en électrons libres, maillage** 100×52



(i) **Flux de chaleur à la paroi**

Fig. 5.5: RAM-C II 61km, partie 2/2

siques à la position $x/R = 1$ obtenues avec le modèle de Dunn et Kang [62]. Ces distributions sont tracées selon une ligne de maillage. Le pic de la température de translation des espèces lourdes atteint environ $8000K$. L'azote diatomique est moins dissocié que le long de la ligne d'arrêt tandis que l'oxygène diatomique reste complètement dissocié.

La figure 5.5(g) compare les prédictions des modèles chimiques de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62] pour les distributions de fractions massiques des ions le long de la ligne d'arrêt. La principale différence réside en une production en ions O^+ beaucoup plus forte avec le modèle de Dunn et Kang [62]. Walpot [205] a observé la même tendance. Les fractions massiques des ions restent cependant faibles, elles ne dépassent pas $0,3\%$.

La figure 5.5(h) présente le pic de densité des électrons en fonction de la distance axiale. La figure permet de comparer les prédictions obtenues avec les deux modèles chimiques et la mesure en vol. Le modèle de Park [153, 148] conduit à des résultats en meilleur accord avec les données expérimentales. Le modèle de Dunn et Kang [62] surrestime la densité électronique le long de l'arrière-corps. Cette surestimation est probablement due à la forte production d'ions O^+

prédite par le modèle. Walpot [205] a également observé cette tendance. Les résultats obtenus avec le modèle chimique à sept espèces utilisant les taux de réactions de Dunn et Kang [62] sont également présentés : on peut noter que prendre en compte l'ensemble des espèces ionisées augmente la densité électronique mais n'améliore pas l'accord avec les mesures en vol.

La figure 5.5(i) présente l'évolution du flux de chaleur le long de la paroi. Raffiner le maillage lisse la courbe de flux. Le maillage 104×104 est suffisant pour obtenir une bonne précision des résultats. Le flux de chaleur prédit en utilisant les taux de réactions de Park [153, 148] est légèrement plus faible que lorsque les taux de Dunn et Kang [62] sont utilisés. Cependant, l'écart s'amenuise lorsqu'on s'éloigne du point d'arrêt. Le modèle de Dunn et Kang [62] conduit à un flux de chaleur au point d'arrêt égal à $1,6MW/m^2$. Un flux de $1,3MW/m^2$ est obtenu avec le modèle de Park [153, 148]. Pour le même cas d'épreuve et en utilisant le modèle de Park de 1985 [146], Tchuen [190] a obtenu un flux de chaleur de $4,2MW/m^2$, soit presque le triple par rapport à nos résultats. Il y a donc un profond désaccord entre les résultats de Tchuen [190] et nos résultats pour ce cas d'épreuve, alors que pour le cas de la sphère de Lobb, nous avons obtenu des résultats similaires.

Afin de déterminer l'origine de ce désaccord, on calcule l'écoulement autour de la sonde RAM-C II à l'altitude de $71km$ car on dispose d'un plus grand nombre de résultats numériques [26, 205, 190] pour ce point de trajectoire.

5.3.2.2 Altitude 71km : étude de l'influence du modèle de cinétique chimique et de la catalycité de paroi

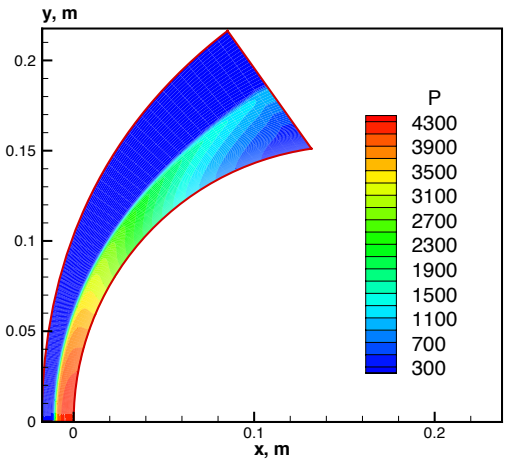
La vitesse, le nombre de Mach, la température et la pression à l'infini amont valent respectivement $7659m/s$, $25,9$, $216K$ et $4,8Pa$. La température de la paroi est fixée à $1500K$. Pour étudier l'effet de la condition de catalycité de paroi, on suppose cette dernière soit non catalytique, soit pseudo-catalytique comme l'a fait Walpot [205].

La figure 5.6(a) présente le champ de pression obtenu avec le modèle de Park [153, 148] et le maillage 104×104. Sur la ligne d'arrêt, le choc est positionné à $12mm$ ($x/R = 0,079$) de la paroi. Cette valeur est en bon accord avec les résultats de Tchuen [190] puisque ce dernier obtient la valeur $x/R = 0,085$. La position du choc est décalée de 20% vers l'aval par rapport au cas à l'altitude de $61km$.

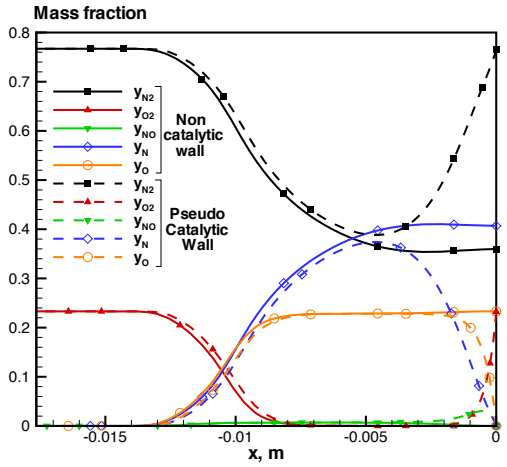
Les fractions massiques des espèces lourdes le long de la ligne d'arrêt sont présentées sur la figure 5.6(b). Les courbes indiquent que les taux réactionnels sont inférieurs au taux obtenus à l'altitude de $61km$. En effet, lorsque l'altitude augmente, la densité du milieu diminue. Les collisions entre particules sont moins nombreuses. De ce fait, les taux des processus collisionnels sont plus faibles. D'autre part, le comportement à la paroi change radicalement lorsqu'on modifie la condition de catalycité. En effet, appliquer la condition de pseudo-catalycité force la recombinaison des molécules. L'azote recombine sur une couche de $5mm$ d'épaisseur, tandis que l'oxygène recombine à seulement $2mm$ de la paroi.

La figure 5.6(c) présente les distributions de températures le long de la ligne d'arrêt. Le pic de température de translation des espèces lourdes atteint $18660K$. La température de vibration de l'espèce N_2 et la température des électrons s'équilibrent avec la température T à une position située plus en aval par rapport au cas à l'altitude de $61km$. Ce comportement confirme que les conditions d'écoulement à l'altitude de $71km$ conduisent à un déséquilibre relativement important dans la couche de choc, tant chimique que thermique, tandis que l'altitude de $61km$ correspond à un régime plus proche de l'équilibre.

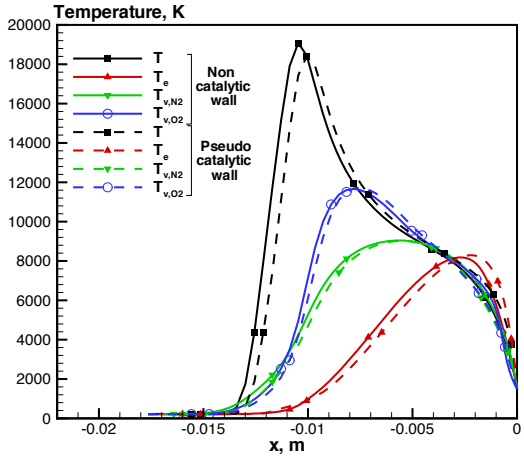
Le flux de chaleur le long de la paroi est présenté sur la figure 5.6(d). Il est clair, au vu



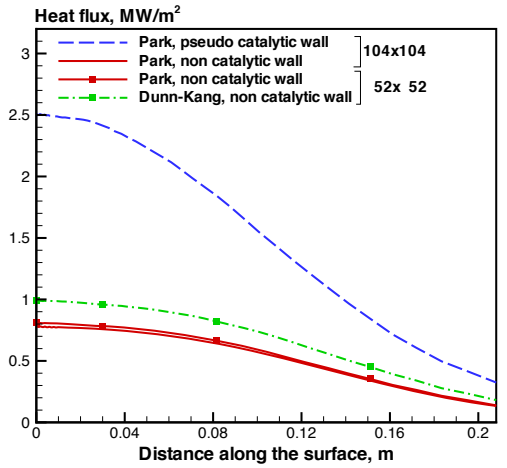
(a) **Champ de pression, modèle de Park, paroi non-catalytique, maillage** 104×104



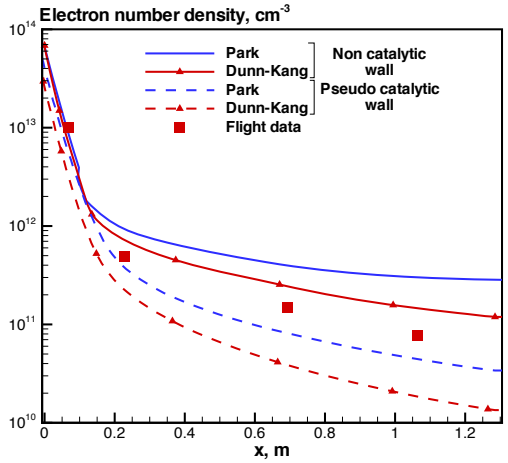
(b) **Fractions massiques des espèces neutres le long de la ligne d'arrêt, modèle de Park, maillage** 104×104



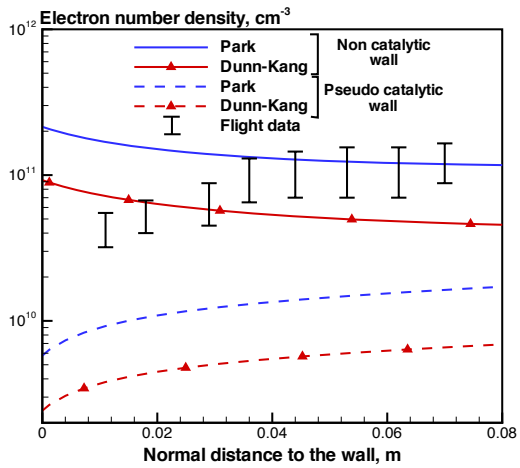
(c) **Températures le long de la ligne d'arrêt, modèle de Park, maillage** 104×104



(d) **Flux de chaleur à la paroi**



(e) **Pic de densité en électrons libres**



(f) **Distribution de la densité en électrons à la position** $x/R = 8,1$

Fig. 5.6: RAM-C II 71km

Tab. 5.4: Flux de chaleur au point d'arrêt de la sonde RAM-C II à l'altitude de $71km$

Source	Paroi catalytique	Modèle chimique	Flux de chaleur, MW/m^2
Présent	non	D-K*	0,99
	non	Park 90/93	0,81
	oui	Park 90/93	2,51
Candler *et al.* [26]	non	P-W†	2,5
Walpot [205]	non	D-K*	0,90
	non	Park 93	0,74
	oui	D-K*	2,2
Tchuen [190]	non	Park 85	2,4

* D-K : Dunn et Kang † P-W : Park 85 et Wray

de cette figure, que la condition de catalycité a une importance capitale sur la prédiction du flux de chaleur. En effet, la valeur du flux triple quand on suppose la paroi pseudo-catalytique plutôt que non catalytique. Dans le tableau 5.4, on compare la valeur du flux au point d'arrêt avec les résultats de la littérature [26, 205, 190]. Tchuen [190] a utilisé le modèle chimique "air-7" avec les taux de Park de 1985 [146]. Il a supposé la paroi non-catalytique. Cependant, le modèle de Park de 1985 [146] prédit une recombinaison moléculaire à la paroi plus importante que le modèle de Park [153, 148] plus récent que nous utilisons [191]. Par conséquent, les réactions de recombinaison étant exothermiques, Tchuen [190] obtient un flux de chaleur élevé. Candler et MacCormack [26] ont mené des calculs avec un modèle à sept espèces dérivé de Park 1985 [146] et Wray [211], et ils ont supposé la paroi non catalytique. Comme attendu, leur prédiction* concorde avec celle de Tchuen [190]. Nous obtenons un flux de chaleur proche des valeurs de Tchuen [190] et de Candler et MacCormack [26] en supposant que la paroi est pseudo-catalytique. En effet, la condition de pseudo-catalycité compense la faiblesse du taux de recombinaison du modèle de Park de 1990/1993 [153, 148]. Walpot [205] a considéré des conditions de paroi partiellement catalytique et non catalytique et il a comparé les résultats donnés par les modèles de Park 1993 [153] et de Dunn et Kang [62]. Nos conclusions concordent avec les tendances qu'il a pu observer en modifiant le modèle de cinétique chimique et la condition de catalycité de paroi.

On s'intéresse maintenant à la densité des électrons libres. On confronte nos résultats aux mesures en vol [166, 56] sur les figures 5.6(e) et 5.6(f). La figure 5.6(e) présente l'évolution du pic de densité électronique dans le champ. Supposer la paroi non-catalytique conduit à surestimer le pic de densité électronique, tandis que supposer la paroi pseudo-catalytique conduit à le sousestimer. Ceci est valable pour les deux modèles de cinétique chimique. Cependant, le modèle de Park [153, 148] prédit un pic de densité en électrons plus élevé par rapport au modèle de Dunn et Kang [62]. Walpot [205] a constaté une tendance similaire.

Les conditions de non-catalycité et de pseudo-catalycité constituent deux extrêmes. En effet, la première n'influe pas sur la recombinaison des molécules à la paroi, la seconde force une recombinaison complète. Au vu de la figure 5.6(e), on peut supposer que la réalité se situe entre ces deux extrêmes. Cette assertion est confortée par la figure 5.6(f). Sur cette figure, on trace l'évolution de la densité des électrons le long de la normale à la paroi, à l'absisse $x/R = 8,1$. La condition de non-catalycité conduit à des résultats en bon accord quantitatif avec les mesures

*Candler et MacCormack [26] ont publié une valeur du nombre de Stanton. Nous avons estimé le flux de chaleur à partir de cette grandeur.

expérimentales. Cependant, on constate un désaccord du point de vue qualitatif dans la zone proche de la paroi. En effet, le calcul prédit une densité électronique croissante lorsqu'on se rapproche de la paroi, tandis que les mesures en vol [166, 56] présentent la tendance inverse. On lève ce désaccord qualitatif en supposant que la paroi est pseudo-catalytique. Cependant, dans ces conditions, on sousestime le niveau de densité en électrons. On ajoute que là encore, nos observations corroborent celles de Walpot [205].

Sur le cas d'épreuve RAM C II, nous obtenons donc des résultats en accord avec les autres résultats numériques de la littérature et compatibles avec les mesures en vol. Les résultats sont fortement dépendants du modèle de cinétique chimique et de la condition de catalycité de paroi. Les incertitudes sur la validité de ces modélisations permettent d'expliquer les écarts observés entre le calcul et les mesures.

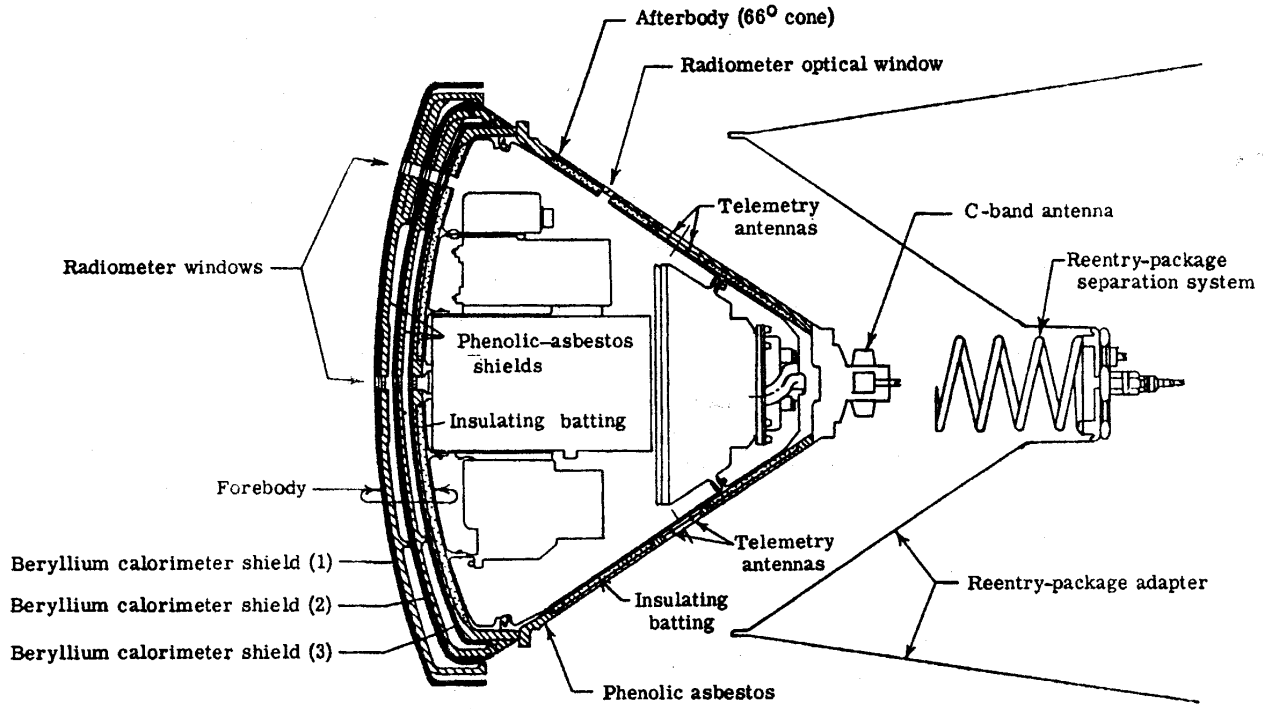
5.3.3 Sonde FIRE II

Dans les années soixante, les activités spatiales américaines étaient principalement liées au programme Apollo. L'objectif était d'envoyer des hommes sur la Lune avant la fin de la décennie 1960-1970 afin de respecter le vœu du président Kennedy. La préparation des missions Apollo a nécessité de nombreuses campagnes d'essai. Parmi celles-ci, l'essai en vol FIRE II [55, 30, 29] avait pour but d'étudier la phase de rentrée d'une capsule dans l'atmosphère terrestre à des vitesses de l'ordre de $11km/s$. Au cours du vol, la sonde a rencontré des 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. La structure de la sonde FIRE II est décrite sur la figure 5.7(a). L'avant-corps de la sonde était protégé par trois boucliers thermiques en Beryllium empilés les uns sur les autres. L'intérêt de cette technologie était d'éviter que la température de la paroi n'atteigne des niveaux trop élevés. Les deux premiers boucliers furent éjectés durant le vol, respectivement aux temps $t = 1642,5s$ et $t = 1648,1s$[†]. Les caractéristiques géométriques des boucliers sont données dans la figure 5.7(b).

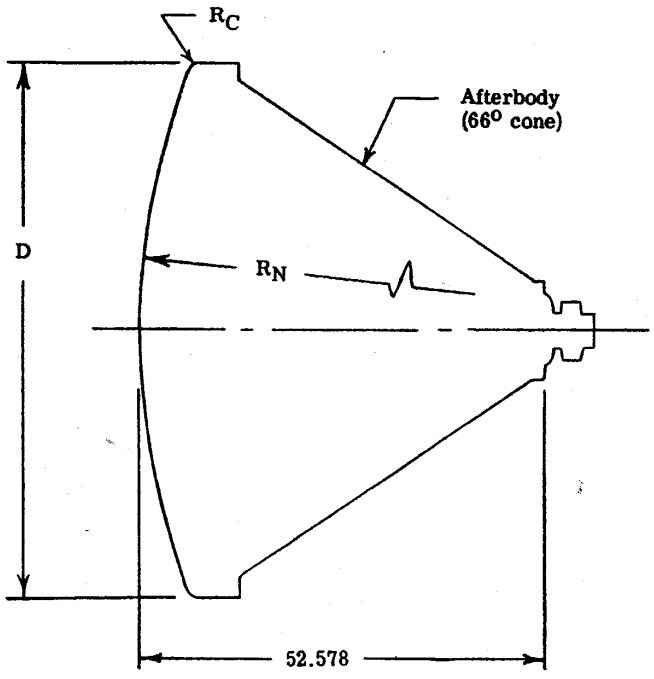
La sonde était équipée de différents instruments de mesure. Des radiomètres ont mesuré la luminance radiative incidente en trois endroits de la surface de la sonde. Leurs positions sont indiquées sur la figure 5.7(a). De plus, un radiomètre placé au point d'arrêt a mesuré le spectre de luminance radiative incidente. Enfin, des calorimètres ont mesuré le flux de chaleur total à la paroi.

L'essai en vol FIRE II est un cas d'épreuve fréquemment utilisé dans la littérature pour valider les modèles et les méthodes de calcul. Parmi les travaux récents, on peut citer Hartung *et al.* [91, 87] et Greendyke et Hartung [75] qui utilisent le code LAURA, Olynick *et al.* [142] qui utilisent le code GIANTS, Gökçen [69] qui utilise un code propre, Taylor *et al.* [187, 188] qui utilisent un code DSMC, Knab *et al.* [108] qui utilisent le code URANUS, Gorelov *et al.* [72] qui utilisent le modèle de cinétique du TsAGI, et Egorov *et al.* [63] qui utilisent le code NEQNAST. Le lecteur est invité à se reporter au paragraphe 1.3.1 pour des détails sur les modélisations retenues par chacun de ces auteurs. On précise que dans les références [91, 87, 75], le modèle chimique est le modèle de Park 1990 [149]. Dans Hartung *et al.* [87], la paroi est supposée non catalytique tandis que dans les références [91, 75], elle est supposée complètement catalytique. Dans ce cas, la composition chimique du mélange à la paroi correspond aux conditions d'équilibre à la température de la paroi. Dans Olynick *et al.* [142], la paroi est supposée non

[†]Pour le cas d'épreuve FIRE II, le paramètre temporel qui permet de définir les points de vol correspond au temps écoulé depuis le tir de la fusée [55, 30, 29].



(a) **Description et illustration de la structure en couches du bouclier thermique**



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

(b) **Dimensions (en** *cm*)

Fig. 5.7: Géométrie de la sonde FIRE II [55]

Tab. 5.5: Description des points de vol FIRE II [55, 30, 29]

Point de vol, s	Altitude, km	Vitesse, km/s	Densité, kg/m^3	T_∞, K	T_w, K
1634	$76,42$	$11,36$	$3,72 \cdot 10^{-5}$	195	615
$1640,5$	$59,26$	$10,97$	$3,86 \cdot 10^{-4}$	254	1560
1643	$53,04$	$10,48$	$7,80 \cdot 10^{-4}$	276	640
$1648,5$	$41,23$	$7,96$	$3,40 \cdot 10^{-3}$	260	540

catalytique pour les espèces neutres et entièrement catalytique pour les ions. Cette condition se base sur l'hypothèse de paroi électriquement neutre. Le modèle chimique est celui de Park 1993 [153] avec les taux de Wilson [210] pour les réactions d'ionisation par impact d'électrons.

Dans cette étude, nous avons choisi quatre points de la trajectoire du véhicule FIRE II : $t = 1634s$, $t = 1640,5s$, $t = 1643s$ et $t = 1648,5s$. Le premier point correspond à un régime en déséquilibre fort. Les deux points suivants correspondent à un régime proche de l'équilibre. Le dernier point de vol correspond à un régime à l'équilibre. Les conditions d'écoulement sont données dans le tableau 5.5.

Dans un premier temps, on s'intéresse au point de vol $1634s$. On utilise la modélisation physico-chimique simplifiée décrite au chapitre 2 (tableau 2.1). On étudie en particulier l'influence du maillage et du modèle de cinétique chimique.

Dans un deuxième temps, pour le point de vol $1634s$, on étudie l'influence de la modélisation physico-chimique. Pour cela, on compare les résultats obtenus avec les modèles simplifié et complet présentés au chapitre 2 (tableau 2.1).

Dans un troisième temps, on s'intéresse à l'ensemble des quatre points de vol. On étudie notamment l'évolution du flux de chaleur pariétal au cours de la rentrée. On rappelle toutefois que dans ce chapitre, la contribution radiative n'est pas prise en compte. Le lecteur est invité à se reporter au chapitre 6 pour une étude des écoulements de rentrée terrestre incluant cette contribution.

5.3.3.1 Point de vol $1634s$: modèle physico-chimique simplifié

Au point de vol $1634s$, la vitesse de l'écoulement à l'infini amont est de $11,36km/s$, la température de $195K$ et la densité de $3,7226 \cdot 10^{-5}kg/m^3$. Le calcul porte sur la partie avant-corps uniquement. Le bouclier thermique a un rayon de $0,935m$ [29]. La température de la paroi est égale à $615K$. La paroi est supposée non catalytique.

Trois modèles de cinétique chimique sont utilisés : le modèle de Dunn et Kang [62], le modèle de Park [153, 148] et le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148]. Cependant, pour les modèles de Dunn et Kang [62] et de Park [153, 148], on a modifié l'expression de la température d'activation des deux réactions d'ionisation par impact d'électrons :

$$N + e^- \rightarrow N^+ + 2e^- \tag{5.17a}$$
$$O + e^- \rightarrow O^+ + 2e^- \tag{5.17b}$$

D'après Park [148], ces réactions sont activées à la température T_e. Pour des raisons d'ordre numérique, les calculs dans ces conditions n'ont pas abouti. L'origine de cette difficulté numérique n'a pas pu être identifiée. Pour y remédier, nous avons testé des expressions de la forme $T^k T_e^{1-k}$ où le nombre k varie entre 0 et 1. La valeur du paramètre k la plus faible pour que le calcul

converge est la valeur $0,5$. Par conséquent, pour tous les calculs sur le cas d'épreuve FIRE II, la température d'activation des réactions (5.17a) et (5.17b) est prise égale à la température $\sqrt{TT_e}$ dans les modèles de Dunn et Kang [62] et de Park [153, 148]. Pour le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148], on rappelle que la température d'activation de ces deux réactions est la température T.

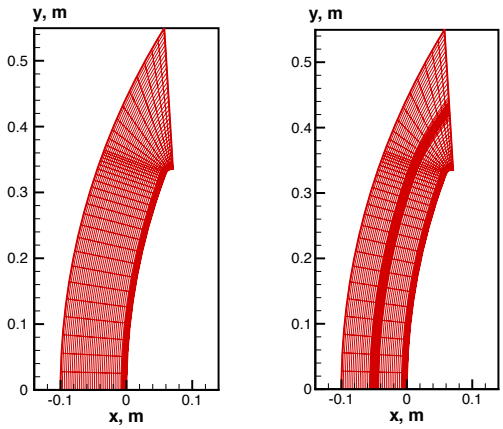
On utilise les deux maillages représentés sur la figure 5.8(a). Le premier maillage contient 62 cellules dans la direction normale à la paroi et 35 cellules dans la direction longitudinale. Il est raffiné à la paroi. La taille de première maille est égale à $10^{-5}m$ dans la direction normale et $0,025m$ dans la direction longitudinale. Le nombre de Reynolds de cellule est de l'ordre de $0,3$ à la paroi. Le second maillage s'obtient en raffinant le premier maillage au niveau du choc. Dans cette zone, la taille des mailles est divisée par quatre dans la direction normale par rapport au maillage précédent (figure 5.8(b)). On précise que la position du choc, et donc la zone de raffinement du maillage, varie en fonction du modèle de cinétique chimique. Par conséquent, on construit un maillage raffiné différent pour chaque cas. Cependant le maillage contient 35×73 cellules quelque soit le modèle de cinétique chimique. Une étude de convergence réalisée par Hartung [91] a montré qu'il n'est pas nécessaire de raffiner plus finement le maillage pour obtenir un champ hydrodynamique convergé.

Les calculs convergent après environ 40000 pas de temps. Les résidus décroissent de dix ordres de grandeur. Le nombre CFL en fin de calcul est égal à 15.

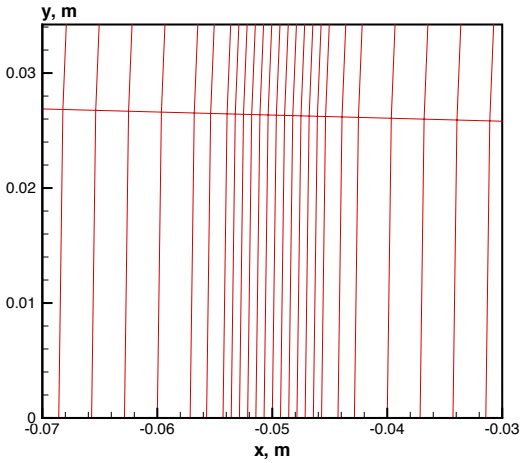
La figure 5.8(a) présente les champs de Mach obtenus avec les modèles de Park [153, 148] et de Park et Wilson [210, 153, 148]. Ces champs sont nettement différents. En effet, le champ obtenu avec le modèle de Park [153, 148] semble plus perturbé que celui obtenu avec le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148]. Or la seule différence entre ces deux modèles porte sur les deux réactions d'ionisation par impact d'électron. Plus précisément, outre le fait que les coefficients A_f, B_f et θ_f apparaissant dans la loi d'Arrhénius (2.17a) varient selon le modèle, la différence majeure porte sur l'expression de la température d'activation. Dans le cas du modèle de Park et Wilson [210, 153, 148], la température d'activation est la température T. Par conséquent, ces réactions sont activées en même temps que l'ensemble des processus réactionnels, notamment les processus dissociatifs. Dans le cas du modèle de Park [153, 148] tel que nous l'utilisons pour le cas d'épreuve FIRE II, la température d'activation est la température $\sqrt{TT_e}$. D'après la figure 5.8(d), les températures T et T_e ne sont pas à l'équilibre dans la région de choc. Par conséquent, les réactions d'ionisation par impact d'électron sont activées plus en aval par rapport aux réactions de dissociation. C'est ce phénomène qui modifie le champ de Mach. On précise que le modèle de Dunn et Kang [62] conduit à un champ de Mach similaire à celui obtenu avec le modèle de Park [153, 148] car pour ce modèle également, la température d'activation des réactions d'ionisation par impact d'électron est la température $\sqrt{TT_e}$.

La figure 5.8(e) présente les profils de la pression des espèces lourdes, de la pression du gaz d'électrons et de la pression totale le long de la ligne d'arrêt. On compare les résultats obtenus avec les différents modèles de cinétique chimique. En ce qui concerne la pression totale, le comportement est à nouveau différent selon qu'on utilise le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] d'une part ou les modèles de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62] d'autre part. Dans le premier cas, la pression totale croît brusquement à la traversée de l'onde de choc puis se stabilise dans la couche de choc. Dans le second cas, la compression s'opère en deux temps. D'après la figure 5.8(d), le premier temps correspond au pic de la température T et le second temps au pic de la température T_e.

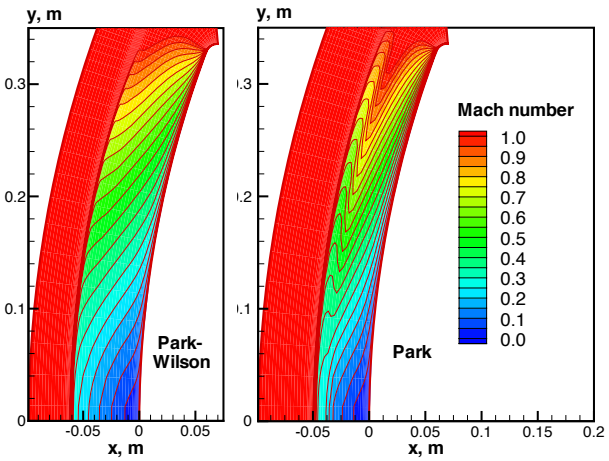
D'autre part, on constate sur la figure 5.8(e) que la position du choc varie de façon importante selon le modèle de cinétique chimique. La position la plus amont est obtenue avec le



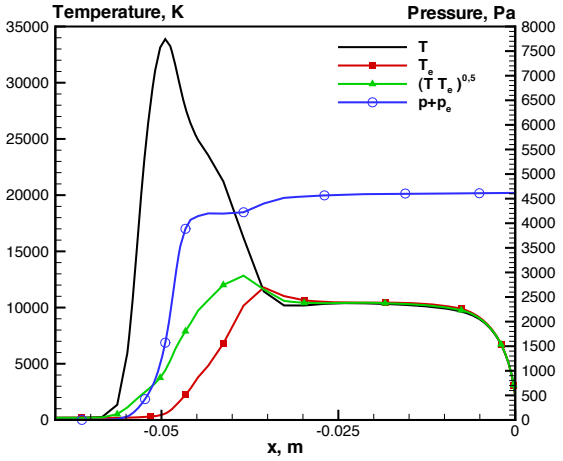
(a) **Maillage non raffiné (gauche) et maillage raffiné dans le choc (droite)**



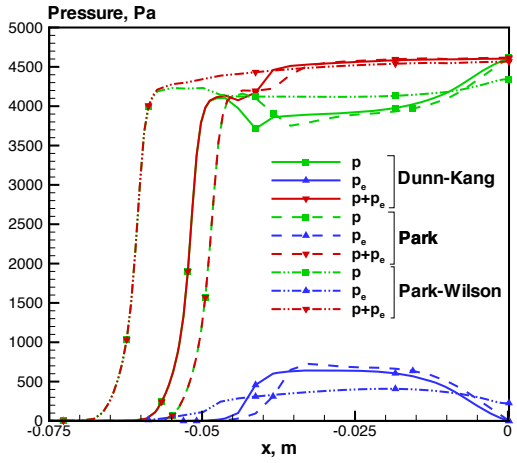
(b) **Zoom sur le raffinement de maillage au niveau du choc**



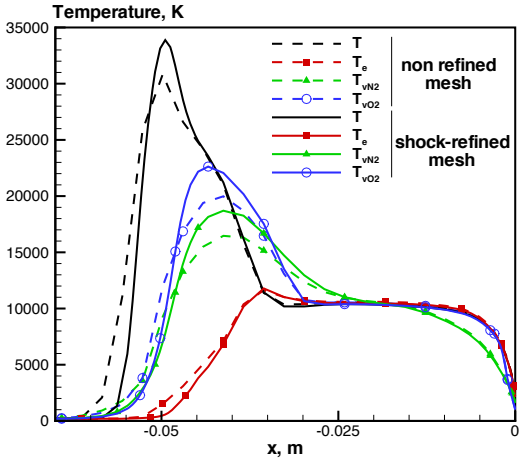
(c) **Influence du modèle de cinétique chimique sur le champ de Mach, maillage raffiné**



(d) **Températures et pression totale le long de la ligne d'arrêt, modèle de Park, maillage raffiné**

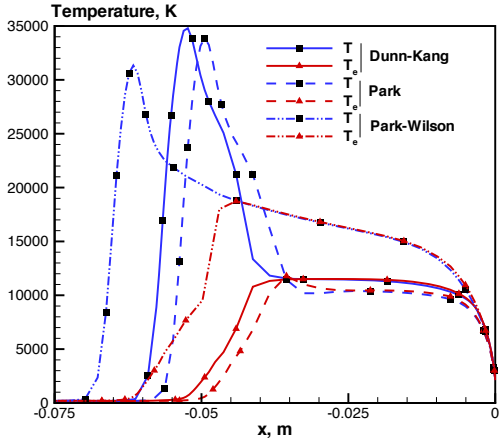


(e) **Pressions le long de la ligne d'arrêt, maillage raffiné**

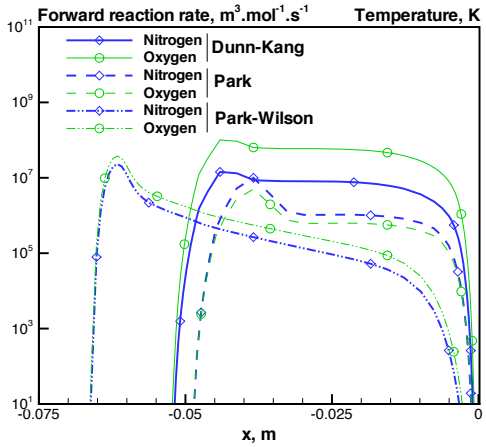


(f) **Températures le long de la ligne d'arrêt, modèle de Park**

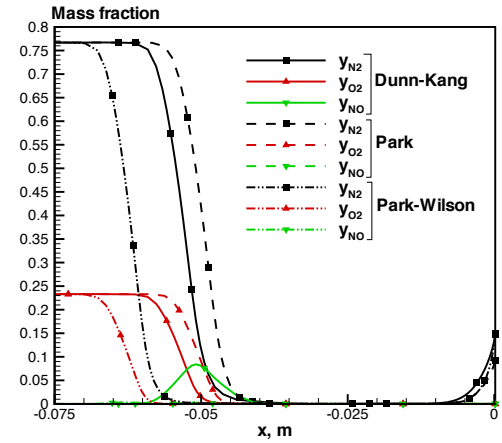
Fig. 5.8: FIRE II 1634s, partie 1/2



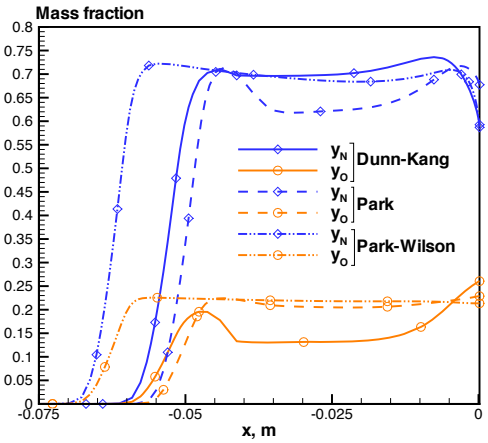
(g) **Températures le long de la ligne d'arrêt, maillage raffiné**



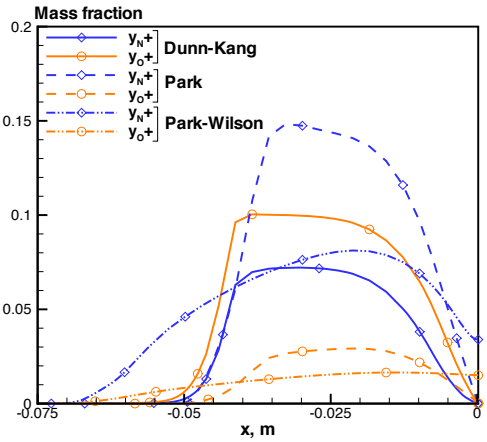
(h) **Taux des réactions d'ionisation des atomes N et O par impact d'électron le long de la ligne d'arrêt, maillage raffiné**



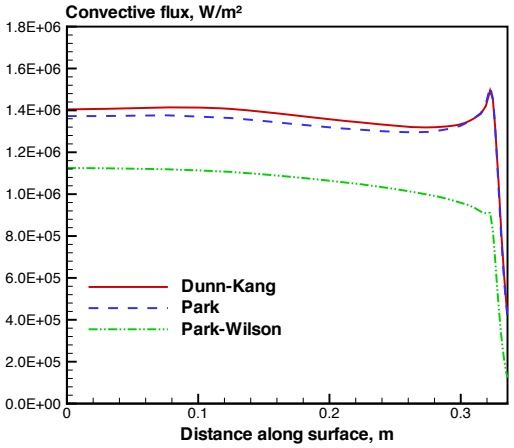
(i) **Fractions massiques des espèces moléculaires neutres le long de la ligne d'arrêt, maillage raffiné**



(j) **Fractions massiques des espèces atomiques neutres le long de la ligne d'arrêt, maillage raffiné**



(k) **Fractions massiques des espèces atomiques ionisées le long de la ligne d'arrêt, maillage raffiné**



(l) **Flux de chaleur convectif à la paroi, maillage raffiné**

Fig. 5.8: FIRE II 1634s, partie 2/2

modèle de Park et Wilson [210, 153, 148], à $61mm$ de la paroi. Elle est à $49mm$ de la paroi avec le modèle de Park [153, 148]. Hartung *et al.* [91] ont obtenu des valeurs du même ordre de grandeur et ont montré que la position du choc est très sensible au modèle de cinétique chimique utilisé.

La figure 5.8(f) présente les profils de températures le long de la ligne d'arrêt obtenus avec le modèle de Park [153, 148]. Le déséquilibre thermique est important en aval du choc et également en zone proche de la paroi pour le mode vibrationnel de la molécule d'azote. Cette tendance est également prédite par Olynick *et al.* [142]. Le pic de la température de translation des espèces lourdes se situe autour de $34000K$. Les températures s'équilibrent dans la couche de choc à une valeur de l'ordre de $11000K$. Ce type de profil est récurrent dans la littérature [87, 75, 142, 108, 72]. La comparaison des profils de température obtenus avec les deux maillages montre que raffiner le maillage dans la région de choc affine légèrement le choc et accroît le pic de température.

Sur la figure 5.8(g), on compare les profils des températures T et T_e obtenus avec les différents modèles de cinétique chimique. Outre la disparité concernant la position du choc, on distingue encore une fois une différence de comportement entre le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] d'une part et les modèles de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62] d'autre part. En effet, dans le cas du modèle de Park et Wilson [210, 153, 148], la température T ne se stabilise pas autour de la valeur $11000K$ dans la couche de choc. Elle décroît en deux étapes caractérisées par des temps de relaxation différents : d'abord rapidement à cause de la dissociation des molécules puis, à partir d'une distance de $55mm$ de la paroi, plus progressivement à cause de processus physico-chimiques plus lents tels que l'ionisation. D'autres auteurs obtiennent également ce type de profil [91, 188, 69]. On rappelle que les taux de Wilson [210] sont plus faibles que ceux de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62], de un à trois ordres de grandeur selon la température (voir chapitre 2, § 2.2.1). On retrouve cet écart sur la figure 5.8(h) où l'on a tracé l'évolution, le long de la ligne d'arrêt, des taux de réactions des deux processus d'ionisation par impact d'électron.

La figure 5.8(i) présente les distributions de fraction massique des espèces neutres moléculaires le long de la ligne d'arrêt. A la traversée de l'onde de choc, les molécules se dissocient rapidement et complètement. A la paroi, seule l'espèce N_2 se recombine partiellement pour atteindre une fraction massique de 15%. Les figures 5.8(j) et 5.8(k) présentent les distributions de fraction massique des espèces atomiques neutres et ionisées, respectivement, le long de la ligne d'arrêt. Parmi les espèces ionisées, les espèces atomiques (N^+ et O^+) sont les espèces majoritairement produites. Les modèles de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62] prédisent le taux d'ionisation le plus fort, de l'ordre de 17%, contre 10% pour le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148]. Les distributions de fraction massique des espèces atomiques sont fortement dépendantes du modèle de cinétique chimique. En particulier, le modèle de Dunn et Kang [62] conduit à une fraction plus élevée d'ions O^+ que d'ions N^+, alors que les deux autres modèles prédisent la tendance inverse. D'autre part, on constate qu'à la paroi, pour les modèles de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62], la fraction des espèces ionisées est nulle. Pour le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] au contraire, cette fraction est de l'ordre de 5%.

Cette dernière remarque a des conséquences sur le flux de chaleur pariétal, comme le montre la figure 5.8(l). En effet, les modèles de Park [153, 148] et de Dunn et Kang [62] conduisent à une valeur de flux comparable, de l'ordre de $1,4MW/m^2$. Par contre, l'échauffement prédit par le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] est plus faible, de l'ordre de $1,1MW/m^2$. Cet écart provient du taux d'ionisation plus élevé obtenu avec ce modèle dans la zone proche de la paroi. L'ionisation retarde la recombinaison des molécules. Comme les réactions de recombinaison sont exothermiques, l'échauffement de la paroi est plus faible. Les valeurs de flux

obtenues avec les codes LAURA [87] et GIANTS [142] sont respectivement $1,2MW/m^2$ et $1,1MW/m^2$. Le premier utilise le modèle de Park de 1993 [153], le second utilise le modèle de Park et Wilson [210, 153]. Selon les références [75, 142], supposer que la paroi est catalytique accroît légèrement le flux jusqu'à la valeur $1,3MW/m^2$. Cauchon [29] déduit des mesures calorimétriques que le flux convectif à la paroi vaut $1,7MW/m^2$. Cette valeur est supérieure aux valeurs trouvées numériquement.

Cette étude réalisée pour le point de vol $1634s$ montre à quel point le choix du modèle de cinétique chimique influe sur les résultats. Dans la suite, on retient le modèle de Park [153, 148]. On justifie ce choix par le fait qu'il s'agit du modèle le plus récent et le plus récurrent dans la littérature. D'autre part, la valeur de flux convectif obtenue avec ce modèle est la plus proche de la valeur expérimentale. Ce choix s'avèrera également justifié par des comparaisons de grandeurs radiatives avec les mesures en vol (chapitre 6).

5.3.3.2 Point de vol $1634s$: influence de la modélisation physico-chimique

Dans ce paragraphe, on étudie l'influence de la modélisation physico-chimique. Pour ce faire, à partir du modèle simplifié utilisé au paragraphe précédent, on introduit au fur et à mesure les modèles retenus dans le modèle physico-chimique complet décrit au chapitre 2 (tableau 2.1), dans l'ordre suivant :

1. modèle de diffusion de Gubernatis [77]
2. modèle de conductivité thermique de Wilke [208] et Monchick *et al.* [136]
3. modèle de couplage vibration-dissociation de Park [148]
4. modèle d'échange e-R de Koura [109] et Matsuzaki [128]
5. modèle d'échange e-V de Bourdon [22] et Park et Lee [153] et modèle d'échange V-V de Losev *et al.* [123]

L'étape 5 correspond au modèle physico-chimique complet. On utilise le modèle de cinétique chimique de Park [153, 148] et le maillage raffiné dans le choc.

La figure 5.9(a) montre les distributions, le long de la ligne d'arrêt, des fractions massiques des espèces chimiques majoritairement présentes dans la couche de choc. Dans le cas du modèle complet, par rapport au modèle simplifié, la distance de détachement du choc a diminué de 15% et les atomes s'ionisent plus rapidement. Cet effet est dû aux échanges entre le mode de rotation des espèces moléculaires et le mode de translation des électrons. En effet, en traçant sur la figure 5.9(b) les profils de températures T et T_e le long de la ligne d'arrêt, on constate que le choc se déplace vers l'aval lorsqu'on ajoute le terme de relaxation e-R dans la modélisation. De plus, la température T_e tend à s'équilibrer plus rapidement avec la température T. De ce fait, le gaz s'ionise plus rapidement derrière le choc.

Le terme de relaxation e-V n'a pas d'effet notoire sur la distribution de température T_e car les molécules sont complètement dissociées derrière le choc. Selon Gorelov *et al.* [71], le couplage entre le mode de translation des électrons et le mode de vibration de la molécule N_2 n'est important que si le degré de dissociation de l'azote - égal au rapport entre la densité des atomes N et la densité des molécules N_2 - ne dépasse pas $0,1$. Dans notre cas, le degré de dissociation est très grand puisque les molécules sont entièrement dissociées. De ce fait, en accord avec Gorelov *et al.* [71], l'échange e-V n'a pas d'effet.

A proximité de la paroi, l'effet le plus important provient du modèle de diffusion. S'affranchir de l'hypothèse d'un nombre de Lewis constant conduit à retarder légèrement la décroissance des températures T et T_e et donc à retarder les réactions de déionisation. En effet, la disparition

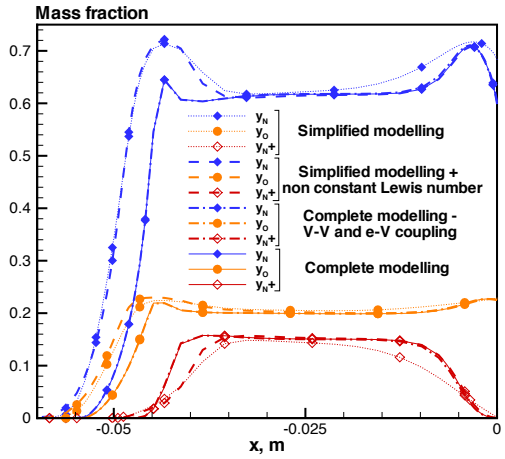
des ions N^+ au profit de l'espèce atomique associée N intervient à une distance à la paroi plus faible (figure 5.9(a)).

La figure 5.9(c) présente les variations des nombres de Prandtl et de Lewis le long de la ligne d'arrêt. Ces grandeurs sont calculées de la manière suivante :

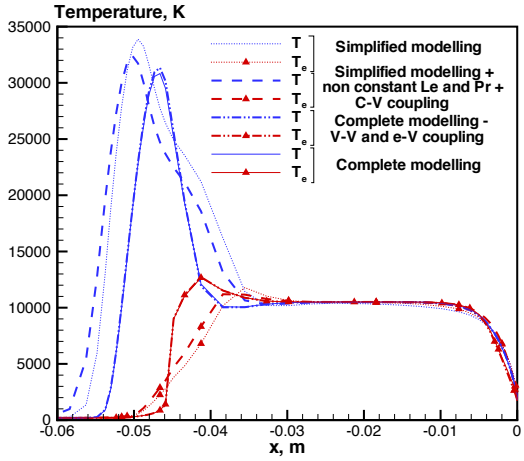
$$Le = \frac{\rho Cp_{eq}}{\eta_{eq}} \sum_{s \neq e} (x_s D_s) \tag{5.18}$$

$$Pr = \mu \frac{Cp_{eq}}{\eta_{eq}} \tag{5.19}$$

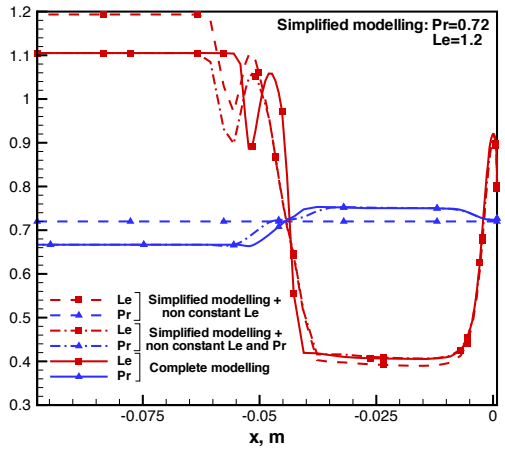
Le nombre de Prandtl est relativement constant dans la couche de choc. Sa valeur moyenne est proche de la valeur spécifiée dans le modèle simplifié, soit $0,72$. En revanche, le nombre de Lewis décroît fortement à la traversée de l'onde de choc pour atteindre la valeur $0,4$. Il croît de nouveau dans la couche limite. La valeur $0,4$ est nettement inférieure à la valeur $1,2$ spécifiée



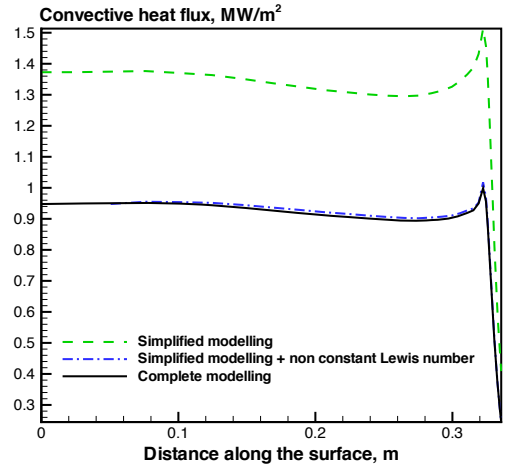
(a) **Fractions massiques le long de la ligne d'arrêt**



(b) **Températures le long de la ligne d'arrêt**



(c) **Nombres de Prandtl et de Lewis le long de la ligne d'arrêt**



(d) **Flux de chaleur à la paroi**

Fig. 5.9: FIRE II 1634s, influence de la modélisation physico-chimique

dans le modèle simplifié. Le modèle de diffusion a donc une influence marquée sur le champ hydrodynamique.

On prend la mesure de cette influence en traçant sur la figure 5.9(d) le flux de chaleur convectif à la paroi. L'écart entre le modèle simplifié et le modèle complet est très grand puisque le flux a diminué de 31%. Cette diminution est entièrement imputable au modèle de diffusion. Dans une étude des modèles de diffusion, Gosse et Candler [73] constatent le même phénomène. Pour un écoulement à une vitesse de $12km/s$, ils comparent le flux prédit en supposant un nombre de Lewis constant - supposé égal à $1,4$ - et le flux obtenu avec deux modèles de diffusion qui s'affranchissent de cette hypothèse. Pour les deux modèles, ils obtiennent une baisse de 31% de l'échauffement de la paroi. Pour une vitesse de $9km/s$, l'écart est de 7%. Pour une vitesse de $6km/s$, l'écart est nul.

Concernant la prédiction de l'échauffement pariétal, on constate cependant que le modèle complet n'améliore pas la précision de la solution. En effet, il conduit à un flux de chaleur nettement inférieur au modèle simplifié, alors que ce dernier tend déjà à sous-estimer la valeur de l'échauffement par rapport aux données expérimentales [29].

La conclusion de cette étude rejoint les analyses publiées dans la littérature, par exemple dans les références [91, 133, 142], à savoir que les caractéristiques du champ hydrodynamique - telles que le profil et le pic de température, la position du choc ou encore le flux de chaleur - varient selon la modélisation physico-chimique (modèle de diffusion et de conduction thermique, température de dissociation, échanges d'énergie...). Dans les paragraphes précédents, on a vu que le modèle de cinétique chimique et le modèle de catalycité de paroi ont également une influence très marquée.

A l'heure actuelle, on ne dispose pas de données expérimentales suffisantes pour trancher sur la validité des différents modèles. De plus, une modélisation physico-chimique plus complète, et aussi plus complexe, ne permet pas d'améliorer la précision des résultats par rapport au peu de données expérimentales dont on dispose. En conséquence, dans la suite, on retient le modèle physico-chimique simplifié.

5.3.3.3 Trajectoire $1634 - 1648,5s$

Dans ce paragraphe, on présente les résultats obtenus sur l'ensemble de la trajectoire, c'est-à-dire aux quatre points de vol $1634s$, $1640,5s$, $1643s$ et $1648,5s$.

Le modèle multitempérature varie selon le point de vol. Pour le point de vol $1634s$, l'écoulement est en déséquilibre thermique fort car la vitesse est élevée et la densité du milieu faible (tableau 5.5). Par conséquent, le modèle multitempérature est le modèle à quatre températures (T,T_e,T_{v,N_2},T_{v,O_2}). Pour les points de vol $1640,5s$ et $1643s$, nous n'avons pas réussi à converger le calcul avec ce modèle multitempérature. On a donc considéré que le mode de vibration des espèces moléculaires est à l'équilibre avec le mode de translation et on a utilisé le modèle à deux températures (T,T_e). Cette approximation est malgré tout valide car on verra que les molécules sont complètement dissociées dans la couche de choc. De plus, le régime d'écoulement est plus proche de l'équilibre qu'au point de vol $1634s$. En effet, la vitesse de rentrée reste élevée mais la densité du milieu est plus importante. Par conséquent, les collisions entre les particules sont plus nombreuses et la relaxation vibrationnelle plus rapide. Pour le point de vol $1648,5s$, l'écoulement est à l'équilibre car la vitesse est modérée et la densité du milieu relativement élevée. Par conséquent, pour ce dernier point, le calcul est réalisé dans les conditions d'équilibre thermique.

Le modèle de cinétique chimique est le modèle de Park [153, 148]. La modélisation physico-

Tab. 5.6: Données des maillages pour le cas d'épreuve FIRE II

Point(s) de vol, s	Rayon de nez, m	Nombre de cellules	Taille de 1$^{\text{ère}}$ maille, m (direction longitudinale)	Allongement
$1634, 1640, 5$	$0,935$	35×73	$0,025$	37
1643	$0,805$	33×103	$0,040$	53
$1648, 5$	$0,720$	35×87	$0,025$	62

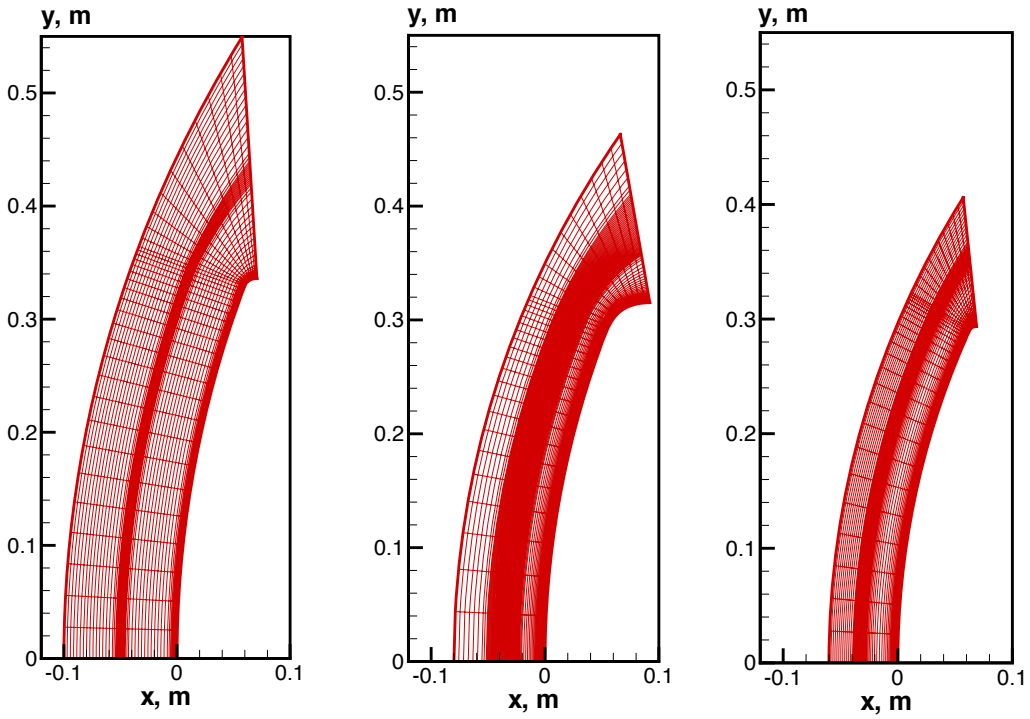
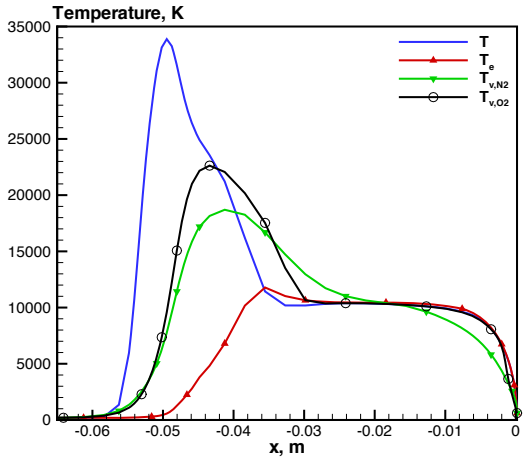


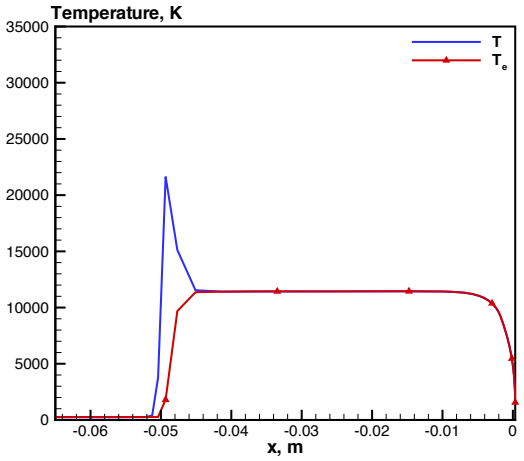
Fig. 5.10: Maillages correspondant aux trois boucliers thermiques de la sonde FIRE II

chimique correspond au modèle simplifié présenté au chapitre 2 (tableau 2.1). Le maillage est raffiné à la paroi et au niveau du choc. Les dimensions du maillage dépendent du point de vol. En effet, les points de vol $1634s$ et $1640,5s$ correspondent à la configuration avec le premier bouclier thermique (figure 5.7) tandis que les points de vol $1643s$ et $1648,6s$ correspondent respectivement aux configurations avec le second et le troisième bouclier thermique. Les trois maillages sont présentés sur la figure 5.3.3.3. Leurs caractéristiques sont indiquées dans le tableau 5.6. La taille de première maille est égale à $10^{-5}m$ dans la direction normale pour tous les maillages. On vérifie que l'allongement des cellules au niveau du choc est suffisant pour que les calculs ne développent pas d'instabilités de type carbuncle (voir § 5.2). On rappelle que l'allongement doit être supérieur à une valeur critique de l'ordre de 30 pour éviter l'apparition de cette pathologie numérique.

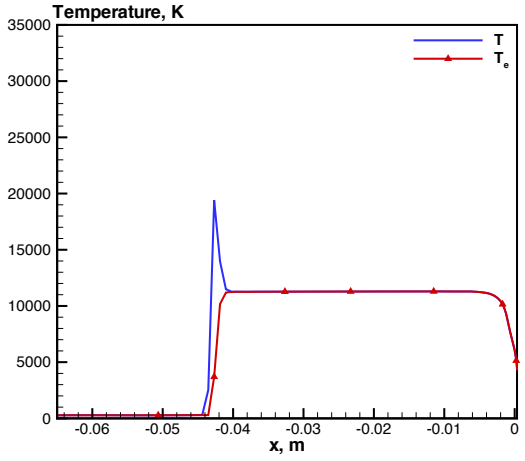
Sur les figures 5.11(a) à 5.11(d), on présente les profils de températures le long de la ligne d'arrêt pour chaque point de vol. Ces figures illustrent les précédents propos sur les conditions de déséquilibre ou d'équilibre thermique aux différents points de vol. La zone de déséquilibre thermique correspond à la région juste derrière le choc. Dans cette région, la température



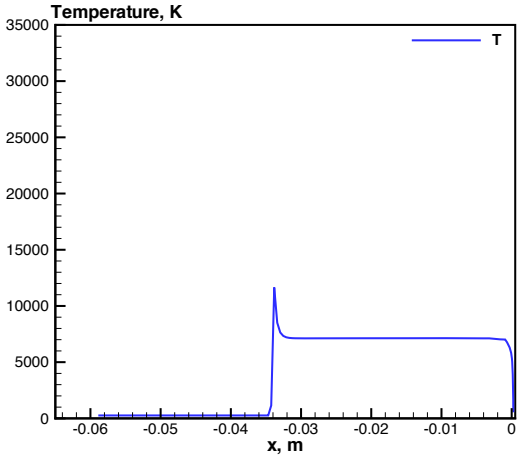
(a) **FIRE II** $1634s$**, températures le long de la ligne d'arrêt**



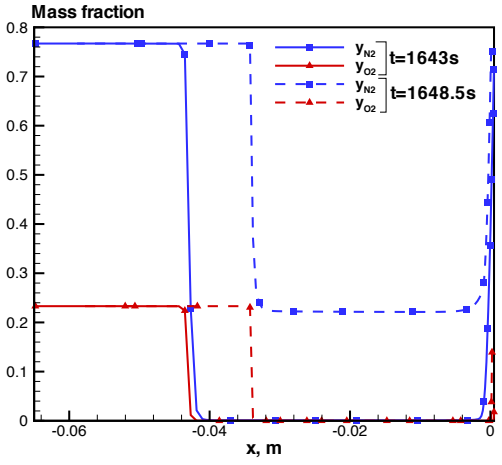
(b) **FIRE II** $1640,5s$**, températures le long de la ligne d'arrêt**



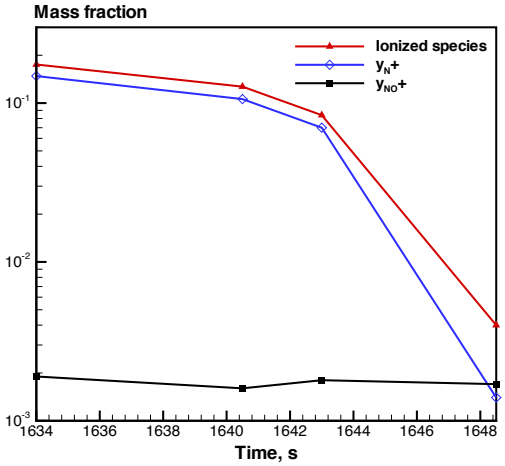
(c) **FIRE II** $1643s$**, températures le long de la ligne d'arrêt**



(d) **FIRE II** $1648,5s$**, température le long de la ligne d'arrêt**



(e) **Fraction massique des espèces** N_2 **et** O_2 **le long de la ligne d'arrêt**



(f) **Pic de fraction massique des espèces ionisées**

Fig. 5.11: Bilan des résultats sur la trajectoire de la sonde FIRE II

de translation des espèces lourdes T croît brusquement et décroît ensuite pour atteindre un plateau. La largeur de la zone de déséquilibre correspond à la distance nécessaire pour que la température passe de la valeur à l'infini amont à la valeur au niveau du plateau. D'après les figures 5.11(a) à 5.11(d), la zone de déséquilibre est de moins en moins large au fur et à mesure de la rentrée. Elle est importante au point de vol $1634s$ puisqu'elle correspond à la moitié de l'épaisseur de la couche de choc. Elle est beaucoup plus faible aux points de vol suivants. D'autre part, la figure 5.11(e) montre qu'au point de vol $1643s$, les molécules sont rapidement et complètement dissociées au passage du choc (la figure présente les profils de fraction massique des espèces moléculaires le long de la ligne d'arrêt uniquement, mais on vérifie que cette assertion est valable sur l'ensemble du champ). Par conséquent, l'énergie de vibration des espèces moléculaires contribue très faiblement à l'énergie globale du système. Négliger le déséquilibre thermique des modes vibrationnels aux points de vol $1640,5s$ et $1643s$ n'a donc pas d'effet notable sur le calcul du champ hydrodynamique. Au point de vol $1648,5s$, les molécules O_2 sont complètement dissociées derrière le choc, au contraire des molécules N_2 dont la fraction massique est de $0,22$.

La figure 5.11(f) présente l'évolution le long de la trajectoire du taux d'ionisation dans l'écoulement. Ce taux correspond à la valeur maximale dans le champ de la somme des fractions massiques des espèces ionisées, soit :

$$\max\left(y_{N^+} + y_{O^+} + y_{N_2^+} + y_{O_2^+} + y_{NO^+}\right) \tag{5.20}$$

Le taux d'ionisation est de $17,5\%$ au point de vol $1634s$. Il diminue progressivement jusqu'à la valeur de $8,4\%$ au point de vol $1643s$. Au point de vol $1648,5s$, le taux d'ionisation n'est plus que de $0,4\%$, l'écoulement est très faiblement ionisé. La figure présente également l'évolution le long de la trajectoire de la valeur maximale dans le champ des fractions massiques des espèces N^+ et NO^+. En début de trajectoire, l'espèce ionisée la plus présente est l'espèce N^+. Les molécules étant complètement dissociées, la fraction en ions NO^+ est très faible. Cette fraction est quasiment constante tout au long de la trajectoire. Au point de vol $1648,5s$, la fraction en ions N^+ a fortement chuté car la vitesse de l'écoulement est modérée, de l'ordre de $8km/s$. L'espèce ionisée prépondérante est alors l'espèce NO^+. Ce résultat n'est pas surprenant puisqu'il est en accord avec la caractérisation thermochimique des écoulements donnée au chapitre 1 (figure 1.7).

La figure 5.12 présente l'évolution du flux de chaleur convectif le long de la trajectoire

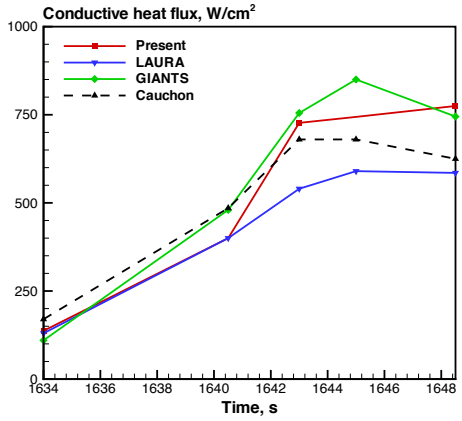


Fig. 5.12: FIRE II, flux de chaleur convectif au point d'arrêt

de rentrée. Le flux augmente progressivement entre les points de vol $1634s$ et $1643s$ car la vitesse reste très élevée sur cette portion de trajectoire - de l'ordre de $11km/s$ - tandis que l'atmosphère devient de plus en plus dense. Ensuite, la sonde est fortement freinée. Sa vitesse chute jusqu'à $8km/s$ tandis que l'atmosphère devient de plus en plus dense. Par conséquent, le taux de croissance du flux de chaleur convectif diminue fortement. Sur la figure 5.12, on compare nos résultats avec ceux obtenus avec le code LAURA par Greendyke et Hartung [75] et avec le code GIANTS par Olynick *et al.* [142]. On précise que ces résultats sont issus de calculs sans contribution radiative. Nos résultats sont du même ordre de grandeur que ceux publiés dans la littérature. On indique également en pointillé le flux de chaleur convectif calculé de manière approchée par Cauchon [29] à partir des mesures calorimétriques et radiométriques. Là encore, l'ordre de grandeur de nos calculs correspond à celui déduit par Cauchon [29].

Sur le cas d'épreuve FIRE II, pour lequel la vitesse est élevée, la modélisation hydrodynamique conduit à des résultats satisfaisants en comparaison des autres résultats numériques publiés dans la littérature. On a mis en valeur les grandes incertitudes relatives à la modélisation physico-chimique et l'influence que celle-ci exerce sur le calcul du champ. Il reste à vérifier que les hypothèses du modèle hydrodynamique sont compatibles avec le calcul d'écoulements à de telles vitesses.

5.4 Vérification de la validité des hypothèses du modèle

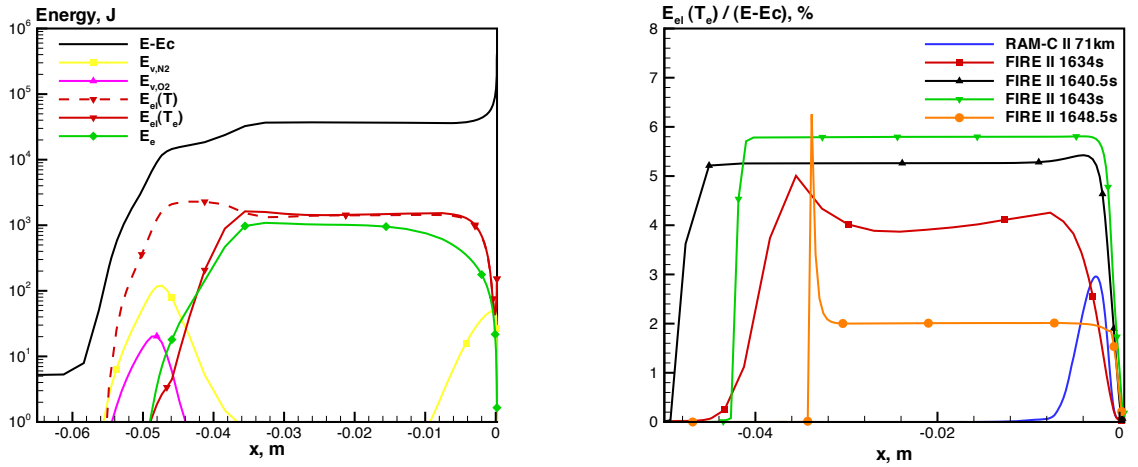
On se propose de vérifier la validité de certaines hypothèses introduites dans le modèle hydrodynamique. La première hypothèse concerne l'énergie d'excitation électronique des espèces lourdes, que l'on a supposée négligeable devant l'énergie totale du gaz. La seconde hypothèse concerne les phénomènes dissipatifs internes au gaz d'électrons libres, que l'on a négligé afin de se placer dans le cadre des hypothèses du modèle de Coquel et Marmignon [51, 53, 54]. A partir des résultats obtenus pour les applications RAM-C II et FIRE II présentés précédemment, on vérifie a posteriori la validité de chacune de ces hypothèses.

En supposant que le mode d'excitation électronique des particules lourdes suit une distribution de Boltzmann à une température T_{el} unique pour l'ensemble des espèces, l'énergie de ce mode s'obtient par la relation :

$$E_{el}(T_{el}) = \sum_{s \neq e} \rho_s \frac{R}{M_s} \frac{\sum_i g_{i,s} \theta_{ei,s} e^{-\theta_{ei,s}/T_{el}}}{\sum_i g_{i,s} e^{-\theta_{ei,s}/T_{el}}} \tag{5.21}$$

Les facteurs de dégénérescence $g_{i,s}$ et les températures caractéristiques d'excitation électronique $\theta_{ei,s}$ associés aux quanta d'énergie électronique i sont donnés dans l'annexe C (tableau C.2). D'après Lee [116] et Park [147], les niveaux électroniques sont excités par le mode de translation des électrons libres. Par conséquent, la température T_{el} est égale à la température du gaz d'électrons T_e. Cette hypothèse est approximativement valable pour les niveaux d'énergie inférieurs. Les niveaux élevés s'écartent de cette condition mais contribuent très faiblement à l'énergie totale [144]. Ces derniers ne sont pas pris en compte dans le calcul de l'énergie électronique.

Pour vérifier que l'énergie d'excitation électronique des espèces lourdes est négligeable devant l'énergie totale du milieu, on trace sur la figure 5.13(a), pour le cas d'épreuve FIRE II au point



(a) **Energies le long de la ligne d'arrêt, FIRE II 1634s, modèle de Park, maillage raffiné**

(b) **Rapport de l'énergie électronique sur l'énergie interne le long de la ligne d'arrêt**

Fig. 5.13: Validité de l'hypothèse portant sur l'énergie d'excitation électronique

de vol $t = 1634s$, les distributions des différents termes d'énergie le long de la ligne d'arrêt : l'énergie interne - égale à la différence entre l'énergie totale E et l'énergie cinétique Ec - les énergies de vibration des espèces N_2 et O_2, l'énergie du gaz d'électrons et l'énergie $E_{el}(T_e)$. Cette dernière ne dépasse pas 6% de l'énergie interne du milieu. Elle est du même ordre de grandeur que l'énergie de translation du gaz d'électrons. Les énergies de vibration sont très faibles car les molécules sont intégralement dissociées dans la couche de choc. On trace également sur la figure 5.13(a) le terme $E_{el}(T)$. Ce dernier correspond à l'énergie maximale que peut atteindre le mode d'excitation électronique. Il s'obtient en supposant que la température T_{el} est égale à la température de translation des particules lourdes T. Le rapport de l'énergie $E_{el}(T)$ et de l'énergie interne $E - Ec$ n'excède pas 15%.

La figure 5.13(b) présente le rapport entre l'énergie $E_{el}(T_e)$ et l'énergie interne $E-Ec$ le long de la ligne d'arrêt pour les différents cas d'épreuve. Pour le cas RAM-C II à l'altitude $71km$, ce rapport est inférieur à 3%. Pour le cas FIRE II, quel que soit le point de vol, il n'excède pas 6%. On rappelle que pour le point de vol $1648,5s$, on a supposé que le milieu est à l'équilibre. Cette hypothèse explique le pic à 6% avant la stabilisation à 2% dans la couche de choc que l'on observe sur la figure 5.13(b).

Il apparaît donc que l'erreur introduite en négligeant l'énergie d'excitation électronique devant l'énergie totale du milieu est acceptable. On ajoute que, dans le cas des rentrées terrestres à grande vitesse, le rayonnement modifie l'occupation des niveaux électroniques. Cette dernière ne suit plus une distribution de Boltzmann et on ne peut pas représenter correctement le terme d'énergie électronique si l'on ne prend pas en compte les effets radiatifs [172].

On s'intéresse maintenant aux phénomènes dissipatifs au sein du gaz d'électrons libres. Ces phénomènes sont liés à la viscosité, la diffusivité et la conductivité thermique des électrons. La viscosité d'un gaz pur d'électrons s'exprime à l'aide de la loi de Blöttner *et al.* [20] et des coefficients de Gupta *et al.* [79] :

$$\mu_e = 0,1 \exp[2,5 \ln T_e - 37,4475] \qquad [kg.m^{-1}.s^{-1}] \tag{5.22}$$

A l'instar des espèces lourdes, la viscosité des électrons dans le mélange s'obtient selon le modèle

d'Armaly et Sutton [12] (voir chapitre 2). Le coefficient de diffusion des électrons est relié aux coefficients de diffusion des espèces ionisées par la relation [116] :

$$D_e = m_e \frac{\sum_I D_I \gamma_I}{\sum_I m_I \gamma_I} \tag{5.23}$$

où le terme γ_I désigne le coefficient isentropique de l'espèce ionisée I. La conductivité thermique d'un gaz pur d'électrons s'exprime à l'aide de la relation d'Eucken [201] :

$$\eta_{t,e} = \frac{5}{2}\mu_e C v_e = \frac{15}{4}\frac{R}{M_e}\mu_e \tag{5.24}$$

Le terme Cv_e désigne la capacité calorifique à volume constant des électrons. La conductivité thermique dans le mélange s'obtient à l'aide de la loi de mélange d'Armaly et Sutton [13] :

$$\eta_e = \frac{\eta_{t,e}}{1 + \sum_{r\neq e} \frac{x_r}{x_e}\Phi_{er}\frac{M_e M_r}{4(M_e+M_r)^2}\frac{1}{A^*_{er}}\left(8A^*_{er} + 5\frac{M_r}{M_e} + 15\frac{M_e}{M_r}\right)} \tag{5.25}$$

où le terme Φ_{er} est défini au chapitre 2. On a introduit les constantes $A^*_{er} = 1,25$, $B_{er} = 0,20$ et $F_{er} = 1,00$.

Lorsque les termes dissipatifs sont pris en compte, l'équation de conservation de l'énergie du gaz d'électrons s'écrit :

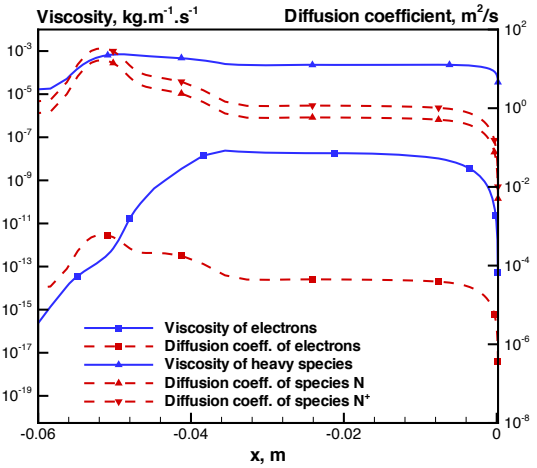
$$\begin{aligned} \underbrace{\partial_t \rho y_e e_e}_{\text{instationnaire}} + \underbrace{\partial_{x_j}(\rho y_e e_e + p_e)u_j}_{\text{advection}} &= \underbrace{u_j \partial_{x_j} p_e}_{\text{travail du champ électrique}} + \underbrace{\partial_{x_j}\left(\eta_e \partial_{x_j} T_e\right)}_{\text{conduction}} \\ &+ \underbrace{\partial_{x_j}\left(\rho h_e D_e \partial_{x_j} y_e\right)}_{\text{diffusion}} + \underbrace{S_{e-t} + S_{e-r} + S_{e-v}}_{\text{relaxation énergétique}} \\ &+ \underbrace{\dot{w}_e e_e}_{\text{production/destruction chimique}} \end{aligned} \tag{5.26}$$

Pour quantifier les phénomènes dissipatifs internes au gaz d'électrons, on calcule les propriétés de transport par un post-traitement des résultats, pour les cas d'épreuve RAM-C II à l'altitude $61km$ et FIRE II au point de vol $t = 1634s$. On utilise les résultats obtenus avec le modèle chimique de Park [153, 148], le maillage 104×104 pour le cas RAM-C II et le maillage raffiné pour le cas FIRE II.

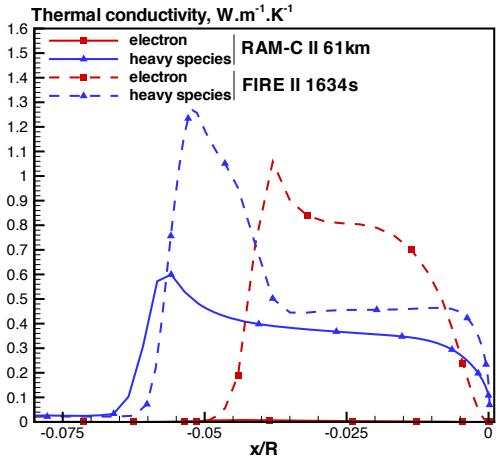
La figure 5.14(a) présente l'évolution, le long de la ligne d'arrêt, de la viscosité et du coefficient de diffusion des électrons et des espèces lourdes pour le cas FIRE II. Les propriétés de transport associées au gaz d'électrons sont nettement plus faibles que celles associées aux espèces lourdes. L'écart est de quatre ordres de grandeur pour la viscosité et de huit ordres de grandeur pour la diffusivité. Ce résultat n'est pas surprenant, étant donnée la très faible masse des électrons. De plus, les gradients $\partial_{x_j} T_e$ et $\partial_{x_j} T$ d'une part, et $\partial_{x_j} y_e$ et $\left(\partial_{x_j} y_s\right)_{s\neq e}$ d'autre part, sont comparables. Par conséquent, négliger les termes de viscosité et de diffusion des électrons dans les équations de bilan n'introduit pas d'erreur notable.

La figure 5.14(b) présente la distribution le long de la ligne d'arrêt de la conductivité thermique des électrons et des espèces lourdes. Pour le cas RAM-C II, le coefficient associé aux

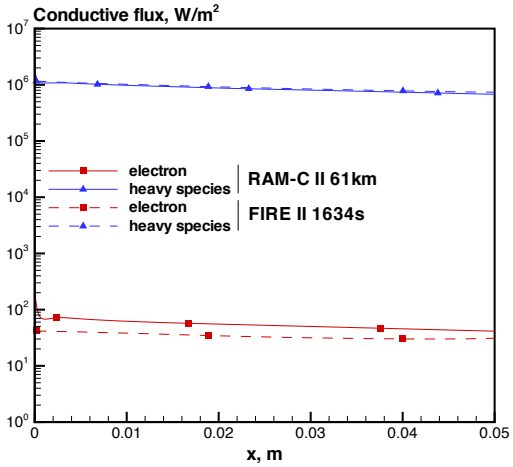
électrons est quasiment nul. En revanche, pour le cas FIRE II, la conductivité des électrons est du même ordre de grandeur que celle des espèces lourdes. Plus précisément, la conductivité thermique croît lorsque la température des électrons augmente (voir figure 5.11(a)). Elle atteint une valeur de l'ordre de $0,8 W.m^{-1}.K^{-1}$ dans la couche de choc. Cependant, dans cette zone, la température T_e est constante. Par conséquent, le terme de conduction thermique dans l'équation (5.26) est faible car il contient le gradient de la température T_e. A la paroi, la conductivité thermique chute car les électrons disparaissent au cours des processus chimiques. De ce fait, le flux pariétal de conduction thermique des électrons est négligeable par rapport au flux conductif des espèces lourdes. La figure 5.14(c) montre en effet qu'il y a un rapport 10000 entre les deux termes pour les deux cas d'épreuve. On peut donc estimer que négliger la conduction thermique des électrons n'introduit pas d'erreur importante dans la prédiction de l'échauffement pariétal.



(a) **FIRE II 1634s, viscosité et coefficient de diffusion le long de la ligne d'arrêt, modèle de Park, maillage raffiné**

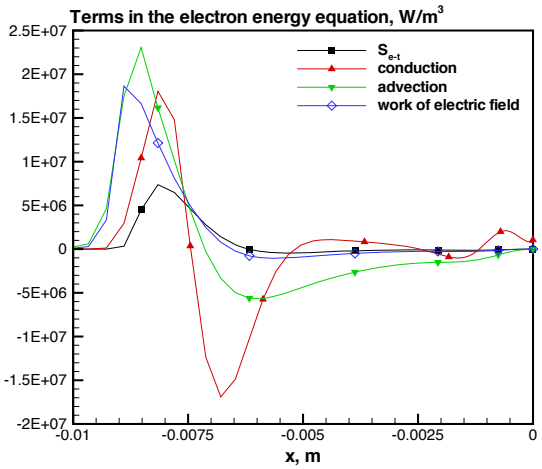


(b) **Conductivités thermiques le long de la ligne d'arrêt**

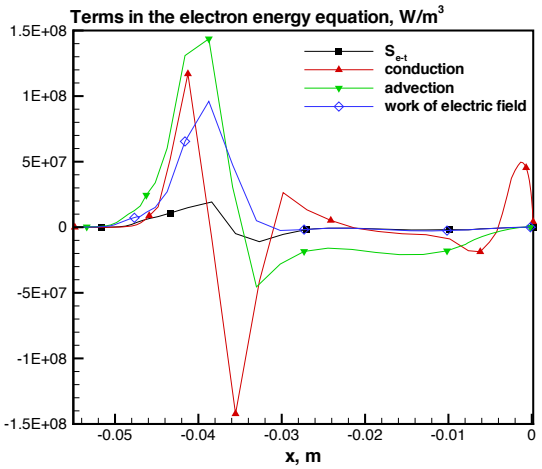


(c) **Flux conductifs à la paroi**

Fig. 5.14: Validité des hypothèses portant sur les termes de dissipation au sein du gaz d'électrons, partie 1/2



(d) **RAM-C II 61km, termes apparaissant dans l'équation de bilan d'énergie du gaz d'électrons, modèle de Park, maillage** 104×104



(e) **FIRE II 1634s, termes apparaissant dans l'équation de bilan d'énergie du gaz d'électrons, modèle de Park, maillage raffiné**

Fig. 5.14: Validité des hypothèses portant sur les termes de dissipation au sein du gaz d'électrons, partie 2/2

Il reste à vérifier que négliger le terme de conduction dans l'équation de bilan d'énergie des électrons est satisfaisant. Pour ce faire, on trace sur les figures 5.14(d) et 5.14(e) l'évolution le long de la ligne d'arrêt des principaux termes qui apparaissent dans l'équation (5.26) : le terme d'advection, le terme de conduction thermique, le terme d'échange e-T et le travail du champ électrique. La figure 5.14(d) correspond au cas RAM-C II et la figure 5.14(e) au cas FIRE II. On voit que les quatre termes sont du même ordre de grandeur au niveau du choc, où le gaz est en déséquilibre thermique. Cependant, on sait que dans cette zone, les termes dissipatifs sont mal représentés. Les termes de conduction, de relaxation énergétique et le travail du champ électrique tendent vers zéro dans la partie de la couche de choc où le gaz est à l'équilibre thermique. Dans la couche limite, le terme de conduction thermique devient le terme dominant. En effet, le milieu est à l'équilibre thermique mais le gradient de la température des électrons est élevé.

On conclut de cette analyse que négliger la conduction thermique des électrons modifie peu le bilan d'énergie totale mais pourrait introduire des erreurs inportantes dans le calcul du champ de température des électrons. Au niveau du choc et dans la couche limite, ces erreurs peuvent modifier les processus chimiques d'ionisation et également la position du choc. Cependant, nous ne savons pas résoudre le problème de manière correcte d'un point de vue numérique lorque le terme de conduction thermique est pris en compte [50].

Dans ce chapitre, on s'est intéressé à la modélisation hydrodynamique des écoulements hypersoniques faiblement ionisés. On a étendu l'approche proposée par Coquel et Marmignon [124] aux écoulements contenant plusieurs espèces ionisées et à des vitesses de l'ordre de $11km/s$. L'intérêt de l'approche repose sur une formulation conservative du système d'équations de conservation, obtenue en remplaçant l'équation de conservation de l'énergie

des électrons traditionnellement considérée par une équation portant sur l'entropie du gaz d'électrons. La formulation conservative permet d'utiliser les méthodes classiques de résolution numérique sans risque d'introduire d'erreur d'un point de vue mathématique ou d'instabilité numérique [50]. Le traitement numérique du flux de fluide parfait repose sur une linéarisation exacte de type Roe adaptée aux mélanges gazeux ionisés.
Le modèle impose de négliger la conduction thermique au sein du gaz d'électrons. Il s'agit d'une hypothèse a priori forte. Cependant, nous avons montré que le flux de conduction thermique lié au gaz d'électrons est négligeable devant le flux conductif lié aux particules lourdes.
D'autre part, les comparaisons avec les résultats numériques publiés dans la littérature ont montré que, pour les cas d'épreuve traités, nos résultats sont satisfaisants. L'erreur par rapport aux quelques données expérimentales dont nous disposons est acceptable. Enfin, nous jugeons préférable de s'assurer un traitement mathématique et numérique correct, même si c'est au prix d'une simplification de la modélisation hydrodynamique.
Par ailleurs, cette étude a montré la très grande dépendance du champ hydrodynamique vis-à-vis de la modélisation physico-chimique, du modèle de cinétique chimique et de la condition de catalycité de paroi entre autres. Les incertitudes sont grandes et ne peuvent être levées, faute de données expérimentales suffisantes. Avec une modélisation physico-chimique simplifiée, nous avons obtenu des résultats qui ne sont certes pas meilleurs que ceux obtenus avec une modélisation plus complète, mais qui ne sont pas non plus moins bons.
L'étape suivante de la démarche consiste à introduire les phénomènes radiatifs dans la modélisation.

Chapitre 6

Développement et validation d'une plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement pour les écoulements de rentrée terrestre

Lorsqu'un véhicule pénètre dans l'atmosphère terrestre à grande vitesse, le gaz entourant le véhicule est susceptible d'émettre et d'absorber du rayonnement. Les processus radiatifs intervenant dans les couches de choc - décrits au chapitre 1 (§ 1.1.2 et § 1.1.3.2) - modifient le champ hydrodynamique. Le couplage entre le champ de rayonnement et le champ hydrodynamique doit être pris en compte dans la modélisation (§ 1.2.3).
Dans ce chapitre, l'objectif est de développer et de valider une plateforme de calcul permettant de coupler le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement dans le cadre des écoulements de rentrée terrestre à grande vitesse. Le domaine de vitesse concerné, typiquement V>10km/s, correspond au domaine où le rayonnement ne peut pas être négligé. De plus, l'écoulement peut être ionisé et en déséquilibre thermochimique.
Dans un premier temps, on développe la plateforme de calcul. Pour cela, on choisit des modèles appropriés pour calculer le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement et on définit une méthodologie pour les coupler. On choisit ensuite un cas d'épreuve pour lequel on dispose de données expérimentales. Le cas choisi est l'essai en vol FIRE II. Dans les conditions définies par ce cas d'épreuve, on paramètrise les modèles de la plateforme de calcul afin d'obtenir des résultats précis dans un temps de calcul raisonnable. On analyse ensuite certains des aspects de la modélisation, notamment l'effet du couplage hydrodynamique/rayonnement sur l'échauffement pariétal. Enfin, on valide la plateforme de calcul en comparant les résultats numériques aux données expérimentales.

6.1 Développement de la plateforme de calcul

Pour développer la plateforme de calcul couplé hydrodynamique/rayonnement, la première étape consiste à définir la modélisation hydrodynamique, choisir un modèle de propriétés radiatives des gaz adapté aux applications en atmosphère terrestre et sélectionner et implémenter la méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif. La seconde étape consiste à définir la méthodologie de couplage, d'un point de vue numérique.

6.1.1 Choix des modèles

6.1.1.1 Modélisation hydrodynamique

Pour des vitesses supérieures à $10km/s$, le milieu s'ionise (chapitre 1, § 1.1.2). De ce fait, le modèle chimique se compose des onze espèces suivantes : N_2, O_2, NO, N, O, N_2^+, O_2^+, NO^+, N^+, O^+ et e^-.

Par ailleurs, la couche de choc est susceptible d'être en déséquilibre thermique. Ce déséquilibre est modélisé par l'approche multitempérature (T, T_e, T_{v,N_2}, T_{v,O_2}).

La modélisation hydrodynamique retenue est la modélisation présentée au chapitre 2. On utilise la modélisation physico-chimique simplifiée présentée dans le tableau 2.1. L'approche numérique est l'approche développée au chapitre 5, basée sur une linéarisation de type Roe.

6.1.1.2 Modèle de propriétés radiatives des gaz

Lors des rentrées à grande vitesse dans l'atmosphère terrestre, le rayonnement atomique est particulièrement important [75] car les molécules sont partiellement, voire complètement dissociées derrière le choc. Une représentation satisfaisante de ce type de rayonnement nécessite une description fine des spectres d'émission et d'absorption, par une approche de type raie-par-raie (§ 1.2.2.2).

Nous choisissons d'utiliser le modèle de propriétés radiatives implémenté dans le code PARADE [172]. Ce modèle est décrit au chapitre 3 (§ 3.2.2). Dans la version utilisée, il prend en compte les contributions radiatives des huit espèces chimiques suivantes : N_2, N_2^+, NO, N, O, N^+ et e^-. Le peuplement des niveaux d'énergie interne, y compris électronique, est supposé de type Boltzmannien. Le domaine spectral est spécifié par l'utilisateur. Il est discrétisé de manière uniforme en un nombre de points spectraux également imposé par l'utilisateur. Les paramètres d'entrée du code sont les densités des espèces chimiques, la température des électrons libres et, pour chaque espèce lourde, la température de translation-rotation, la température de vibration et la température d'excitation électronique. Pour toutes les espèces lourdes, la température de translation-rotation est la température T et la température d'excitation électronique est la température T_e. En effet, d'après Lee [116] et Park [147], les niveaux électroniques sont excités par le mode de translation des électrons libres. Par conséquent, la température du mode électronique est égale à la température du gaz d'électrons T_e. Cette hypothèse est approximativement valable pour les niveaux d'énergie inférieurs, au contraire des niveaux élevés qui ont tendance à s'en écarter [144]. Cependant, pour les applications qui nous intéressent, l'écart avec une approche QSS par exemple reste faible [142]. Pour les espèces moléculaires N_2 et O_2, les températures de vibration sont les températures T_{v,N_2} et T_{v,O_2}, respectivement. Pour les autres espèces moléculaires, la température de vibration est la température T.

6.1.1.3 Méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif

Le choix de la méthode de résolution de l'ETR dépend de l'objectif visé.

Un premier objectif consiste à calculer la luminance ou le flux de rayonnement en un point de la surface du véhicule de rentrée. Dans ce cas, on utilise la méthode de lancer de rayons décrite au chapitre 3 (§ 3.3.2). Le rayonnement pris en compte est le rayonnement incident dans l'angle solide $\Omega = 2\pi(1-\cos\theta_{\max})$ centré sur la normale à la paroi au point considéré et de demi-angle d'ouverture $\theta_{\max}$. L'angle solide est discrétisé par la donnée de N_ϕ directions azimutales et N_θ directions zénithales. La méthode de lancer de rayons est une méthode tridimensionnelle précise

mais relativement coûteuse en temps de calcul. Combinée à un modèle de propriétés radiatives de type raie-par-raie, elle est également coûteuse en occupation mémoire.

Un second objectif consiste à calculer le champ de rayonnement. Pour les raisons évoquées précédemment, l'utilisation de la méthode de lancer de rayons n'est pas envisageable car elle s'avère coûteuse. De ce fait, on utilise la méthode des plans tangents décrite au chapitre 3 (§ 3.3.1). La méthode est considérée comme valide pour des applications autour de corps fortement émoussés. Il est possible de quantifier l'erreur engendrée par l'approximation des plans tangents en comparant localement les résultats donnés par cette méthode avec ceux donnés par la méthode de lancer de rayons.

Nous avons implémenté la méthode de lancer de rayons et la méthode des plans tangents dans un même solveur. Ce solveur reprend la structure globale du code ASTRE [193, 195, 194] ainsi que la plupart de ses sous-programmes, notamment la méthode de construction des rayons. On rappelle que chaque rayon est divisé en un nombre de segments correspondant au nombre de cellules de maillage traversées. A chaque segment sont associées les grandeurs thermodynamiques prises au centre de la cellule. Le maillage est identique au maillage utilisé pour le calcul hydrodynamique.

L'implémentation de la méthode des plans tangents dans le code de calcul a été validée sur un cas d'épreuve de type mur plan (voir Annexe D).

6.1.2 Elaboration de la stratégie de couplage

Le rayonnement agit sur le champ hydrodynamique (§ 1.1.3.2). Du point de vue de la modélisation, il modifie le bilan énergétique, l'occupation des niveaux d'énergie interne des particules ainsi que le bilan de masse des espèces chimiques (§ 1.2.3).

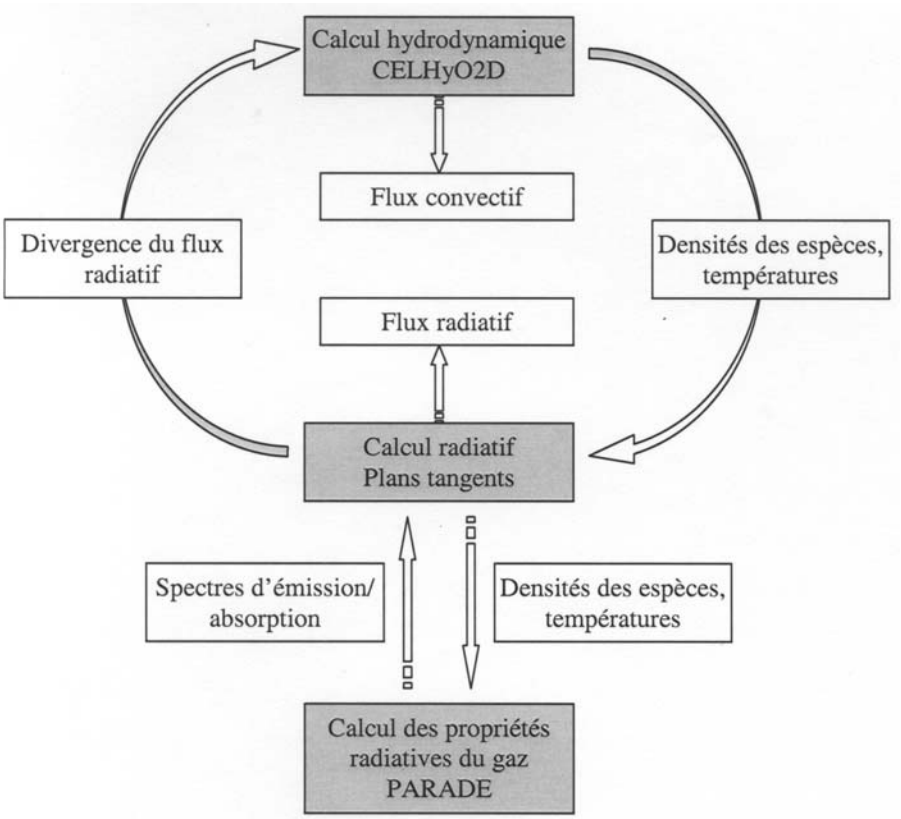
L'influence sur les bilans d'énergie apparaît sous la forme de termes sources dans les équations de conservation d'énergie. Dans le bilan d'énergie totale, ce terme correspond à la puissance radiative. Pour les autres réservoirs d'énergie - énergies de vibration des espèces moléculaires en déséquilibre thermique vibrationnel, énergie de translation du gaz d'électrons - le terme source est beaucoup plus délicat à définir. Il correspond à une fraction de la puissance radiative qui serait déterminée en ne tenant compte que des processus radiatifs agissant effectivement sur le mode d'énergie considéré. Cependant, le code PARADE ne permet pas une telle distinction et on néglige les contributions radiatives dans les bilans d'énergie de vibration et d'énergie des électrons. Cette approximation est valable lorsque les processus radiatifs prépondérants n'agissent pas sur ces modes, ce qui est le cas par exemple lorsque les transitions sont de type lié-lié atomique. Dans ce cas, seul le bilan d'énergie d'excitation électronique est modifié. Toutefois, cette énergie est négligée dans la modélisation hydrodynamique ; l'étude menée au chapitre 5 a montré que cette approximation est valable pour des régimes de vitesse de l'ordre de $11km/s$. Par ailleurs, à de telles vitesses, les molécules sont fortement dissociées. Par conséquent, l'énergie de vibration est très faible et le fait de négliger l'influence des processus radiatifs sur les bilans d'énergie vibrationnelle ne devrait pas engendrer d'erreurs trop importantes.

Concernant l'influence des processus radiatifs sur le peuplement des niveaux, l'approche multitempérature n'est pas adaptée aux cas où l'équilibre de Boltzmann est rompu. Or pour des applications de rentrée terrestre à des vitesses de l'ordre de $11km/s$, l'écart entre l'approche multitempérature et une approche QSS sur la prédiction des spectres d'émission/absorption ne dépasse pas 3% [142]. Par conséquent, on suppose la condition d'équilibre de Boltzmann vérifiée et on ne tient compte de l'effet radiatif sur le peuplement des niveaux que par les variations de température.

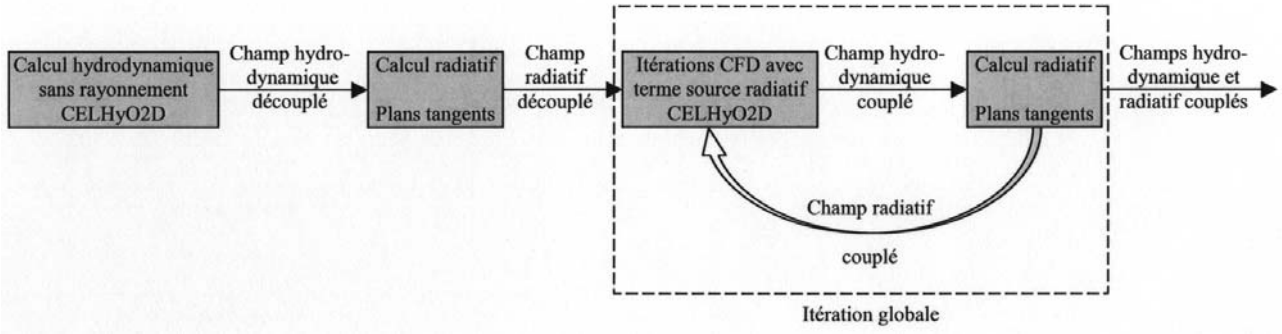
Enfin, tenir compte de l'effet radiatif dans les équations de bilan de masse des espèces chimiques nécessite le développement de modèles de type collisionnel-radiatif (§ 1.2.3). Cet effet n'est pas pris en compte dans notre étude.

Finalement, on traduit le couplage entre le champ de rayonnement et le champ hydrodynamique uniquement par le terme source dans l'équation de bilan d'énergie totale (§ 2.1). Ce terme correspond à la puissance radiative volumique qui s'exprime, au signe près, comme la divergence du flux radiatif : $P^R = -\nabla.\mathbf{q}^R$.

D'un point de vue numérique, on traite le couplage hydrodynamique/rayonnement par une approche faiblement couplée similaire à celle utilisée dans le cas des rentrées martiennes (chapitre 4, § 4.1.3), comme illustré sur la figure 6.1.



(a) **Plateforme de calcul**



(b) **Séquence de calcul couplé**

Fig. 6.1: Méthodologie de couplage faible pour les écoulements de rentrée terrestre

On calcule dans un premier temps le champ hydrodynamique découplé - c'est-à-dire sans tenir compte des effets radiatifs - puis le champ de rayonnement découplé. Ensuite on procède à de nouvelles itérations CFD, mais cette fois la contribution radiative est prise en compte. Le terme source radiatif est introduit de manière explicite dans l'équation de bilan d'énergie totale.

Comme indiqué sur la figure 6.1(b), les champs radiatifs découplé et couplé sont obtenus avec la méthode des plans tangents. Il est également possible d'utiliser la méthode de lancer de rayons pour calculer localement le rayonnement incident à partir du champ hydrodynamique découplé ou couplé.

Pour favoriser la convergence, on utilise les techniques proposées par Hartung *et al.* [90] qui ont été présentées au chapitre 4 (§ 4.1.3). Ainsi, le terme source radiatif est mis à zéro dans les zones où la température est inférieure à $350K$ afin d'éviter une incompatibilité entre le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement dans la région de choc. Par ailleurs, dans chaque cellule, le terme source radiatif est sous-relaxé en combinant la puissance radiative à l'itération globale n et la valeur à l'itération précédente $n-1$, selon la relation :

$$(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^{n'} = d_q(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^{n-1} + (1-d_q)(\nabla \cdot \mathbf{q}^R)^n \tag{6.1}$$

Dans notre étude, le facteur de relaxation d_q est égal à $0,5$.

6.2 Choix du cas d'épreuve

6.2.1 Description du cas d'épreuve

Le cas d'épreuve choisi correspond au vol expérimental FIRE II [55, 30, 29] décrit au chapitre 5 (§ 5.3.3). La vitesse de rentrée initiale est de l'ordre de $11km/s$. Les données enregistrées, décrites et analysées par Cornette [55], Cauchon [29] et Cauchon *et al.* [30], correspondent à un large domaine de vol, allant des écoulements à haute altitude, grande vitesse et en fort déséquilibre, aux écoulements à basse altitude, relativement faible vitesse et à l'équilibre.

On rappelle que l'avant-corps de la sonde était couvert par trois boucliers thermiques en Beryllium empilés les uns sur les autres. L'intérêt de cette technologie était d'éviter que la température de la paroi n'atteigne des niveaux trop élevés. Les deux premiers boucliers ont été éjectés durant le vol, respectivement aux temps $t = 1642,5s$ et $t = 1648,1s$.

Des mesures ont été effectuées et analysées au cours de trois périodes expérimentales [55, 30, 29]. La première période correspond au début de la rentrée dans l'atmosphère. Elle s'étend de l'instant $t = 1631,30s$ à l'instant $t = 1636,47s$. La seconde période s'étend de l'instant $t = 1642,47s$ à l'instant $t = 1642,90s$. La troisième période s'étend de l'instant $t = 1648,16s$ à l'instant $t = 1648,50s$. Ces deux dernières périodes correspondent aux instants qui suivent l'éjection des premier et second boucliers thermiques, respectivement.

Différents types de mesures ont été réalisées. Tout d'abord, des radiomètres totaux ont mesuré la luminance directionnelle incidente en trois points de la surface du véhicule. Les positions des radiomètres sont indiquées sur la figure 5.7 du chapitre 5. L'un est placé au point d'arrêt, le second sur le bouclier mais à proximité de l'épaulement, et le troisième sur la face arrière de la sonde. Nous nous intéressons uniquement aux deux radiomètres placés sur la face avant. La position du second radiomètre est donnée dans le tableau 6.1 en fonction du point de trajectoire. En effet, du fait de la structure du bouclier thermique en couches superposées [29], les coordonnées de ce point varient au fur et à mesure que les première et deuxième couches

Période expérimentale	R_{cal}/R_{flt}		Coordonnées $(x\,;\,y)$ du
	point d'arrêt	2^{nd} radiomètre	2^{nd} radiomètre, m
$1631,30s - 1636,47s$	1,295	1,023	(0,036 ; 0,258)
$1642,47s - 1642,90s$	1,256	1,016	(0,039 ; 0,249)
$1648,16s - 1648,50s$	1,400	1,072	(0,042 ; 0,240)

Tab. 6.1: Données liées aux mesures en vol de la mission FIRE II [29]

sont éjectées. Les coordonnées données dans le tableau 6.1 sont estimées à partir des indications de Cauchon [29] selon lesquelles le second radiomètre est positionné à un angle variant de 16° à 20° par rapport à la ligne d'arrêt.

Le domaine de longueur d'onde couvert par les radiomètres totaux s'étend de 2000Å à 40000Å. A partir des mesures, Cauchon [29] a estimé la valeur du flux radiatif incident à l'aide de la relation approchée :

$$q^{R-} = 2\pi kI = 2\pi k \frac{R_{cal}}{R_{flt}} \frac{I"}{\tau} \tag{6.2}$$

Le coefficient 2π correspond à l'angle solide hémisphérique vu par un point de la paroi. Le coefficient k est un facteur de forme, lié à la courbure du bouclier thermique. Il est pris égal à $0,84$. Le rapport R_{cal}/R_{flt} est un facteur correctif lié à l'instrument et à l'évolution des conditions de mesure. Sa valeur est donnée dans le tableau 6.1 en fonction de la période de mesure. Le terme τ désigne la transmittivité de la fenêtre de quartz qui protégeait le radiomètre du gaz chaud. Sa valeur est de l'ordre de $0,81$. On précise que l'angle de vue à travers la fenêtre de quartz est de 10°. Par conséquent, l'appareil ne mesure que le rayonnement incident provenant d'un espace angulaire de $2\pi(1 - \cos 5°) = 0,024sr$ centré sur la normale à la paroi. Enfin, le terme $I"$ désigne la grandeur réellement mesurée par l'appareil et I la luminance directionnelle incidente à la paroi.

En plus de la luminance directionnelle, un spectro-radiomètre placé au niveau du point d'arrêt a mesuré le spectre de luminance monochromatique directionnelle dans la plage plus restreinte $2000 - 6000$Å.

Par ailleurs, des calorimètres ont permis de quantifier l'échauffement de la paroi généré à la fois par transfert convectif et par absorption du rayonnement incident. Les mesures ont été effectuées en quatre points de la surface des boucliers thermiques.

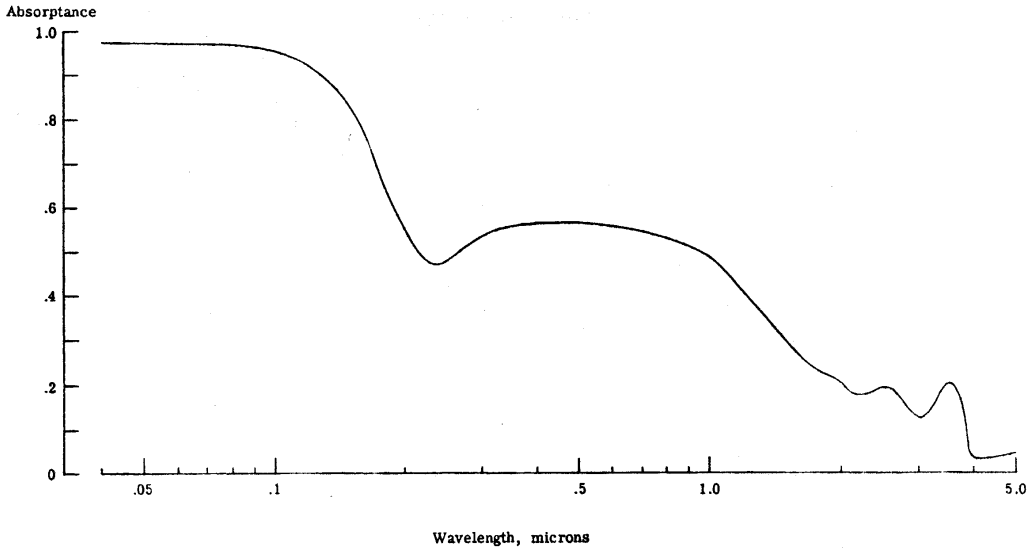
6.2.2 Choix des points de vol

Les grandeurs mesurées sont la luminance directionnelle incidente, la luminance monochromatique directionnelle incidente et le flux total (par "flux total", on entend la somme du flux convectif et du flux radiatif absorbé) à la paroi. Pour calculer numériquement des luminances incidentes, la connaissance du champ de rayonnement est suffisante. Par contre, pour calculer le flux radiatif absorbé par la paroi, il est nécessaire de connaître en plus les propriétés radiatives de la paroi.

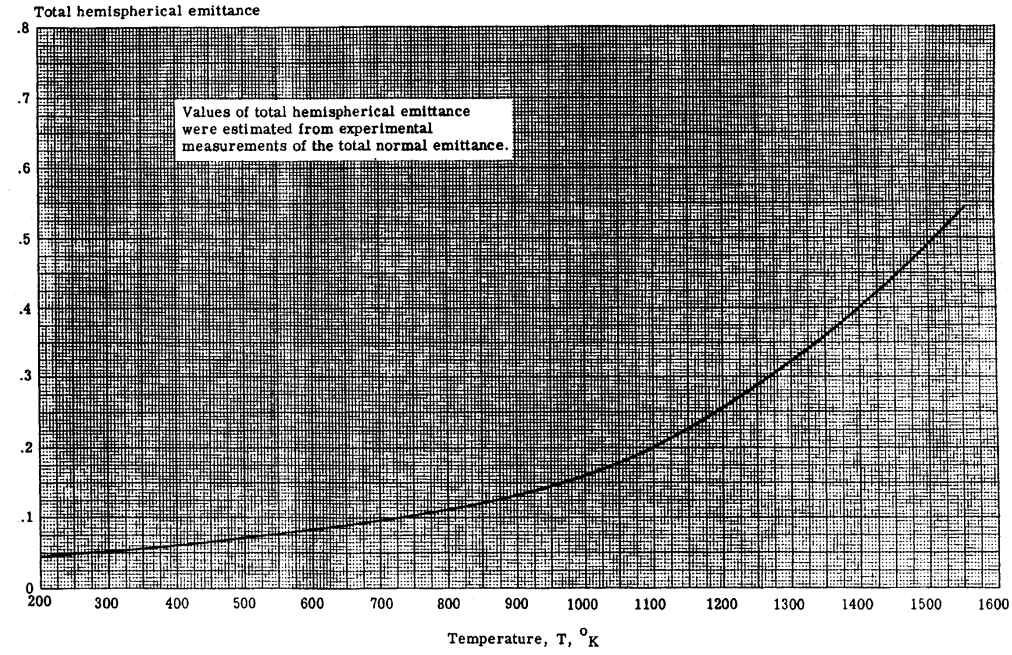
Plus précisément, il est nécessaire de connaître l'émissivité (ou absorptivité*) spectrale du Beryllium. Cornette [55] donne l'absorptivité spectrale du Beryllium dans des conditions standard de température, soit environ $300K$ (figure 6.2(a)). Nous n'avons pas trouvé de données pour des températures plus élevées.

*D'après la loi de Kirchhoff, l'absorptivité monochromatique directionnelle d'un corps opaque est égale à son émissivité monochromatique directionnelle.

Au cours des trois périodes expérimentales, la température de la paroi est de l'ordre de $600K$ [29]. D'après la figure 6.2(b), l'émissivité totale du Beryllium vaut $0,05$ à $300K$ et $0,08$ à $600K$. Par conséquent, on peut supposer que la distribution d'émissivité spectrale à la température $600K$ est proche de celle à la température $300K$. En revanche, pour des températures plus élevées, l'émissivité totale augmente fortement, jusqu'à $0,5$ à $1500K$. Par conséquent, il n'est pas judicieux d'utiliser la distribution d'absorptivité spectrale de la figure 6.2(a) si la température de la paroi atteint de tels niveaux. En particulier, au point de vol $1640,5s$, la température de paroi est de $1560K$: de ce fait, nous ne retenons pas ce point de vol dans cette étude.



(a) **Absorptivité spectrale du Beryllium poli à la température de laboratoire**



(b) **Variation de l'émissivité hémisphérique totale du Beryllium en fonction de la température**

Fig. 6.2: Propriétés radiatives du Beryllium [55]

Temps, s	Vitesse, km/s	Densité, kg/m^3	Température, K	T_{wall}, K
1634	11,36	$3,72 \cdot 10^{-5}$	195	615
1643	10,48	$7,80 \cdot 10^{-4}$	276	640
1648,5	7,96	$3,40 \cdot 10^{-3}$	260	540

Tab. 6.2: Points de vol de la sonde FIRE II

Nous avons donc retenu les trois points de vol suivants : $t = 1634s$, $t = 1643s$ et $t = 1648,5s$. Les conditions d'écoulement sont données dans le tableau 6.2. La température de la paroi varie entre $540K$ et $640K$. Les trois points choisis correspondent à chacune des trois périodes d'analyse des mesures, pour lesquelles l'écoulement est respectivement en fort déséquilibre, proche de l'équilibre et à l'équilibre.

6.2.3 Choix de la méthodologie de calcul pour chaque point de vol

Le long de la trajectoire, les conditions thermodynamiques évoluent. Par conséquent, on adapte la modélisation en fonction du point de vol. Les modélisations retenues sont détaillées et justifiées au chapitre 5 (§ 5.3.3.3). On les rappelle brièvement ci-dessous.

Point de vol $1634s$ **: déséquilibre thermique fort** L'écoulement étant en fort déséquilibre thermique au niveau du choc, on utilise le modèle multitempérature complet (T, T_{v,N_2}, T_{v,O_2}, T_e). On utilise trois modèles de cinétique chimique : le modèle de Dunn et Kang [62], le modèle de Park [153, 148] et le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148]. Pour les deux premiers modèles, la température d'activation des réactions d'ionisation par impact d'électron est prise égale à $\sqrt{TT_e}$. Elle vaut T pour le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148].
Le maillage contient 35×73 cellules. Il est raffiné à la paroi et dans le choc.
Le domaine spectral de rayonnement du gaz est limité à la plage $800 - 15000$Å. Ce choix est courant dans la littérature [75, 69]. On a vérifié qu'en dehors de cette plage, le rayonnement du gaz est négligeable. Par conséquent, la plage $2000 - 15000$Å est assimilée à la plage de mesure des radiomètres, qui couvre en théorie le domaine plus vaste $2000 - 40000$Å.

Point de vol $1643s$ **: pic du flux pariétal** La vitesse de rentrée est encore très élevée tandis que la densité du milieu est vingt fois plus forte qu'au point de vol précédent. Ces conditions d'écoulement sont très contraignantes et l'échauffement pariétal atteint son maximum [29].
L'écoulement est proche de l'équilibre. Pour faciliter les calculs, on suppose que le mode de vibration des molécules est à l'équilibre avec le mode de translation. On utilise donc un modèle à deux températures (T,T_e). Pour le calcul des propriétés radiatives des espèces N_2 et O_2, on suppose que le peuplement des états vibrationnels au sein d'un état électronique suit une distribution de Boltzmann à la température T_e.
Le modèle de cinétique chimique est le modèle de Park [153, 148]. La température d'activation des réactions d'ionisation par impact d'électron est prise égale à $\sqrt{TT_e}$.
Le maillage contient 33×103 cellules. Il est raffiné dans la couche limite et au niveau du choc.
Le domaine spectral de rayonnement du gaz est le domaine $800 - 40000$Å. Il est plus étendu que dans le cas précédent. En effet, la contribution dans la plage $15000 - 40000$Å n'est pas négligeable pour ce point de vol.

Point de vol $1648,5s$ **: équilibre thermique** La vitesse de l'écoulement est nettement plus modérée, de l'ordre de $8km/s$, pour une altitude de $41km$. Par conséquent, on suppose que le milieu est à l'équilibre thermique. Le modèle de cinétique chimique est le modèle de Park [153, 148].
Le maillage contient 35×87 mailles. Il est raffiné dans la couche limite et au niveau du choc. Comme pour le point de vol $1634s$, le domaine spectral de rayonnement du gaz est restreint à la plage $800 - 15000$Å.

6.3 Paramétrisation des modèles

6.3.1 Paramétrisation du modèle de propriétés radiatives des gaz et analyse des spectres d'émission

L'objectif de cette étude paramétrique est de déterminer le nombre de points de discrétisation nécessaire à la description des spectres d'émission/absorption. Ce nombre est déterminé de manière empirique, sur la base de calculs du champ de rayonnement découplé avec la méthode des plans tangents, en augmentant progressivement le nombre de points spectraux jusqu'à convergence des flux radiatifs incident (q^{R-}) et partant (q^{R+}). On regarde en particulier les flux le long de la ligne d'arrêt. En effet, c'est dans cette région que le choc est le plus fort, et donc l'émission radiative la plus intense. Le temps de calcul par la méthode des plans tangents est de l'ordre de $10s$ par point de maillage sur une machine de type Silicon Graphics Origin 3400 de 64 Go de mémoire avec un processeur R14000A@600MHz.

Pour le point de vol $1634s$ et la plage spectrale $800 - 15000$Å, la figure 6.3(a) montre qu'il faut 250000 points de discrétisation pour obtenir des valeurs de flux convergées. En effet, si on se limite à 100000 points par exemple, on sous-estime le flux à la paroi de 5%. Théoriquement, la résolution précise d'une raie nécessite un pas de discrétisation de $\Delta\tilde{\nu} = 0,003cm^{-1}$ [185]. Ce pas théorique conduit à près de quarante millions de points spectraux pour le domaine de longueur d'onde $800 - 15000$Å (qui correspond au domaine de nombre d'onde $6666 - 12500cm^{-1}$), ce qui est prohibitif d'un point de vue numérique (taille mémoire et temps de calcul). Cependant, on obtient des valeurs de flux convergées sans avoir recours à une telle finesse de résolution.

Le profil de flux incident q^{R-} montre que 70% du rayonnement émis en direction de la paroi est émis au niveau du pic de température des électrons, à l'abscisse $x = -0,035m$. Les couches de gaz situées entre les abscisses $x = -0,035m$ et $x = -0,005m$ contribuent de manière identique au flux radiatif car la température est constante dans cette région. De ce fait, le profil est linéaire, chaque couche de gaz apportant un incrément égal au flux. Dans la couche limite, le flux q^{R-} diminue de 10%, signe que dans cette zone, le gaz absorbe plus qu'il n'émet.

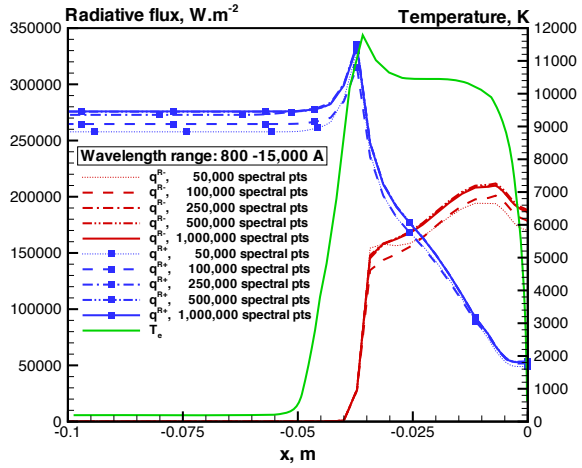
Le flux partant de la paroi est proche de $50000W/m^2$. Ce flux correspond à la somme du flux émis par la paroi dans la plage $800 - 15000$Å et du flux réfléchi par celle-ci. La température de la paroi est de $615K$. D'après la loi de Wien (chapitre 1, équation (1.25)), la paroi émet majoritairement dans la plage $23500 - 377000$Å. Par conséquent, elle n'émet que très faiblement dans la plage $800 - 15000$Å et on peut considérer que la valeur $50000W/m^2$ correspond purement au rayonnement réfléchi. Le flux incident étant de l'ordre de $185000W/m^2$, on en déduit qu'environ 25% du flux incident est réfléchi par la paroi.

Le flux partant augmente de manière linéaire dans la couche de choc où la température du gaz est constante. La croissance est plus forte au niveau du pic de température des électrons. Le rayonnement est partiellement absorbé dans la région en aval du pic de température T_e. Dans

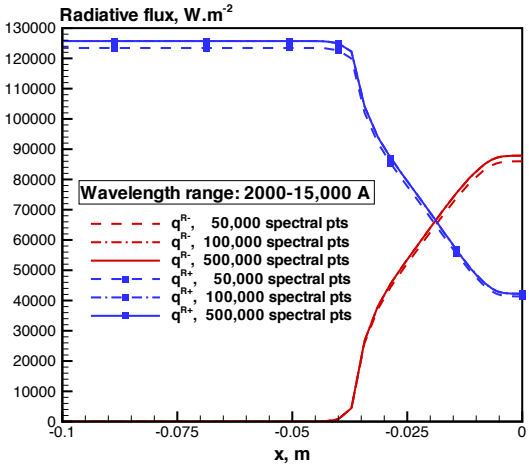
l'écoulement amont, le flux partant est constant car, dans cette région de faible température, le milieu est transparent.

La figure 6.3(b) présente l'évolution des flux radiatifs le long de la ligne d'arrêt, pour la plage spectrale $2000 - 15000$Å. Cette plage correspond à la plage de mesure des radiomètres, si l'on fait abstraction du domaine $15000 - 40000$Å dans lequel le rayonnement est négligeable. Le flux incident est de $88000 W/m^2$, contre $185000 W/m^2$ dans la plage $800 - 15000$Å. On en déduit que le rayonnement dans la plage $800 - 2000$Å contribue pour moitié au flux incident.

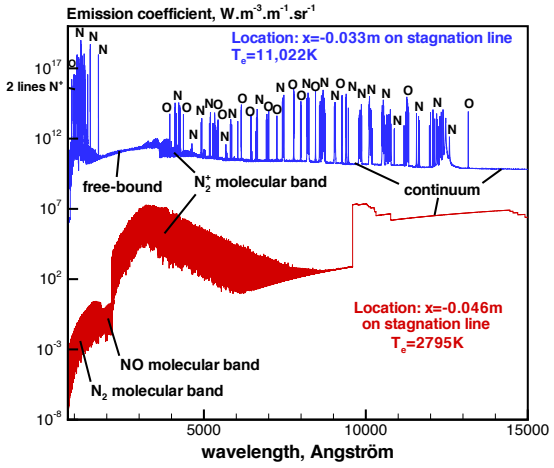
On constate également qu'il n'y a pas d'absorption dans la plage $2000 - 15000$Å, que ce soit au niveau de la couche limite ou du choc. Le gaz absorbe du rayonnement uniquement dans la plage $800 - 2000$Å.



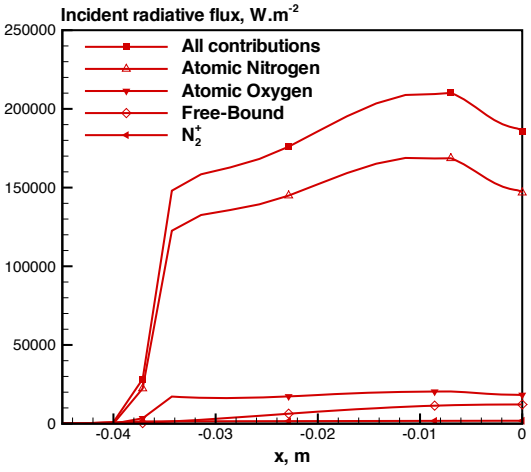
(a) **Flux radiatifs et température du gaz d'électrons le long de la ligne d'arrêt, domaine spectral** $800 - 15000$**Å**



(b) **Flux radiatifs le long de la ligne d'arrêt, domaine spectral** $2000 - 15000$**Å**



(c) **Spectres d'émission**



(d) **Flux radiatif incident le long de la ligne d'arrêt, domaine spectral** $800 - 15000$**Å**

Fig. 6.3: Point de vol $1634s$, convergence des flux radiatifs en fonction du nombre de points spectraux et spectres d'émission, modèle de Park

Le flux partant, qui correspond au rayonnement réfléchi par la paroi, est de l'ordre de $40000 W/m^2$, soit 45% du flux incident. En effet, la figure 6.2(a) montre que l'absorptivité de la paroi est de l'ordre de 0,5 dans la plage $2000 - 15000$Å. De plus, le flux partant dans cette plage correspond à 80% du flux partant dans la plage $800 - 15000$Å car la paroi absorbe fortement aux longueurs d'onde inférieures à 2000Å. En effet, d'après la figure 6.2(a), l'absorptivité du Beryllium est proche de 1 dans cette région du spectre.

La figure 6.3(b) montre que dans la plage $2000 - 15000$Å, 100000 points spectraux suffisent pour atteindre une valeur convergée de flux. Cette différence par rapport au calcul dans la plage $800 - 15000$Å provient du fait que, d'une part, la plage spectrale est moins large et que, d'autre part, un grand nombre de raies atomiques fortement émissives est positionné à des longueurs d'ondes comprises entre 800Å et 2000Å. Pour illustrer ce propos, la figure 6.3(c) présente les spectres d'émission obtenus aux abscisses $x = -0,033m$ et $x = -0,046m$ le long de la ligne d'arrêt. A l'abscisse $x = -0,033m$, la température des électrons est proche de son maximum. Le spectre contient environ 200 raies atomiques de l'azote N et 85 raies de l'oxygène O. Les bandes moléculaires de l'espèce N_2 contribuent majoritairement dans la plage $800 - 1800$Å, celles de l'espèce NO dans la plage $1800 - 2200$Å et celles de l'espèce N_2^+ dans la plage $2200 - 8000$Å. Aux longueurs d'onde plus élevées, le niveau du coefficient d'émission est déterminé par les mécanismes du continuum.

En générant des spectres qui ne tiennent compte que d'un type de transition radiative - rayonnement atomique, moléculaire, lié-lié ou lié-libre - et pour une espèce chimique donnée, il est possible de quantifier la contribution apportée au flux par chaque mécanisme radiatif. Une quantification au plus juste imposerait de prendre en compte l'émission liée au mécanisme considéré mais l'absorption liée à l'ensemble des mécanismes. Dans notre cas, on effectue un calcul approché en ne tenant compte que de l'absorption liée au mécanisme considéré. On compare alors le flux radiatif à celui obtenu en tenant compte de l'ensemble des contributions.

Au point de vol $1634s$, on trouve que les raies atomiques contribuent à hauteur de 89% au flux radiatif incident. Ce chiffre est en bon accord avec les analyses de Greendyke et Hartung [75], menées dans l'hypothèse d'un milieu optiquement mince. En effet, ces derniers estiment à 90% environ la contribution des raies atomiques, dont 80% correspondent aux raies de l'azote ; les 10% restants sont attribués au rayonnement moléculaire de l'espèce N_2^+.

D'après la figure 6.3(d), dans notre cas, 79% du flux radiatif est produit par le rayonnement atomique de l'azote contre 10% pour l'atome d'oxygène. Ceci justifie le fait que, comme le montre la figure 6.3(a), la région du pic de température T_e est la région la plus émissive. En effet, le rayonnement atomique augmente avec la température d'excitation électronique. Or nous supposons que cette température est égale à la température du gaz d'électrons T_e. Par conséquent, le pic d'émission radiative correspond au pic de la température T_e, situé à l'abscisse $x = -0,035m$. On ajoute qu'à cette abscisse, les molécules sont entièrement dissociées. La densité des atomes, dont dépend également l'émission radiative, a atteint son niveau maximum (chapitre 5, figure 5.8(j)).

D'après la figure 6.3(d), le troisième mécanisme radiatif majoritaire est le mécanisme lié-libre. Il contribue à hauteur de 7% au flux incident. Cette contribution n'apparaît pas dans les résultats de Greendyke et Hartung [75]. Le rayonnement moléculaire de l'espèce N_2^+ ne contribue qu'à hauteur de 1%.

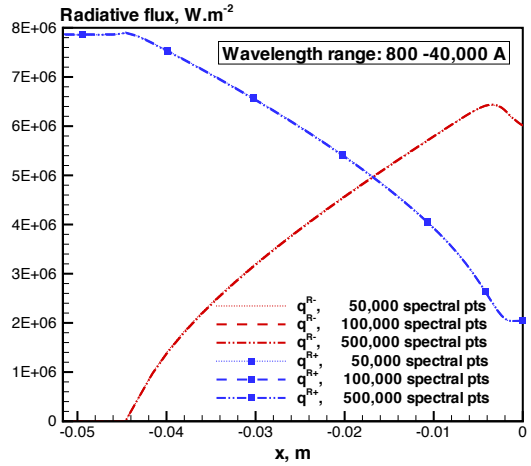
Enfin, la figure 6.3(d) montre que l'absorption provient essentiellement de l'atome d'azote.

Aux points de vol $1643s$ (figure 6.4(a)) et $1648,5s$ (figure 6.4(c)), 50000 points spectraux semblent suffisants pour obtenir des flux radiatifs convergés.

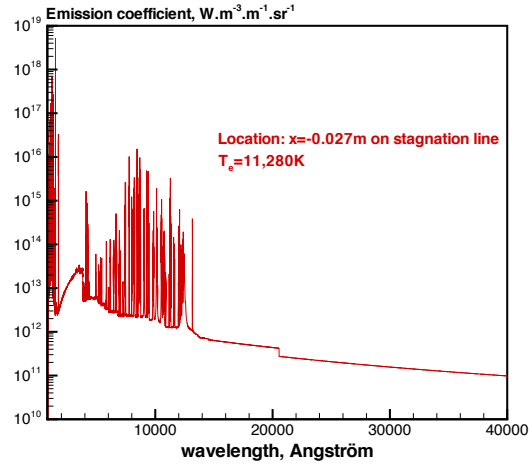
Au point de vol $1643s$, les raies atomiques contribuent pour 74% au rayonnement incident.

Les transitions de type lié-libre contribuent également de manière importante. Une partie du rayonnement émis dans la couche de choc est absorbée au niveau de la couche limite, à hauteur de 7% (figure 6.4(a)). Le flux partant de la paroi correspond à 34% du flux incident. La température de la paroi étant de $640K$, la paroi émet dans la plage $22650 - 362400$Å. Pour le point de vol $1643s$, le gaz émet dans la plage $800 - 40000$Å. Par conséquent, les plages d'émission/absorption du gaz et de la paroi se recouvrent en partie. De ce fait, le flux partant de la paroi dans la plage spectrale $800 - 40000$Å correspond en partie au flux émis par la paroi et en partie au rayonnement réfléchi.

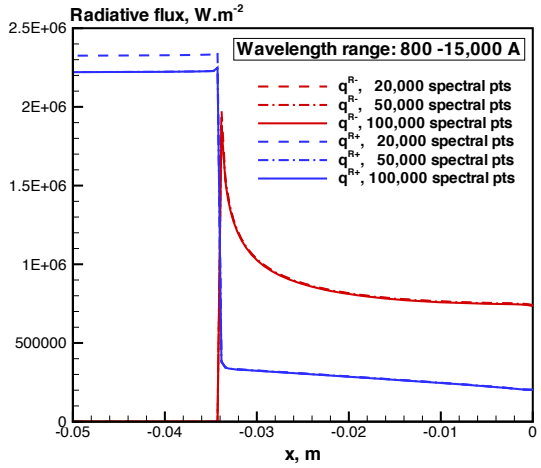
Au point de vol $1648,5s$, l'émission radiative est due pour 75% au rayonnement de l'espèce N_2 et pour 11% au rayonnement de l'espèce NO (figure 6.4(d)). Seulement 13% sont dus aux raies atomiques. Le gaz absorbe environ 62% du rayonnement émis au niveau du choc en direction de la paroi. L'absorption est forte derrière le choc et diminue à mesure que l'on se



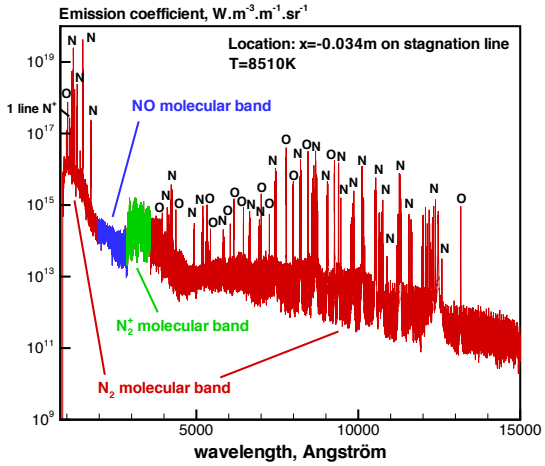
(a) $1643s$, **flux radiatifs le long de la ligne d'arrêt, domaine spectral** $800 - 40000Å$



(b) $1643s$, **spectre d'émission**



(c) $1648,5s$, **flux radiatifs le long de la ligne d'arrêt, domaine spectral** $800 - 15000$**Å**



(d) $1648,5s$, **spectre d'émission**

Fig. 6.4: FIRE II, points de vol $1643s$ et $1648,5s$, convergence des flux radiatifs en fonction du nombre de points spectraux et spectres d'émission, modèle de Park

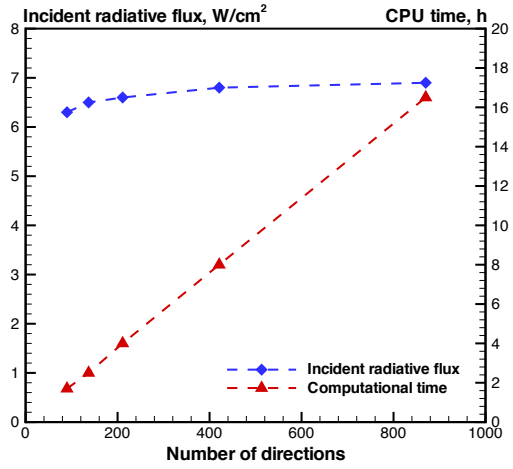
rapproche de la paroi. La température de la paroi étant de $540K$, elle n'émet pas dans la plage d'émission/absorption du gaz. Par conséquent, le flux partant de la paroi provient intégralement de la réflexion. Il correspond à 28% du flux incident.

6.3.2 Paramétrisation de la méthode de lancer de rayons

Le but de cette étude, réalisée avec Philipp Nagel [137], est de déterminer le jeu de paramètres (N_ϕ,N_θ) pour lequel la méthode de lancer de rayons est optimisée. Les nombres N_ϕ et N_θ sont définis au chapitre 3 (§ 3.3.2). Ils correspondent respectivement aux nombres de directions zénithale et azimutale qui permettent de discrétiser l'espace angulaire entourant le point de calcul. On rappelle que le nombre total de directions est égal à $N_\phi(N_\theta - 1) + 1$. L'optimisation du jeu de paramètres (N_ϕ,N_θ) résulte d'un compromis entre le temps de calcul et la précision des résultats. On veut maintenir un niveau de précision élevé puisque la solution obtenue par la méthode de lancer de rayons est considérée comme une solution de référence. Cependant, les temps de calcul ne doivent pas être prohibitifs.

Afin de déterminer le jeu de paramètres optimal, on calcule le flux radiatif incident au point d'arrêt pour le point de vol $1634s$. On utilise le champ hydrodynamique obtenu à l'aide du modèle de cinétique chimique de Park et Wilson [210, 153, 148], du modèle physico-chimique simplifié et du maillage contenant 35×62 cellules. Le calcul du champ hydrodynamique est décrit au chapitre 5 (§ 5.3.3). Le rayonnement incident provient de l'hémisphère complète entourant le point d'arrêt (angle solide $\Omega = 2\pi sr$, $\theta_{max} = 90°$). Dans cette étude, on se limite à l'intervalle spectral $2000 - 15000$Å afin de réduire le nombre de points spectraux à 100000. La machine de calcul est de type Silicon Graphics Origin 3400 de 64 Go de mémoire avec un processeur R14000A@600MHz.

Dans un premier temps, on augmente le nombre de directions en maintenant un rapport N_ϕ/N_θ égal à 1. L'évolution de la valeur du flux et du temps de calcul en fonction du nombre de directions est tracée sur la figure 6.5(a). Le temps de calcul croît linéairement avec le nombre de



(a) **Variation en fonction du nombre de directions à N_ϕ/N_θ constant et égal à 1**

Fig. 6.5: FIRE II 1634s, flux radiatif incident et temps de calcul par la méthode de lancer de rayons, modèle de Park et Wilson, maillage non raffiné, partie 1/2

directions. On atteint un bon compromis entre précision et temps de calcul pour un nombre de directions de l'ordre de 200. En effet, l'erreur relative sur la valeur de flux est de 4% par rapport à un calcul avec 800 directions, pour un temps de calcul quatre fois plus court. A convergence, la valeur du flux est de $6,9 W/cm^2$.

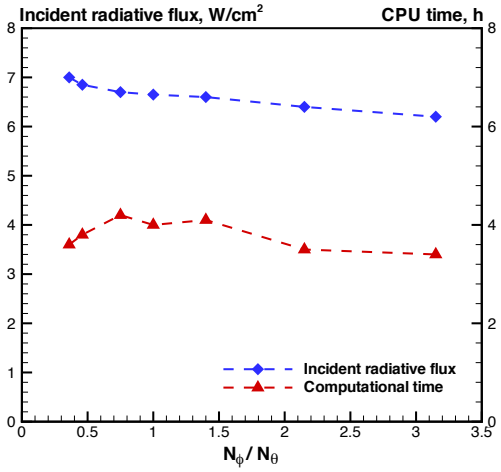
Dans un deuxième temps, on fait varier le rapport N_ϕ/N_θ en gardant un nombre de directions proche de 200. Les résultats sont présentés sur la figure 6.5(b). On obtient la valeur de $6,9 W/cm^2$ pour un rapport N_ϕ/N_θ de l'ordre de $0,4$.

On conclut cette analyse paramétrique en faisant varier le nombre de directions tout en maintenant un rapport N_ϕ/N_θ proche de $0,4$. La figure 6.5(c) montre que le jeu de paramètres optimal est le suivant :

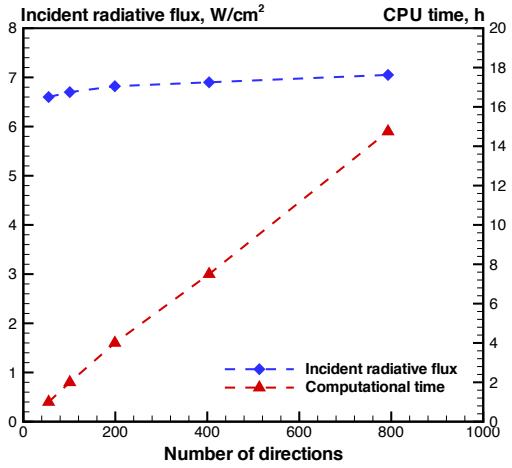
$$N_\phi = 9 \tag{6.3a}$$
$$N_\theta = 23 \tag{6.3b}$$
$$N_\phi/N_\theta = 0,391 \tag{6.3c}$$
$$N_\phi(N_\theta - 1) + 1 = 199 \text{ directions} \tag{6.3d}$$

L'écart sur le flux par rapport à une discrétisation en 793 directions est inférieur à 3% pour un gain en temps de calcul significatif puisque ce dernier est réduit de 75%.

On précise pour terminer que lorsque seulement une partie de l'espace angulaire est pris en compte pour le calcul du flux incident ($\theta_{max} < 90°$), on conserve le jeu de paramètres $(N_\phi, N_\theta) = (9, 23)$.



(b) **Variation en fonction du rapport N_ϕ/N_θ pour un nombre de directions constant et égal à 211**



(c) **Variation en fonction du nombre de directions à N_ϕ/N_θ constant et de l'ordre de $0,4$**

Fig. 6.5: FIRE II 1634s, flux radiatif incident et temps de calcul par la méthode de lancer de rayons, modèle de Park et Wilson, maillage non raffiné, partie 2/2

6.4 Analyse de la modélisation

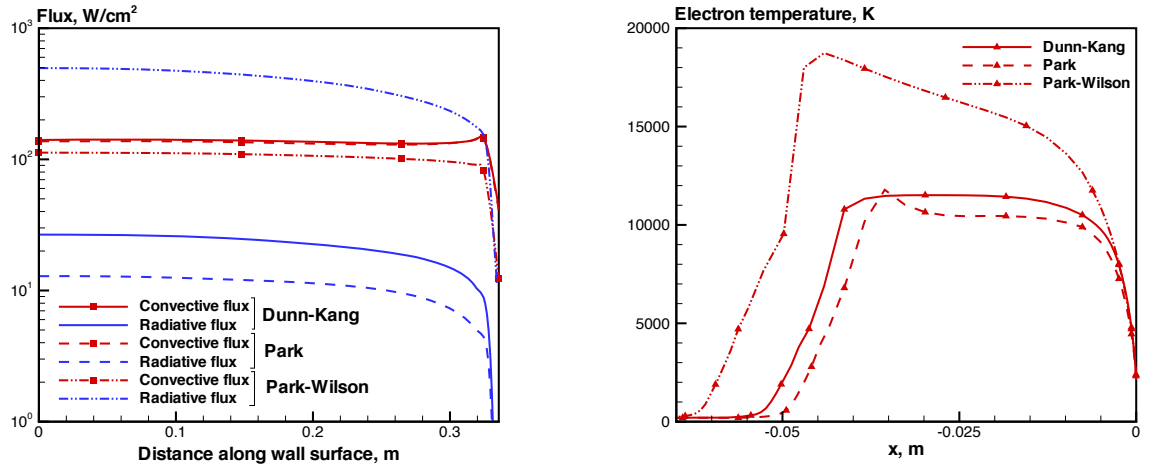
6.4.1 Analyse de l'influence du modèle chimique sur la prédiction de l'échauffement de paroi

On s'intéresse ici à l'influence du modèle de cinétique chimique sur la prédiction du flux de chaleur à la paroi, tant convectif que radiatif. Pour analyser cette influence, on calcule les flux découplés avec les modèles de Dunn et Kang [62], de Park [153, 148] et de Park et Wilson [210, 153, 148]. On se place au point de vol 1634s, où le niveau de déséquilibre de l'écoulement est le plus fort et le taux d'ionisation le plus élevé (chapitre 5, § 5.3.3.3). Par conséquent, c'est à ce point que l'écart entre les modèles chimiques risque d'être le plus important.

La figure 6.6(a) présente les flux convectif et radiatif découplés le long de la paroi. Le flux radiatif correspond au bilan de flux, c'est-à-dire à la différence entre le flux incident et le flux partant. L'écart sur les flux convectifs ne dépasse pas 20%. Par contre, l'écart sur les flux radiatifs est nettement plus élevé. En effet, le flux radiatif prédit avec le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] est trente-huit fois supérieur à celui obtenu avec le modèle de Park [153, 148].

Au point de vol 1634s, le rayonnement est majoritairement de type atomique (§ 6.3.1). De ce fait, le niveau de flux radiatif est étroitement lié au niveau de température du mode électronique des atomes. Dans notre modèle, cette température est supposée égale à la température du gaz d'électrons libres. Or la température T_e obtenue avec le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] est très supérieure à celle obtenue avec le modèle de Park [153, 148]. D'après la figure 6.6(b), le long de la ligne d'arrêt, elle atteint quasiment le double de cette dernière. D'autre part, le choc est positionné plus en amont, ce qui contribue également à accroître le niveau de flux radiatif, la couche de choc restant globalement optiquement mince.

D'après Cauchon [29], les mesures en vol indiquent que le flux radiatif incident au point d'arrêt dans la plage $2000 - 40000$Å est de $8,4 W/cm^2$ et le flux convectif de $170 W/cm^2$. Les niveaux de flux obtenus avec le modèle de Park et Wilson [210, 153, 148] - respective-



(a) **Flux convectifs et radiatifs le long de la paroi**

(b) **Température du gaz d'électrons le long de la ligne d'arrêt**

Fig. 6.6: Analyse de l'influence du modèle chimique, FIRE II 1634s, maillage raffiné, calculs découplés

ment $217 W/cm^2$ et $112 W/cm^2$ - sont très éloignés des niveaux déduits des mesures en vol. Au contraire, les niveaux de flux obtenus avec le modèle de Park [153, 148] - respectivement $9,1 W/cm^2$ et $137 W/cm^2$ - sont satisfaisants. Par conséquent, on retient ce modèle, en ajoutant que le modèle de Dunn et Kang [62] donne des niveaux de flux moins satisfaisants - respectivement $15,6 W/cm^2$ et $141 W/cm^2$.

6.4.2 Analyse de l'effet du couplage hydrodynamique/rayonnement

On s'intéresse ici à l'effet du couplage entre le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement. Le modèle de cinétique chimique est le modèle de Park [153, 148].

On rappelle que le processus de couplage s'effectue par des itérations globales. Une itération globale correspond à un certain nombre d'itérations CFD pendant lesquelles le champ radiatif est figé, suivi d'une réactualisation du champ radiatif. Ce dernier est calculé avec la méthode des plans tangents. Le nombre d'itérations globales nécessaires pour parvenir à faire converger le processus de calcul dépend du point de vol. Aux points de vol $1634s$ et $1648,5s$, quatre itérations suffisent. Au point de vol $1643s$, sept sont nécessaires, comme le montre la figure 6.7. Cette figure présente l'évolution, au cours des itérations CFD, des résidus correspondant aux variables conservatives ρu, ρE et ρs_e, respectivement liées à la vitesse axiale, à l'énergie totale et à l'entropie électronique. Chaque fois que le champ de rayonnement est réactualisé, la courbe d'évolution des résidus présente un pic, excepté à la dernière itération où les résidus restent constants. Ceci indique que le calcul est convergé. On vérifie de plus qu'en fin de calcul, le champ de rayonnement ne varie plus. On ajoute que le nombre d'itérations CFD entre deux calculs des transferts radiatifs est de l'ordre de 2000 en début de calcul et de 10000 en fin de calcul.

La figure 6.8(a) montre l'écart relatif du résultat couplé par rapport au résultat découplé. Pour une grandeur X, cet écart s'obtient par la relation :

$$\Delta X,\ \% = \frac{X_{\text{couplé}} - X_{\text{découplé}}}{X_{\text{découplé}}} \times 100 \tag{6.4}$$

On présente les écarts pour trois grandeurs prises au point d'arrêt : le flux total, égal à la

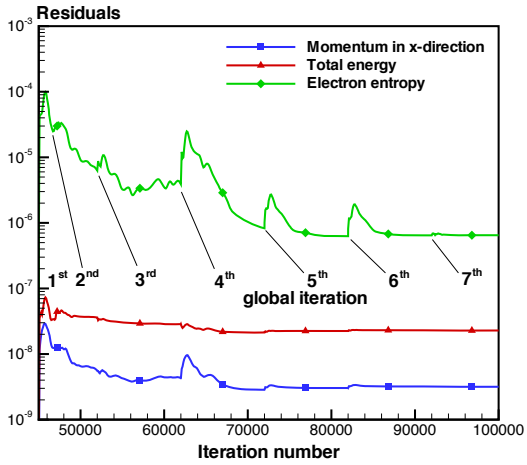
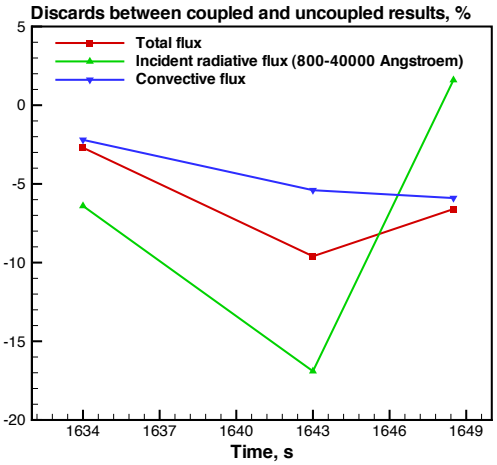
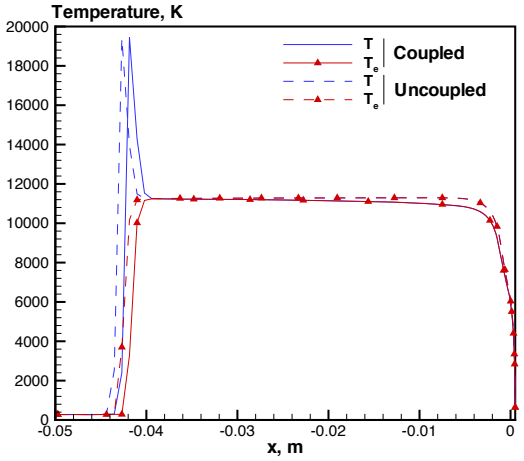


Fig. 6.7: FIRE II $1643s$, modèle de Park, maillage raffiné, évolution des résidus de certaines variables hydrodynamiques au cours du processus de couplage



(a) **Ecart entre les grandeurs couplées et découplées, prises au point d'arrêt**



(b) **FIRE II** $1643s$**, profils des températures le long de la ligne d'arrêt**

Fig. 6.8: Effet du couplage hydrodynamique/rayonnement, modèle de Park, maillage raffiné

somme du flux convectif et du flux radiatif absorbé par la paroi, le flux convectif et le flux radiatif incident dans la plage $800 - 40000$Å. Le couplage diminue à la fois le flux convectif et le flux radiatif [†]. On retrouve l'effet de "radiation cooling" décrit au chapitre 1 (§ 1.1.2 et 1.3.2) : l'émission radiative diminue l'énergie du gaz dans la couche de choc, et donc sa température (figure 6.8(b)). Cette baisse de température conduit à la décroissance du flux convectif. Elle limite également l'émission radiative, et donc le flux radiatif. Sur la figure 6.8(b), on voit que le couplage diminue aussi la distance de détachement du choc.

D'après la figure 6.8(a), l'effet de "radiation cooling" est le plus important au point de vol $1643s$, ce qui explique qu'il faille plus d'itérations globales pour converger le calcul. A ce point, le flux radiatif incident diminue de 17%, tandis que le flux convectif diminue de $5,5\%$. L'effet du couplage sur l'échauffement pariétal est donc relativement marqué. Aux deux autres points de vol, le couplage est moindre et les flux radiatif et convectif varient de 2 à 6%.

6.4.3 Quantification de l'erreur engendrée par la méthode des plans tangents

L'objectif de cette étude est d'évaluer l'erreur générée par l'approximation monodimensionnelle de la méthode des plans tangents. Pour cela, on compare localement le résultat obtenu par cette méthode avec celui obtenu par la méthode de lancer de rayons. Pour cette dernière, le paramètre θ_{max} est pris égal à 90° car on tient compte du rayonnement provenant de l'hémisphère complet entourant le point de calcul. Le modèle de cinétique chimique est le modèle de Park [153, 148]. Les calculs portent sur les champs hydrodynamiques couplés.

Les résultats sont présentés sur la figure 6.9. Au niveau du point d'arrêt, la méthode des plans tangents surévalue le flux radiatif incident de 12 à 17% par rapport à la méthode de lancer de rayons. Cette surévaluation provient du fait que la méthode des plans tangents ne tient pas compte de la courbure du choc. On rappelle que pour en tenir compte, Cauchon [29] a introduit un facteur $k = 0,84$ dans le calcul du flux radiatif à partir de la luminance radiative

[†]Au point de vol $1648,5s$, le flux radiatif incident croît, mais d'une valeur très faible $(+1,6\%)$.

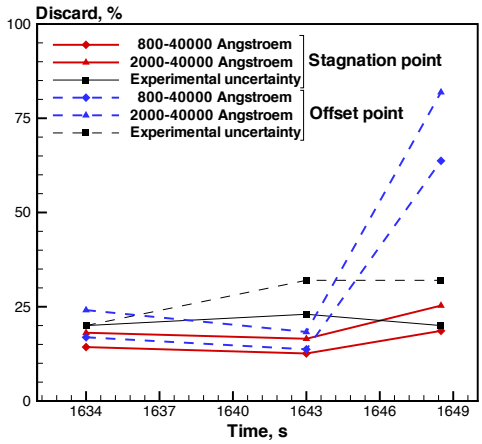


Fig. 6.9: Ecart relatif de la méthode des plans tangents par rapport à la méthode de lancer de rayons sur le calcul du flux radiatif incident

(§ 6.2.1). Cauchon a donc estimé que la courbure du choc diminue de 16% le flux radiatif par rapport à un choc droit. Ce pourcentage est comparable à celui qu'on obtient.

Au niveau du second radiomètre, décalé de 16 à 20° par rapport au point d'arrêt [29], l'écart est inférieur à 25% pour les points de vol $1634s$ et $1643s$. Par contre, il est de 80% au point de vol $1648,5s$. Cet écart est trop important pour que la méthode des plans tangents soit considérée comme valide. On sait que, par construction, la méthode est de moins en moins valable lorsqu'on s'écarte du point d'arrêt. De plus, suite à l'éjection des deux premiers boucliers thermiques, le rayon de nez au point $1648,5s$ est plus faible qu'aux autres points de vol. Par conséquent, la courbure du choc est la plus forte à ce point de vol. Il est donc normal de trouver un écart plus important.

On indique sur la figure 6.9 l'incertitude sur les données mesurées en vol par les radiomètres. Elle varie de 20% à 23% au niveau du point d'arrêt et de 20% à 32% au niveau du second radiomètre [29]. L'erreur engendrée par la méthode des plans tangents dépasse l'incertitude de mesure pour le point de vol $1648,5s$. Pour les autres points de vol, les résultats obtenus avec la méthode des plans tangents sont satisfaisants.

6.5 Validation de la plateforme de calcul par comparaison aux données en vol

Dans cette partie, on compare les résultats des calculs couplés avec les mesures réalisées au cours du vol de la sonde FIRE II [55, 30, 29]. On rappelle que les mesures portent sur les grandeurs suivantes :

- spectre de luminance monochromatique directionnelle incidente dans la plage $2000 - 6000$Å au point d'arrêt [30]
- luminance directionnelle incidente intégrée sur le spectre $2000 - 40000$Å au point d'arrêt et en un point de la paroi décalé par rapport à la ligne d'arrêt, d'un angle variant de 16° à 20° suivant le point de vol [29]
- flux total (flux convectif + flux radiatif absorbé par la paroi) en quatre points du bouclier thermique repérés par les positions $y/R = 0,10$, $y/R = 0,55$, $y/R = 0,89$ et $y/R = 1,0$, où R désigne le rayon de nez [55]

Longueur d'onde, Å	Nombre quantique de l'état vibrationnel initial	final	Longueur d'onde, Å	Nombre quantique de l'état vibrationnel initial	final
3079	3	0	4600	2	4
3308	2	0	4652	1	3
3564	2	1	4709	0	2
3582	1	0	5149	1	4
3884	1	1	5228	0	3
3914	0	0	5653	2	6
4237	1	2	5865	0	4
4278	0	1			

Tab. 6.3: Longueurs d'onde des principales têtes de bande du système $N_2^+(1-)$ [30]

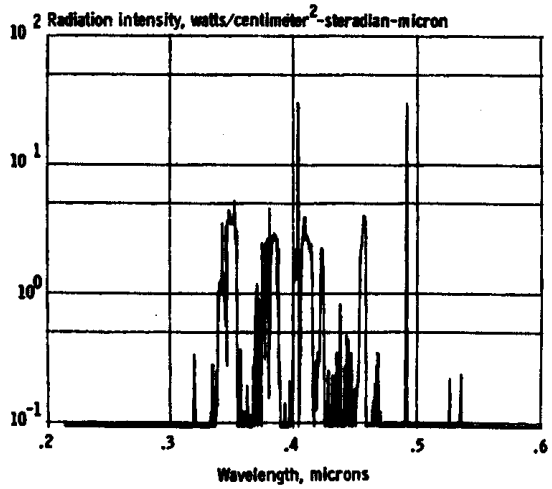
Les résultats de calculs sont rassemblés dans l'annexe E. Les tableaux E.1, E.2 et E.3 présentent les résultats obtenus pour les points de vol $1634s$, $1643s$ et $1648,5s$, respectivement.

On s'intéresse dans un premier temps au spectre de luminance monochromatique directionnelle incidente. La figure 6.10 permet de comparer les spectres mesurés expérimentalement [30] et les spectres calculés. Les échelles des graphiques correspondent, excepté le fait que l'abscisse est exprimée en micron dans le cas expérimental et en angström dans le cas numérique. Les spectres calculés sont obtenus en appliquant la méthode de lancer de rayons au champ hydrodynamique couplé. On spécifie un angle $\theta_{\max}$ égal à 5° afin de calculer le rayonnement incident dans un cône de visée de 10° d'angle d'ouverture. Ce cône de visée correspond à l'angle de vue du radiomètre spectral à travers la fenêtre en quartz [29]. L'analyse des mesures en vol réalisée par Cauchon *et al.* [30] est limitée à la plage spectrale $3000 - 6000$Å car les mesures aux longueurs d'onde inférieures à 3000Å ne sont pas jugées fiables.

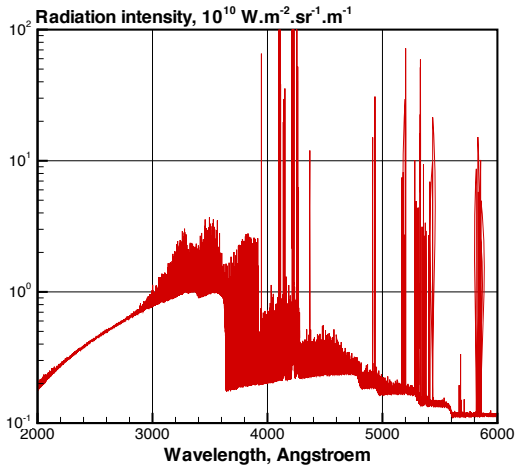
Au point de vol $1634s$, le rayonnement dans la plage $3100 - 3900$Å provient du système premier négatif de l'espèce ionisée N_2^+. D'après Cauchon *et al.* [30], on distingue sur le spectre expérimental les têtes de bande des transitions moléculaires (1,0), (0,0) et (0,1), où les deux chiffres désignent les nombres quantiques des états vibrationnels initial et final de la transition. Théoriquement, ces têtes de bande sont respectivement positionnées aux longueurs d'onde 3582Å, 3914Å et 4278Å [30] (tableau 6.3). Sur le spectre expérimental, les pics de luminance sont décalés d'environ 150Å vers les petites longueurs d'onde par rapport à la position théorique des têtes de bande. Sur le spectre calculé, on distingue les têtes de bande des transitions (2,0), (1,0), (0,0) et (0,1). Le niveau de luminance est satisfaisant par rapport au niveau mesuré, sachant que l'incertitude expérimentale est évaluée à 23% par Cauchon *et al.* [30].

Dans la plage $3900-6000$Å, on distingue sur le spectre calculé les raies atomiques des espèces N et O (voir aussi la figure 6.3(c)). On retrouve certaines de ces raies sur le spectre mesuré. Cependant, la résolution de l'instrument de mesure est de 40Å [30], elle n'est pas suffisante pour capter toutes les raies atomiques. Pour le calcul, la résolution spectrale est de 0,13Å.

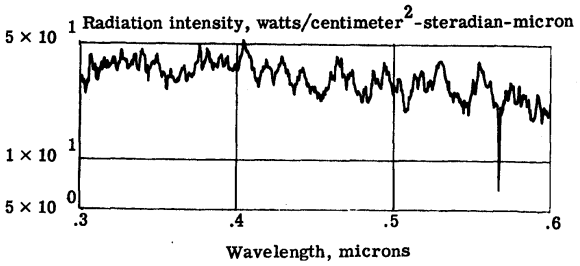
Au point de vol $1643s$, le spectre mesuré est relativement constant autour d'une valeur de l'ordre de $30 \cdot 10^{10} W.m^{-2}.sr^{-1}.m^{-1}$. Par le calcul, on obtient un niveau de l'ordre de $80 \cdot 10^{10} W.m^{-2}.sr^{-1}.m^{-1}$ entre 3000Å et 3900Å et $15 \cdot 10^{10} W.m^{-2}.sr^{-1}.m^{-1}$ pour les longueurs d'onde plus grandes. L'écart par rapport aux mesures est supérieur à l'erreur expérimentale, évaluée à 24% [30]. Aux longueurs d'onde supérieures à 4300Å, le calcul indique que le niveau de luminance est déterminé par les mécanismes du continuum. Selon Cauchon *et al.* [30], les



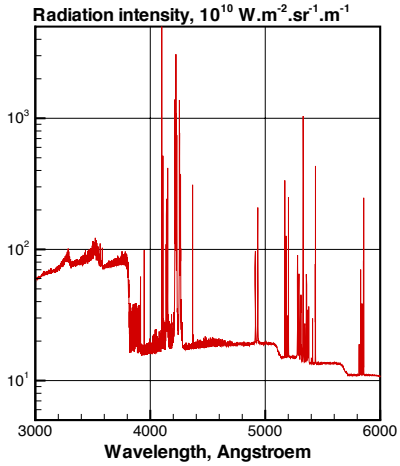
(a) $t = 1634,43s$, **mesure en vol [30]**



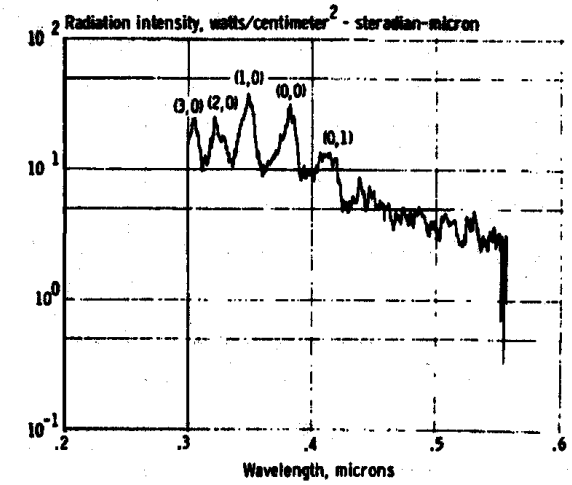
(b) $t = 1634s$, **calcul**



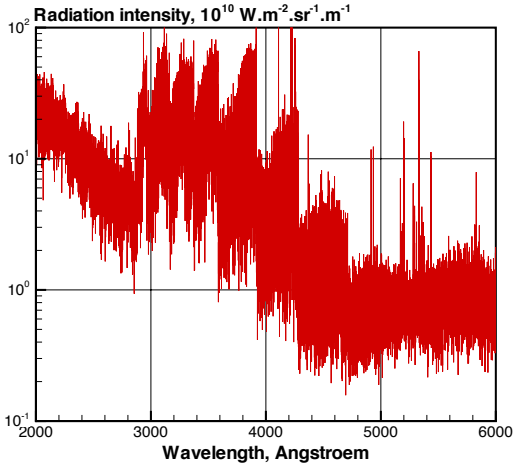
(c) $t = 1642,83s$, **mesure en vol [30]**



(d) $t = 1643s$, **calcul**



(e) $t = 1648,45s$, **mesure en vol [30]**



(f) $t = 1648,5s$, **calcul**

Fig. 6.10: Spectres de luminance monochromatique directionnelle dans la plage $2000 - 6000$Å

mécanismes dominants seraient le réattachement radiatif pour les ions N^+ et O^+ et le photodétachement pour l'espèce O^-. Les réactions associées s'écrivent (chapitre 1, § 1.1.3.2) :

$$N^+ + e^- \rightarrow N + h\nu \tag{6.5}$$
$$O^+ + e^- \rightarrow O + h\nu \tag{6.6}$$
$$O^- + h\nu \rightarrow O + e^- \tag{6.7}$$

Dans notre modèle, le seul mécanisme du continuum pris en compte est la photoionisation de l'atome d'azote. Il s'agit du mécanisme inverse du réattachement radiatif. La réaction associée s'écrit :

$$N + h\nu \rightarrow N^+ + e^- \tag{6.8}$$

Cette limitation peut expliquer pourquoi le niveau de luminance calculé est plus faible que le niveau mesuré. On ajoute que sur le spectre calculé, on distingue toujours les têtes de bande des principales transitions du système $N_2^+(1-)$ et les raies atomiques des espèces N et O. Ce n'est pas le cas sur le spectre mesuré.

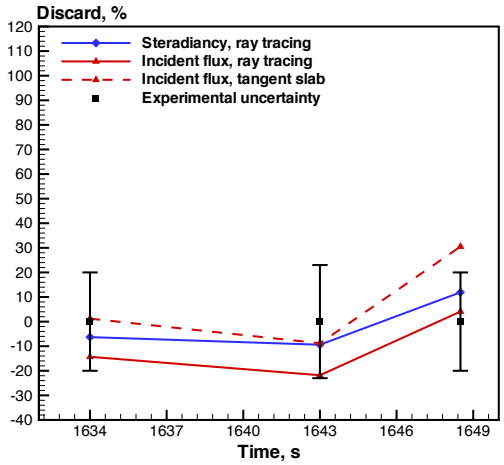
Au point de vol $1648,5s$, on distingue très nettement les têtes de bande du système $N_2^+(1-)$, à la fois sur le spectre mesuré et sur le spectre calculé. Sur le spectre calculé, on repère en plus la tête de bande de la transition (0,2) à 4709Å. Comme il a été dit au paragraphe 6.3.1, à ce point de vol, le rayonnement est essentiellement moléculaire. Le calcul donne un niveau de luminance satisfaisant par rapport aux mesures.

On s'intéresse maintenant à la luminance directionnelle incidente intégrée sur la plage $2000 - 40000$Å. Cette grandeur est directement mesurée expérimentalement par des radiomètres placés derrière une fenêtre en quartz [29], en deux endroits de la surface du bouclier thermique. Le cône de visée du dispositif expérimental a un angle d'ouverture de 10°. Cauchon [29] déduit de la mesure le flux radiatif incident à la paroi par la formule (6.2).

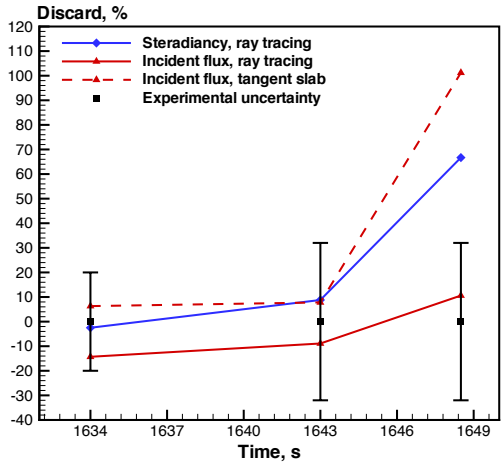
A partir du champ hydrodynamique couplé, on calcule la luminance directionnelle incidente intégrée sur la plage $2000 - 40000$Å à l'aide de la méthode de lancer de rayons. Pour reproduire les conditions expérimentales, le paramètre $\theta_{\max}$ est pris égal à 5°. On calcule également le flux radiatif incident dans cette même plage spectrale, soit avec la méthode des plans tangents, soit avec la méthode de lancer de rayons. Dans ce dernier cas, le paramètre $\theta_{\max}$ est pris égal à 90° afin de tenir compte du rayonnement incident provenant de l'hémisphère complet entourant le point de calcul. Le point de calcul en question est soit le point d'arrêt soit le point de la paroi correspondant à la position du second radiomètre.

Les résultats de l'étude sont présentés sur la figure 6.11(a) pour le point d'arrêt et sur la figure 6.11(b) pour le point décalé.
Au point d'arrêt, l'écart entre les résultats numériques et les mesures est inférieur à l'incertitude expérimentale, excepté pour la méthode des plans tangents au point de vol $1648,5s$. L'approximation liée à cette méthode ne semble plus valable pour ce point de vol où le rayon de nez est le plus faible, et donc la courbure du choc la plus grande.

Au point décalé, les résultats numériques obtenus avec la méthode de lancer de rayons sont satisfaisants aux points de vol $1634s$ et $1643s$. Au point de vol $1648,5s$, on surévalue la luminance radiative incidente de 67%. L'erreur pourrait provenir de l'hypothèse d'équilibre thermique. Cette hypothèse conduit à un pic de température élevé au niveau du choc pour l'ensemble des modes d'énergie (chapitre 5, figure 5.11(d)). Il est probable que ce pic serait moins élevé pour les modes de vibration des molécules et de translation des électrons sous l'hypothèse de déséquilibre thermique. Cependant, un tel calcul n'est pas sans poser de problème du point de vue de la modélisation. En effet, au point de vol $1648,5s$, le rayonnement est essentiellement



(a) **Radiomètre au point d'arrêt**



(b) **Second radiomètre, décalé du point d'arrêt**

Fig. 6.11: Ecart relatif, par rapport à la mesure en vol, sur le calcul de la luminance directionnelle incidente et du flux radiatif incident, selon la méthode de résolution des transferts radiatifs

moléculaire. Le rayonnement a donc une influence notable sur l'énergie de vibration des espèces moléculaires. Or, dans notre modèle, nous négligeons cette influence. Dans le cas d'un calcul en déséquilibre thermique, il faudrait distinguer la puissance radiative produite uniquement par les transitions vibrationnelles, pour chaque espèce en déséquilibre thermique vibrationnel, et introduire ce terme dans les équations de bilan d'énergie de vibration. Ce travail dépasse les objectifs que nous nous sommes fixés.

La méthode des plans tangents donne des résultats satisfaisants aux points de vol $1634s$ et $1643s$ mais pas au point de vol $1648,5s$. Pour ce dernier, on surévalue le flux radiatif incident de 100%.

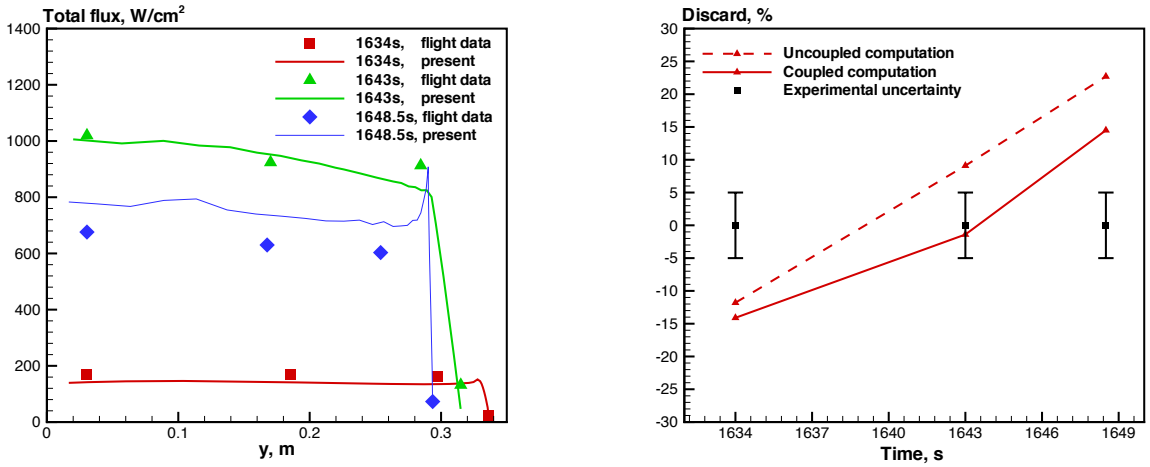
On s'intéresse maintenant au flux total à la paroi. On entend par flux total la somme du flux convectif et du flux radiatif absorbé. Ce dernier terme s'exprime à partir du flux radiatif incident et de l'absorptivité du Beryllium :

$$q_a^R = \int \alpha_\lambda q_\lambda^{R-} \mathrm{d}\lambda \tag{6.9}$$

La figure 6.12 et le tableau 6.4 permettent de comparer nos résultats numériques avec les mesures en vol [55]. La figure 6.12(a) présente l'évolution du flux total le long de la paroi. La valeur numérique présentée est le résultat du calcul couplé. La méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif est la méthode des plans tangents. La figure 6.12(b) montre l'écart relatif du flux calculé par rapport au flux mesuré au point d'arrêt. Au point de vol $1634s$, on sous-estime l'échauffement pariétal de 14%. Au point de vol $1648,5s$, on le surestime de 14,5%. Il n'y a qu'au point de vol $1643s$ que l'écart avec la mesure ne dépasse pas l'incertitude expérimentale, évaluée à 5% par Cornette [55]. D'après les études ci-dessus, le calcul des transferts radiatifs donne des résultats en bon accord avec les mesures. De plus, le flux radiatif absorbé ne représente que 9% du flux total au point de vol $1634s$ et 7% au point de vol $1648,5s$. Par conséquent, on attribue l'erreur sur le flux total à la contribution convective. Comme il a été dit au chapitre 5, le calcul

	Point de vol	Mesure en vol [55, 29]	Nos calculs	LAURA/ LORAN [75]	GIANTS/ NOVAR [142]	Gorelov et al. [71]	DSMC [188]
Flux	1634 s	-	133	130	105	-	225
convectif,	1643 s	-	688	530	750	-	-
W/cm^2	1648,5 s	-	729	550	670	-	-
Flux radia-	1634 s	-	13	20	20	-	25
tif absorbé,	1643 s	-	318	225	355	-	-
W/cm^2	1648,5 s	-	54	30	40	-	-
Flux	1634 s	170	146	150	125	138	-
total,	1643 s	1020	1006	755	1105	1035	-
W/cm^2	1648,5 s	675	773	580	710	-	-
Luminance	1634 s	1,6	1,5	4,2	1,4	5	-
incidente,	1643 s	64	58	39	60	50	-
$W/cm^2/sr$	1648,5 s	4,2	4,7	5	7	-	-

Tab. 6.4: Comparaison des résultats au point d'arrêt avec les mesures en vol et les résultats numériques de la littérature



(a) **Flux total le long de la surface, calcul couplé**

(b) **Ecart relatif par rapport aux mesures en vol sur le flux total au point d'arrêt**

Fig. 6.12: Comparaison des résultats avec les mesures en vol [55] pour le flux total (convectif + radiatif absorbé)

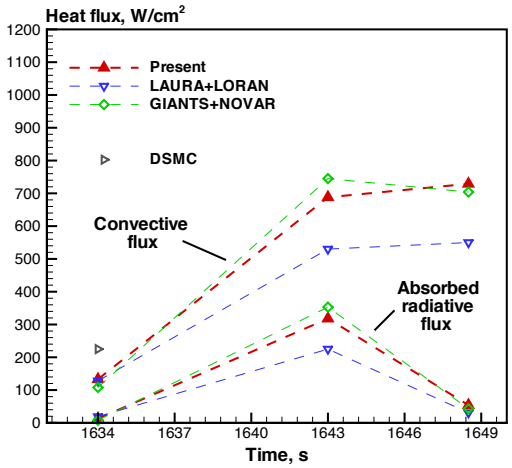
du champ hydrodynamique est très sensible à la modélisation physico-chimique et il est difficile de valider les différents modèles du fait du manque de données expérimentales.

La figure 6.12(b) montre que le couplage des champs hydrodynamique et radiatif permet d'améliorer globalement la qualité des résultats puisqu'il réduit l'écart entre le calcul et la mesure, excepté au point de vol 1634s où le couplage a de toute façon peu d'effet.

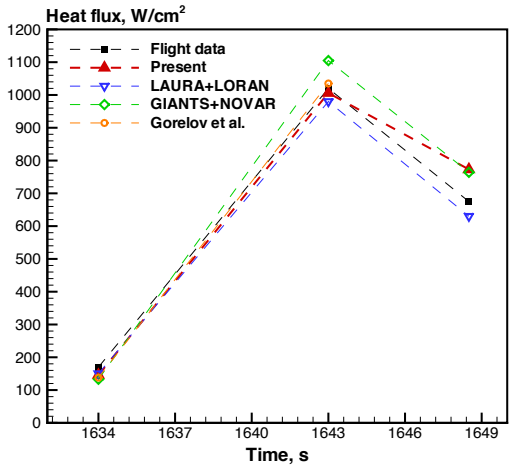
On complète cette étude de validation en comparant nos résultats aux résultats numériques publiés dans la littérature [75, 142, 71, 188]. Le lecteur est invité à se reporter à l'étude bibliographique présentée au chapitre 1 (§ 1.3) pour obtenir le détail des modélisations retenues par les différents auteurs cités.

La comparaison porte sur le flux convectif et le flux radiatif absorbé (figure 6.13(a)), le flux total (figure 6.13(b)) et la luminance directionnelle incidente - dans la direction normale à la paroi - intégrée sur le domaine $2000 - 40000$Å (figure 6.13(c)), toutes ces grandeurs étant prises au point d'arrêt. On inclut également les résultats expérimentaux [55, 29] pour les grandeurs qui ont été mesurées. Les résultats sont également donnés dans le tableau 6.4.

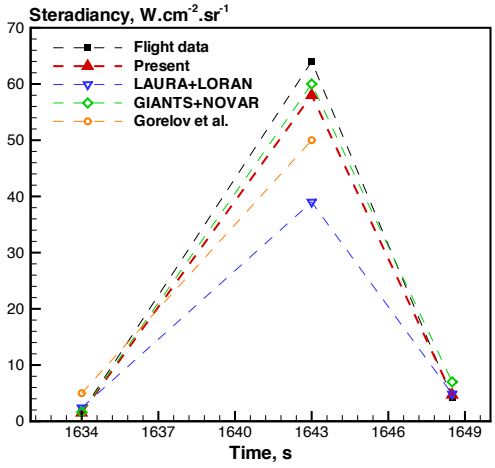
Nos résultats sont satisfaisants étant donnée la dispersion des résultats obtenus par les différents auteurs. Ils sont relativement proches de ceux obtenus avec la plateforme GIANTS/-NOVAR par Olynick *et al.* [142]. On note que la modélisation physico-chimique plus complète retenue dans le code LAURA et le calcul du peuplement des niveaux électroniques en déséquilibre par l'approche QSS utilisé dans le code LORAN n'ont pas permis à Greendyke et Hartung [75] d'obtenir un meilleur accord avec les mesures. De même, l'attention portée par Gorelov *et*



(a) **Flux convectif et flux radiatif absorbé par la paroi**



(b) **Flux total (convectif + radiatif absorbé)**



(c) **Luminance directionnelle incidente dans la direction normale à la paroi**

Fig. 6.13: Comparaison des résultats au point d'arrêt avec les mesures en vol [29] et/ou les résultats numériques de la littérature (LAURA+LORAN [75], GIANTS+NOVAR [142], Gorelov *et al.* [71], DSMC [188])

al. [71] à la modélisation des processus chimiques d'ionisation a permis aux auteurs d'obtenir une meilleure concordance de leurs résultats avec les mesures en vol par rapport à une approche classique comme celle de Park [153], mais ne donne pas de résultats plus satisfaisants que ceux que nous avons obtenus. Par ailleurs, l'approche DSMC utilisée par Taylor *et al.* [188], développée par Bird [17, 18] pour calculer les écoulements de gaz raréfié, n'est pas plus précise que la résolution des équations de Navier-Stokes qui suppose un régime continu.

Dans ce chapitre, nous avons développé une plateforme de calcul numérique permettant de coupler le champ hydrodynamique et le champ radiatif pour des applications de rentrée dans l'atmosphère terrestre.
Du point de vue de la modélisation, l'ionisation et le déséquilibre thermochimique du milieu sont pris en compte. Les propriétés radiatives du mélange gazeux sont calculées par une approche de type raie-par-raie. Le peuplement des niveaux d'énergie est supposé suivre des distributions de Boltzmann aux températures définies par le modèle multitempérature. Le champ de rayonnement est calculé à l'aide de la méthode des plans tangents. Localement, la méthode de lancer de rayons permet de calculer de manière plus précise le rayonnement incident en un point de la paroi. La comparaison entre les deux méthodes de résolution de l'équation de transfert radiatif montre que la méthode des plans tangents surévalue le flux radiatif de 12% à 20% au niveau du point d'arrêt.
Le champ radiatif est couplé avec le champ hydrodynamique en introduisant de manière explicite le terme de divergence du flux radiatif dans l'équation de bilan d'énergie totale. Le couplage a permis de simuler numériquement l'effet de "radiation cooling", qui conduit à réduire à la fois le flux convectif et le flux radiatif à la paroi.
La méthode a été appliquée au cas d'épreuve FIRE II. Nous avons obtenu des niveaux de luminance incidente et de flux radiatif satisfaisants par rapport aux mesures en vol. Cependant, en ce qui concerne le flux total à la paroi, l'écart entre les calculs et les mesures dépasse l'incertitude expérimentale. L'erreur est attribuée au calcul de l'échauffement convectif. Nous avons également comparé nos résultats aux résultats numériques publiés dans la littérature. L'erreur par rapport aux mesures est du même ordre de grandeur pour l'ensemble des contributions.
On ajoute que les calculs des champs hydrodynamiques pour le cas d'épreuve FIRE II sont relativement difficiles à passer, étant donné les conditions sévères d'écoulement - grande vitesse, faible densité. Ainsi, il a fallu modifier la température d'activation de certaines réactions chimiques et parfois simplifier le modèle multitempérature pour parvenir à converger les calculs. Par ailleurs, il a fallu porter une attention particulière à la construction des maillages afin d'éviter l'apparition de carbuncle. Ces difficultés numériques sont en partie liées au schéma numérique de Roe, d'où l'idée de développer un autre schéma numérique adapté aux écoulements faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique.

Chapitre 7

Développement d'un schéma de relaxation adapté aux écoulements faiblement ionisés

Dans ce chapitre, l'objectif est de développer et de valider un schéma de relaxation adapté au traitement des écoulements hypersoniques faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique. Le but est de s'affranchir des non-linéarités fortes qui rendent difficile la résolution numérique du système d'équations régissant ces écoulements. Pour cela, on cherche un système convectif relaxé compatible avec le système d'équations initial. Puis, on construit une procédure numérique de type prédiction-correction permettant de résoudre ce système relaxé. Enfin, on vérifie la validité du schéma de relaxation.

On doit les premiers travaux sur les schémas de relaxation à Lax [115], Harten *et al.* [85], Chen *et al.* [43], Jin et Xin [98] ou encore Coquel *et al.* [46]. Plus récemment, Chalons et Coquel [35] se sont intéressés à la capture numérique des solutions de choc fort visqueux pour des écoulements de fluides compressibles à grand nombre de Reynolds. Contrairement aux équations classiques de Navier-Stokes, le système à résoudre fait apparaître plusieurs lois de pression indépendantes. Dans ces conditions, le système s'écrit sous une forme non conservative. Par conséquent, les solutions approchées obtenues par les méthodes numériques classiques de séparation de flux ne correspondent pas aux solutions exactes. En effet, elles violent le principe d'entropie.

Chalons et Coquel [35] proposent une procédure numérique qui satisfait les lois entropiques. Il s'agit d'une stratégie de type prédiction-correction. La première étape a pour but d'approcher les solutions du système non conservatif. La seconde étape a pour but de corriger l'approximation afin de satisfaire les lois entropiques. Dans cette dernière, le problème à résoudre est un problème algébrique non linéaire. Pour éviter la résolution de problèmes non-linéaires, Chalons et Coquel ont introduit de nouvelles techniques de moyenne afin de remplacer le système non linéaire par des formules explicites. La procédure numérique est ainsi bien moins coûteuse en temps de calcul. De plus, elle répond à l'ensemble des critères de stabilité requis pour la résolution approchée de problèmes de Riemann.

Différents problèmes physiques sont modélisables par un système d'équations aux dérivées partielles semblable à celui traité par Chalons et Coquel [35]. On peut citer les modèles de

turbulence à deux lois de transport (modèles de type $k-\epsilon$) [16], les modèles de turbulence multiéchelles [33] ou encore les modèles multifluides introduits par Lagoutière [110].

Dans le cadre des écoulements hypersoniques faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique, la modélisation du déséquilibre thermique du gaz d'électrons par l'approche multitempérature conduit à un système qui présente des similarités avec celui traité par Chalons et Coquel [35]. D'une part, le système s'écrit naturellement sous forme non conservative. Cependant, en utilisant l'approche proposée par Coquel et Marmignon [52, 53, 54], il est possible d'écrire un système équivalent sous forme conservative. D'autre part, le système fait apparaître deux lois de pression indépendantes : l'une associée aux espèces lourdes, l'autre associée aux électrons libres. Cependant, la méthode développée par Chalons et Coquel nécessite un travail d'adaptation car elle n'a pas été construite pour des mélanges de gaz.

Dans ce chapitre, l'objectif est donc d'adapter et d'étendre la méthode proposée par Chalons et Coquel [35] aux gaz multiespèces multipressions afin de diposer d'une méthode de résolution numérique a priori plus robuste que le schéma de Roe et plus simple de mise en œuvre. Dans un premier temps, on introduit un système convectif relaxé compatible avec le système d'équations initial. Dans un deuxième temps, on construit une procédure numérique de type prédiction-correction permettant de résoudre ce système relaxé. La dernière étape consiste à valider ce schéma de relaxation. Pour cela, on choisit d'abord trois cas d'épreuve de type tube-à-choc. La validation repose sur la comparaison de la solution donnée par le schéma de relaxation avec la solution exacte obtenue à l'aide d'un schéma de Godunov [68, 74] (voir chapitre 2). On choisit ensuite un cas bidimensionnel pour lequel on possède une solution approchée par la linéarisation de type Roe développée au chapitre 5.

7.1 Identification d'un système relaxé compatible avec le système initial

Le système initial est le système non linéaire du premier ordre (2.63) que l'on rappelle ci-dessous, en l'écrivant dans une approche monodimensionnelle :

$$\partial_t \rho_s + \partial_x(\rho_s u) = 0 \tag{7.1a}$$
$$\partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + p + p_e) = 0 \tag{7.1b}$$
$$\partial_t \rho_m e_{v,m} + \partial_x(\rho_m e_{v,m} u) = 0 \tag{7.1c}$$
$$\partial_t \rho s_e + \partial_x(\rho s_e u) = 0 \tag{7.1d}$$
$$\partial_t \rho E + \partial_x((\rho E + p + p_e)u) = 0 \tag{7.1e}$$

On rappelle que les solutions faibles de ce système sont naturellement sélectionnées par le principe d'entropie (second principe de la thermodynamique). Ce principe se traduit par une inégalité de la forme :

$$\partial_t \rho f\left(\frac{p}{\rho^\gamma}\right) + \partial_x \rho f\left(\frac{p}{\rho^\gamma}\right) u \leq 0 \tag{7.2}$$

où la fonction $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est une fonction strictement décroissante.

On introduit dans le système (7.1a)-(7.1e) une perturbation singulière agissant sur la variable

non linéaire de pression totale $p + p_e$. Le système perturbé s'écrit :

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho_s + \partial_x(\rho_s u) &= 0 && \text{(7.3a)}\\
\partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + \Pi) &= 0 && \text{(7.3b)}\\
\partial_t \rho_m e_{v,m} + \partial_x(\rho_m e_{v,m} u) &= 0 && \text{(7.3c)}\\
\partial_t \rho s_e + \partial_x(\rho s_e u) &= 0 && \text{(7.3d)}\\
\partial_t \rho E + \partial_x((\rho E + \Pi) u) &= 0 && \text{(7.3e)}\\
\partial_t \rho \Pi + \partial_x((\rho \Pi + a^2) u) &= \lambda \rho (p + p_e - \Pi) && \text{(7.3f)}
\end{aligned}$$

La variable Π introduite dans le système perturbé est appelée variable de relaxation. Par définition du système, la variable de relaxation Π tend vers $p + p_e$ lorsque le paramètre de relaxation λ tend vers l'infini. Par conséquent, on retrouve le système (7.1a)-(7.1e) lorsque le paramètre de relaxation λ tend vers cette limite.

Le terme a est un paramètre strictement positif. Ce paramètre doit satisfaire certaines conditions pour garantir la stabilité de la méthode. Nous préciserons ces conditions lors de la description de la méthode de résolution numérique (§ 7.2).

Pour alléger les notations, on réécrit le système (7.3a)-(7.3f) sous la forme abrégée suivante :

$$\partial_t \mathbf{v} + \partial_x \mathcal{F}(\mathbf{v}) = \lambda \mathcal{R}(\mathbf{v}) \tag{7.4}$$

Dans cette expression, le flux $\mathcal{F}$ et le terme source $\mathcal{R}$ se définissent naturellement. L'espace des phases $\Omega_{\mathbf{v}} \subset \mathbb{R}^{N+1}$, où l'entier N désigne le nombre de variables conservatives du système, se définit par :

$$\Omega_{\mathbf{v}} = \left\{ \mathbf{v} =^{\mathrm{T}} \left(\{\rho_s\}_s, \rho u, \{\rho_m e_{v,m}\}_m, \rho s_e, \rho E, \rho \Pi \right),\ \rho_s > 0, u \in \mathbb{R}, p > 0, s_e > 0, e_{v,m} > 0 \right\} \tag{7.5}$$

Dans un premier temps, on s'intéresse au système sans terme source extrait de (7.4), soit au système suivant :

$$\partial_t \mathbf{v} + \partial_x \mathcal{F}(\mathbf{v}) = 0 \tag{7.6}$$

L'étude du problème de Riemann associé à ce système conduit à la proposition suivante :

Proposition 2 *Supposons $a > 0$. Alors, le système du premier ordre extrait de (7.4) est hyperbolique sur $\Omega_{\mathbf{v}}$ et admet les trois valeurs propres réelles distinctes suivantes :*

$$\lambda_1(\mathbf{v}) = u - a\tau = u - a/\rho, \quad \lambda_2(\mathbf{v}) = u, \quad \lambda_3(\mathbf{v}) = u + a\tau = u + a/\rho \tag{7.7}$$

La valeur propre $\lambda_2(\mathbf{v})$ a pour ordre de multiplicité $(N-2)$. De plus, chaque valeur propre est associée à un champ linéairement dégénéré.

La solution est alors systématiquement composée de quatre états constants $\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_L^*, \mathbf{v}_R^*$ et $\mathbf{v}_R$, séparés par trois discontinuités de contact se propageant aux vitesses caractéristiques :

$$\lambda(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_L^*) < \lambda(\mathbf{v}_L^*, \mathbf{v}_R^*) < \lambda(\mathbf{v}_R^*, \mathbf{v}_R)$$

Plus précisément, on a nécessairement pour les trois ondes les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
\lambda(\mathbf{v}_L, \mathbf{v}_L^*) &= \lambda_1(\mathbf{v}_L) = \lambda_1(\mathbf{v}_L^*) && \text{(7.8a)}\\
\lambda(\mathbf{v}_L^*, \mathbf{v}_R^*) &= \lambda_2(\mathbf{v}_L^*) = \lambda_2(\mathbf{v}_R^*) && \text{(7.8b)}\\
\lambda(\mathbf{v}_R^*, \mathbf{v}_R) &= \lambda_3(\mathbf{v}_R^*) = \lambda_3(\mathbf{v}_R) && \text{(7.8c)}
\end{aligned}$$

De plus, la dissipation entropique au travers des discontinuités de contact est nulle. Par conséquent, les relations de saut de Rankine-Hugoniot au travers de discontinuités admissibles permettent d'écrire le théorème suivant :

Théorème 1

Soient $\mathbf{v}_L$ *et* $\mathbf{v}_R$ *deux états constants dans l'espace des phases* $\Omega_{\mathbf{v}}$*. On définit l'état inital au temps* $t = 0$ *par :*

$$\mathbf{v}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{v}_L & si \quad x < 0 \\ \mathbf{v}_R & si \quad x > 0 \end{cases} \tag{7.9}$$

Supposons que le paramètre $a > 0$ *satisfasse la condition :*

$$\begin{gathered} \lambda_1(\mathbf{v}_L) = u_L - a\tau_L < u^\star < \lambda_3(\mathbf{v}_R) = u_R + a\tau_R \\ avec\ u^\star = \tfrac{1}{2}(u_L + u_R) + \tfrac{1}{2a}(\Pi_L - \Pi_R) \qquad et\ \tau = 1/\rho \end{gathered} \tag{7.10}$$

Alors la solution auto-similaire $\mathbf{v}_a(x,t;\mathbf{v}_L,\mathbf{v}_R) \equiv \mathbf{v}_a(x/t;\mathbf{v}_L,\mathbf{v}_R)$ *du problème de Cauchy (7.6) avec la donnée initale* v_0 *est composée de quatre états constants séparés par trois discontinuités de contact comme suit :*

$$\mathbf{v}_a(x/t;\mathbf{v}_L,\mathbf{v}_R) = \begin{cases} \mathbf{v}_L & si \quad \frac{x}{t} < \lambda_1(\mathbf{v}_L) \\ \mathbf{v}_L^* & si \quad \lambda_1(\mathbf{v}_L) < \frac{x}{t} < \lambda_2(\mathbf{v}_L^*) \\ \mathbf{v}_R^* & si \quad \lambda_2(\mathbf{v}_R^*) < \frac{x}{t} < \lambda_3(\mathbf{v}_R) \\ \mathbf{v}_R & si \quad \lambda_3(\mathbf{v}_R) < \frac{x}{t} \end{cases}$$

avec :

$$\lambda_2(\mathbf{v}_L^*) = \lambda_2(\mathbf{v}_R^*) = u^\star$$

En posant :

$$\begin{array}{l} u_L^* = u_R^* = u^* \\ \tau_L^* = \tau_L + (u^* - u_L)/a \\ \tau_R^* = \tau_R - (u^* - u_R)/a \\ (\rho_s)_L^* = (\rho_s)_L\, \tau_L/\tau_L^* \\ (\rho_s)_R^* = (\rho_s)_R\, \tau_R/\tau_R^* \\ \Pi^* = \Pi_L^* = \Pi_R^* = \frac{1}{2}(\Pi_L + \Pi_R) - \frac{a}{2}(u_R - u_L) \\ (e_{v,m})_L^* = (e_{v,m})_L \\ (e_{v,m})_R^* = (e_{v,m})_R \\ (s_e)_L^* = (s_e)_L \\ (s_e)_R^* = (s_e)_R \\ E_L^* = E_L + (\Pi_L u_L - \Pi^* u^*)/a \\ E_R^* = E_R - (\Pi_R u_R - \Pi^* u^*)/a \end{array}$$

les états intermédiaires se définissent par :

$$\mathbf{v}_L^* = \begin{pmatrix} \{(\rho_s)_L^*\}_s \\ (\rho u)_L^* \\ (\rho E)_L^* \\ (\rho s_e)_L^* \\ \{(\rho e_{v,m})_L^*\}_m \\ (\rho\Pi)_L^* \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{v}_R^* = \begin{pmatrix} \{(\rho_s)_R^*\}_s \\ (\rho u)_R^* \\ (\rho E)_R^* \\ (\rho s_e)_R^* \\ \{(\rho e_{v,m})_R^*\}_m \\ (\rho\Pi)_R^* \end{pmatrix}$$

De plus, les états $\mathbf{v}_L^*$ *et* $\mathbf{v}_R^*$ *sont des éléments de l'espace des phases* $\Omega_{\mathbf{v}}$*.*

Dans la notation $\mathbf{v}_a(x/t;\mathbf{v}_L,\mathbf{v}_R)$, l'indice a reflète la dépendance de la solution vis-à-vis du paramètre a. De plus, la condition (7.10) donne les vitesses caractéristiques dans la solution de Riemann, rangées dans l'ordre croissant.

La solution du problème de Riemann associé au système (7.6) est donc explicitement connue et donnée par le théorème 1, ce qui explique la relative simplicité de mise en œuvre du schéma de relaxation.

7.2 Construction d'une procédure numérique de résolution du système relaxé

Dans ce paragraphe, on construit un schéma de relaxation pour approcher les solutions faibles du problème de Cauchy (7.1a)-(7.2) avec la donnée initiale :

$$\mathbf{u}(x,0)=\mathbf{u}_0(x)$$

La procédure, de type prédiction-correction, est classique dans le cadre des méthodes de relaxation (voir par exemple Chalons [33]). Elle se décompose en deux étapes. La première étape consiste en une évolution en temps de la solution du système (7.1a)-(7.1e) dans lequel on fixe $\lambda=0$. La seconde étape consiste à projeter la solution obtenue sur l'état d'équilibre $\lambda=+\infty$. Avant de présenter en détail chacune de ces deux étapes, on pose tout d'abord quelques conventions de notation.

7.2.1 Notations

Soient Δx et Δt les pas constants de discrétisation spatiale et temporelle. Soit $(x_j)_{j\in\mathbb{Z}}$ une séquence de points équirépartis de $\mathbb{R}$ tels que $x_{j+1}-x_j=\Delta x$. Pour tout $j\in\mathbb{Z}$ et tout $n\in\mathbb{N}$, on introduit les notations :

$$x_{j+1/2}=x_j+\frac{\Delta x}{2},\quad t^n=n\Delta t$$

On considère la discrétisation suivante pour le domaine de calcul $\mathbb{R}_x\times\mathbb{R}_t^+$:

$$\mathbb{R}_x\times\mathbb{R}_t^+=\bigcup_{j\in\mathbb{Z}}\bigcup_{n\in\mathbb{N}}C_j^n,\quad C_j^n=[x_{j-1/2},x_{j+1/2}[\times[t^n,t^{n+1}[$$

Classiquement pour la méthode des volumes finis, la solution approchée $\mathbf{u}_{\Delta t,\Delta x}(x,t)$ du problème (7.1a)-(7.2) avec la donnée initiale $\mathbf{u}_0$ est recherchée comme une fonction constante par morceaux sur chaque sous-domaine C_j^n :

$$\mathbf{u}_{\Delta t,\Delta x}(x,t)=\mathbf{u}_j^n,\ (x,t)\in C_j^n$$

Par souci de complétude, on définit la donnée initiale sur chaque sous-domaine :

$$\mathbf{u}_j^0=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}}\mathbf{u}_0(x)dx,\quad j\in\mathbb{Z}$$

Par ailleurs, on définit également à partir de $\mathbf{u}_{\Delta t,\Delta x}$ une autre solution approchée constante par morceaux $\mathbf{v}_{\Delta t,\Delta x}$ en posant :

$$\mathbf{v}_{\Delta t,\Delta x}(x,t)=\mathbf{v}_j^n=\begin{pmatrix}\mathbf{u}_j^n\\(\rho\Pi)_j^n\end{pmatrix},\ (x,t)\in C_j^n$$

Cette solution vérifie la condition d'équilibre, c'est-à-dire :

$$(\rho\Pi)_j^n = (p + p_e)(\mathbf{u}_j^n)$$

Supposons connue la solution $\mathbf{u}_{\Delta t,\Delta x}(x, t^n)$ au temps t^n. Sont alors connus la pression totale $p + p_e$ et donc l'état de la variable de relaxation $\Pi(x, t^n)$. On précise maintenant chacune des deux étapes de l'algorithme permettant d'avancer la solution au temps suivant t^{n+1}.

7.2.2 Première étape : évolution en temps de la solution pour $\lambda = 0$ $(t^n \longrightarrow t^{n+1-})$

Dans cette étape, on résoud le système (7.6) avec la donnée initiale $\mathbf{v}_{\Delta t,\Delta x}(x, t^n)$ et pour les temps $t \in [0, \Delta t]$. La procédure n'est autre que la célèbre méthode de Godunov [68, 74]. Ainsi, on cherche à chaque interface de cellule $x_{j+1/2}$ la solution du problème de Riemann. Sous la condition CFL suivante :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max_{\mathbf{v}}(|\lambda_i(\mathbf{v})|, i = 1, 2, 3) < \frac{1}{2} \tag{7.11}$$

ces problèmes de Riemann n'interagissent pas. La solution est directement connue par application du théorème 1.

On note que le paramètre a est choisi localement en espace, c'est-à-dire qu'il peut prendre une valeur différente à chaque interface de cellules. Si $a_{j+1/2}$ correspond à la valeur prise par a pour le problème de Riemann posé à l'interface $x_{j+1/2}$, on a :

$$\mathbf{v}(x, t) = \mathbf{v}_{a_{j+1/2}}\left(\frac{x - x_{j+1/2}}{t}; \mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n\right), \ (x, t) \in [x_j, x_{j+1}]\times]0, \Delta t], \quad j \in \mathbb{Z}$$

Classiquement, on propose de retourner une fonction constante par morceaux dans l'intervalle $x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ à l'aide d'une projection L^2 :

$$\tilde{\mathbf{v}}(x, t) = \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{v}(x, t)dx, \quad (x, t) \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]\times]0, \Delta t], \ j \in \mathbb{Z}$$

La première étape est achevée en posant :

$$\mathbf{v}_j^{n+1-} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_j^{n+1-} \\ (\rho\Pi)_j^{n+1-} \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{v}}(x_j, \Delta t), \quad j \in \mathbb{Z} \tag{7.12}$$

La formule (7.12) peut être remaniée sous la forme conservative suivante :

$$\mathbf{v}_j^{n+1-} = \mathbf{v}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left[g(\mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n) - g(\mathbf{v}_{j-1}^n, \mathbf{v}_j^n)\right], \ j \in \mathbb{Z}, \quad n \geq 0 \tag{7.13}$$

où la fonction de flux numérique s'écrit :

$$g(\mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n) = \mathcal{F}(\mathbf{v}_{a_{j+1/2}}(0; \mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n)) \tag{7.14}$$

Rappelons que le flux numérique $\mathcal{F}$ est ici explicitement connu (théorème 1).

Avant de passer à la seconde étape de l'algorithme, signalons que le paramètre $a_{j+1/2}$ doit vérifier certaines conditions. En effet, chaque valeur $a_{j+1/2}$ doit être choisie avec soin, sous peine de voir apparaître des instabilités numériques au cours de la seconde étape de l'algorithme [114, 34].

Le paramètre a doit vérifier des conditions nommées conditions sub-caractéristiques ou conditions de Whitham. Ces conditions assurent la compatibilité du système relaxé avec le système initial en imposant que chaque vitesse caractéristique du modèle de relaxation (7.6) soit supérieure à la vitesse correspondante dans le système initial (7.1a)-(7.1e). D'après les propositions 1 et 2, la condition s'écrit : $a > \rho c$.

D'un point de vue numérique, on propose l'inégalité :

$$a_{j+1/2} > \max(\{\rho c\}(\mathbf{u}_j^n), \{\rho c\}(\mathbf{u}_{j+1}^n)) \tag{7.15}$$

A chaque interface, on peut a priori choisir une valeur quelconque du paramètre a dans le domaine décrit par la relation (7.15). Cependant, plus la valeur de a est importante, plus la dissipation numérique est forte. Par conséquent, on choisira une valeur aussi faible que possible tout en respectant la condition (7.15). On comprend alors l'intérêt de définir localement la valeur du paramètre $a_{j+1/2}$. En pratique, on pose :

$$a_{j+1/2} = \max(\{\rho c\}(\mathbf{u}_j^n), \{\rho c\}(\mathbf{u}_{j+1}^n)) + \epsilon \tag{7.16}$$

où le terme ϵ est fixé à 10^{-5} dans nos applications.

7.2.3 Seconde étape : projection de la solution sur l'état d'équilibre $\lambda = +\infty$ (relaxation) $(t^{n+1-} \to t^{n+1})$

On projette maintenant la solution $\mathbf{v}_{\Delta t,\Delta x}(x, t^{n+1-})$ obtenue au terme de l'étape précédente sur l'état d'équilibre correspondant à $\lambda = +\infty$. Plus précisément, on pose pour tout $j \in \mathbb{Z}$:

$$\mathbf{v}_j^{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_j^{n+1} \\ (\rho\Pi)_j^{n+1} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^{n+1-} \quad \text{et} \quad (\rho\Pi)_j^{n+1} = (p + p_e)(\mathbf{u}_j^{n+1}) \tag{7.17}$$

Une telle opération peut être vue comme un moyen approché mais efficace de faire tendre $\mathbf{v}_{\Delta t,\Delta x}(x, t^{n+1-})$ vers la solution du système à l'équilibre (7.1a)-(7.1e). En effet, dans le système de relaxation, l'énergie n'est pas forcément égale à l'énergie du système original. Cependant, Chalons [33] a démontré que dans ce type de problème, les deux énergies sont semblables. Par conséquent, si les deux étapes de résolution sont nécessaires d'un point de vue théorique, elles sont fondues en une seule étape au moment de l'implémentation, ce qui rend la méthode très simple de mise en œuvre.

Ainsi, l'avancement défini par la formule (7.17) est équivalent à la résolution du système d'équations différentielles ordinaires suivant, avec $\lambda = +\infty$:

$$\begin{cases} \partial_t \rho_s = 0 \\ \partial_t(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho E) = 0 \\ \partial_t(\rho s_e) = 0, \\ \partial_t(\rho_m e_{v,m}) = 0 \\ \partial_t(\rho\Pi) = \lambda\rho(p + p_e - \Pi) \end{cases} \tag{7.18}$$

L'algorithme complet peut être compris comme une stratégie de résolution de la partie convective du système (7.4) à laquelle on ajoute ensuite la contribution liée au terme source dans le régime $\lambda \to \infty$.

Finalement, la solution approchée $\mathbf{u}_{\Delta t,\Delta x}$ s'obtient par la relation suivante, consistante avec la méthode des volumes finis :

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(f(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n) - f(\mathbf{u}_{j-1}^n, \mathbf{u}_j^n)), \quad j \in \mathbb{Z}, \quad n \geq 0$$

Le flux numérique $f(\mathbf{u}_j^n, \mathbf{u}_{j+1}^n)$ est donné par les N premières composantes de la fonction numérique de flux $g(\mathbf{v}_j^n, \mathbf{v}_{j+1}^n)$.

7.3 Validation du schéma de relaxation par expériences numériques

7.3.1 Validation sur des cas d'épreuves de type tube à choc

Le mélange gazeux considéré se compose de trois espèces : les atomes d'azote N, les ions correspondants N^+ et les électrons. On considère trois cas d'épreuves de type tube à choc, choisis de manière à obtenir différents types d'onde. Pour chaque cas, la description des états gauche et droit initiaux est donnée dans le tableau 7.1. Seule la fraction massique des atomes d'azote est nécessaire pour définir la composition du mélange. Les fractions massiques des autres composants s'obtiennent à l'aide de la relation d'électroneutralité locale :

$$y_{N^+} = y_e \tag{7.19}$$

et de l'égalité :

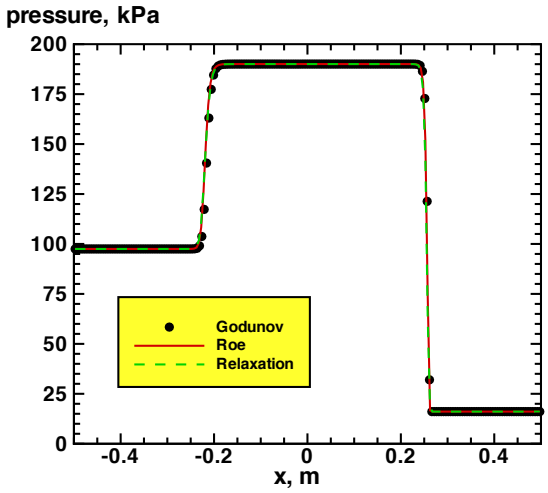
$$\sum_{s \neq e} y_s \; + \; y_e \; = \; 1 \tag{7.20}$$

Les résultats sont présentés sur les figures 7.1, 7.2 et 7.3 au temps physique $t = 0,212ms$. Pour chaque cas d'épreuve, on présente la pression des espèces lourdes, la pression des électrons et la pression totale $p + p_e$. On compare les distributions obtenues avec un solveur de Godunov [68, 74], le schéma de Roe décrit dans le chapitre 5 et le schéma de relaxation.

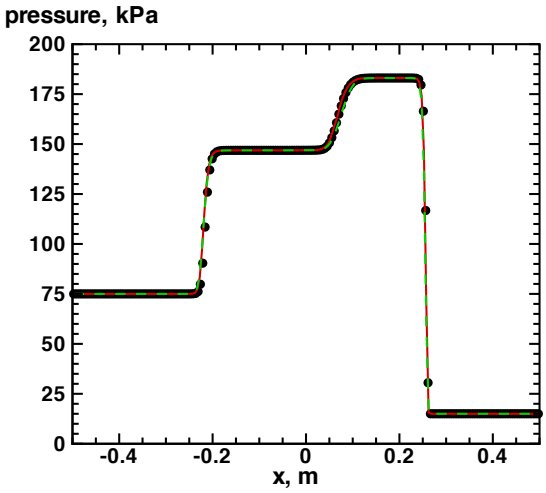
Les résultats montrent un bon accord entre la solution obtenue par la méthode de relaxation et la solution exacte. On note cependant un léger écart dans la région de l'onde 2 (discontinuité de contact) pour la pression des espèces lourdes et la pression des électrons. Comme attendu d'après les propriétés mathématiques du système, la variable $p + p_e$ est constante au travers de la discontinuité de contact.

Tab. 7.1: Définition des cas d'épreuve de type tube à choc

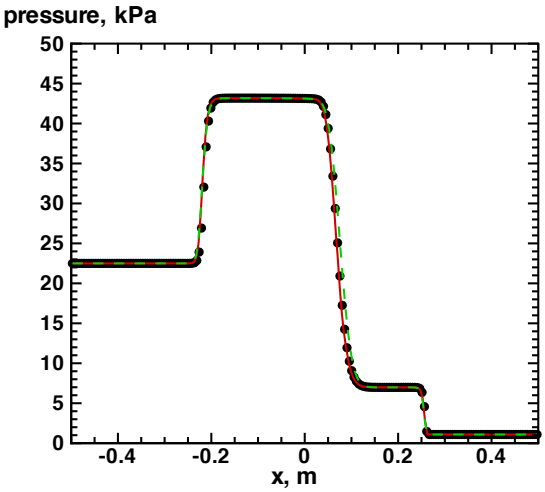
	Cas d'épreuve A		Cas d'épreuve B		Cas d'épreuve C	
	Etat gauche	Etat droit	Etat gauche	Etat droit	Etat gauche	Etat droit
u, m/s	1500	-2000	2200	0	0	-1500
p, Pa	$7,5 \cdot 10^4$	$1,5 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^5$	$6,5 \cdot 10^3$
T, K	4000	1378	780	4742	2452	346
T_e, K	6000	1000	2000	8300	8000	300
y_N	0,7999998	0,8999998	0,7999999	0,8989998	0,8998999	0,7989998



(a) **Pression totale** $(p + p_e)$

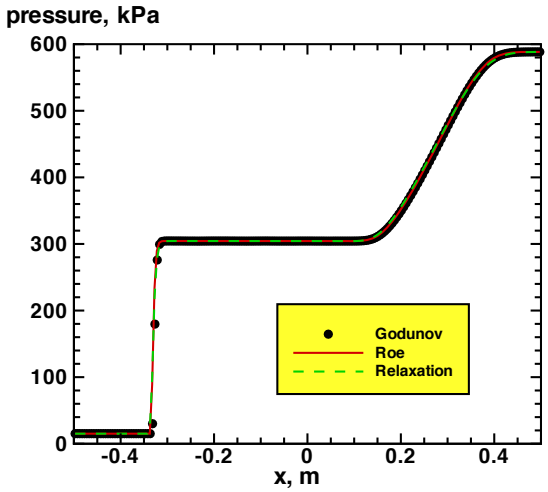


(b) **Pression des espèces lourdes**

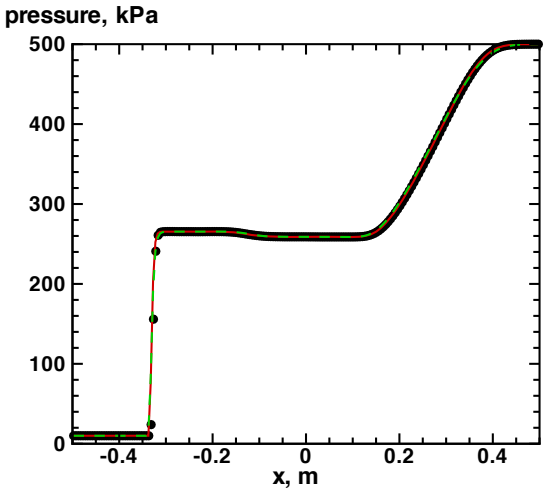


(c) **Pression du gaz d'électrons**

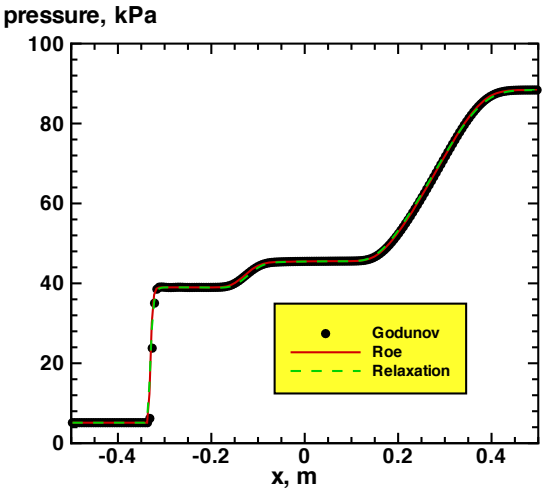
Fig. 7.1: Distributions de pression - Cas d'épreuve A



(a) **Pression totale** ($p + p_e$)

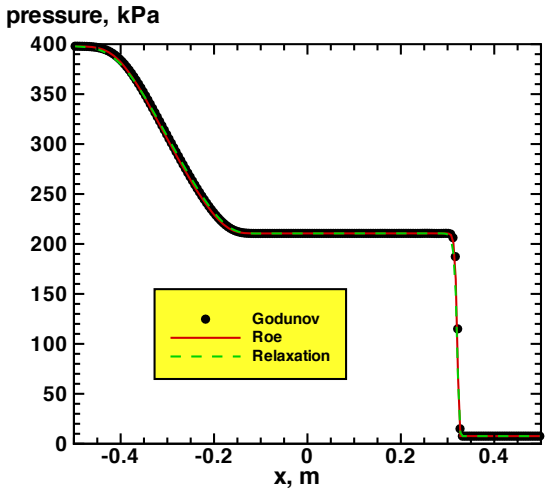


(b) **Pression des espèces lourdes**

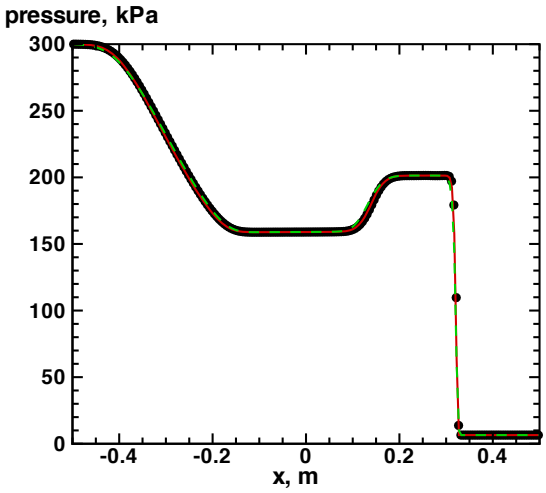


(c) **Pression du gaz d'électrons**

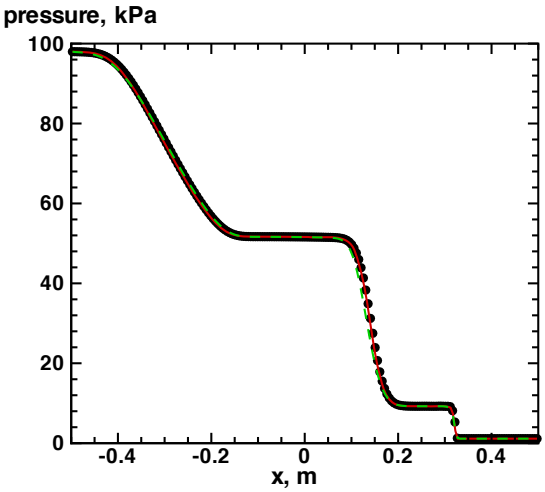
Fig. 7.2: Distributions de pression - Cas d'épreuve B



(a) **Pression totale** $(p + p_e)$



(b) **Pression des espèces lourdes**



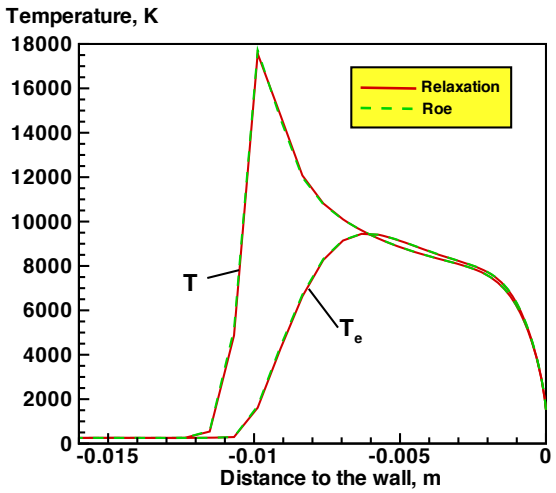
(c) **Pression du gaz d'électrons**

Fig. 7.3: Distributions de pression - Cas d'épreuve C

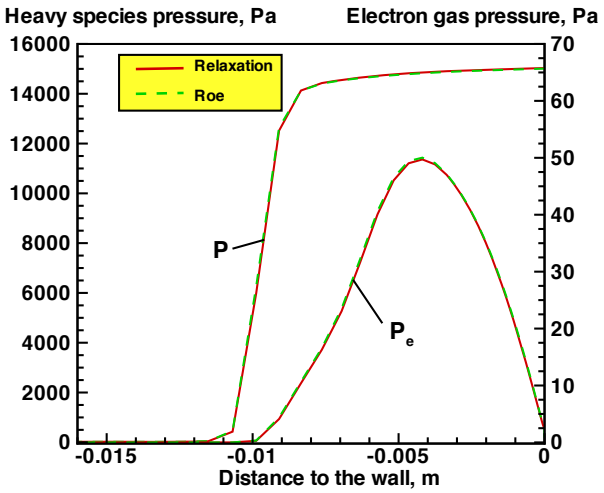
7.3.2 Validation sur le cas d'épreuve RAM-C II

La description de l'expérience RAM-C II [166, 56] est donnée dans le paragraphe 5.3.2. On se place dans les conditions de l'altitude $61km$. On utilise le modèle de cinétique chimique de Dunn et Kang [62] et le maillage 52×52. On rappelle que la construction de la matrice implicite liée aux flux convectifs repose sur la méthode de van Leer [120] au premier ordre. D'autre part, le temps de calcul avec le schéma de relaxation est comparable à celui avec le schéma de Roe.

La figure 7.4 compare les distributions de température et de pression pour les espèces lourdes et le gaz d'électrons libres, le long de la ligne d'arrêt, obtenues à l'aide du schéma de Roe et du schéma de relaxation. Les résultats sont en bon accord.



(a) **Températures des espèces lourdes et des électrons**



(b) **Pressions des espèces lourdes et des électrons**

Fig. 7.4: Distributions le long de la ligne d'arrêt - RAM-C II

Dans ce chapitre, nous avons développé et validé un schéma de relaxation adapté au traitement des écoulements hypersoniques faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique. Le schéma est relativement simple de mise en œuvre par rapport au schéma de Roe utilisé précédemment. Il ne viole par le principe d'entropie et ne nécessite pas d'ajouter artificiellement de la dissipation numérique, par l'intermédiaire de la correction de Harten par exemple. Par ailleurs, dans notre cadre d'étude, la procédure théorique en deux étapes - de prédiction puis de correction - est ramenée à une seule étape au moment de l'implémentation. La solution du problème de Riemann associé au système relaxé est explicitement connue.

Conclusion et perspectives

Au terme de ce travail de thèse, les quatre apports principaux de l'étude, répondant aux objectifs initialement fixés, sont les suivants.

Grâce au développement d'une plateforme de simulation des écoulements de rentrée martienne prenant en compte le rayonnement du gaz, on a confirmé le fait que pour une mission d'aérocapture caractéristique de la mission Mars Sample Return, les processus radiatifs participent de manière importante, voire prépondérante, à l'échauffement des parois au niveau de l'arrière-corps du véhicule. Ainsi, il n'est pas permis de négliger ce phénomène dans le dimensionnement des systèmes de protection thermique, sous peine de dommages sur la charge utile ou même de perte de la mission.

Au niveau de la modélisation, le modèle de propriétés radiatives est un modèle statistique à bandes étroites prenant en compte le rayonnement des molécules CO et CO_2 dans la plage infrarouge du spectre. Les transferts radiatifs sont résolus à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo. Les interactions entre le champ hydrodynamique et le champ de rayonnement sont modélisées par une approche faiblement couplée dans laquelle la puissance radiative apparaît comme terme source de l'équation de bilan d'énergie totale. L'étude a montré que pour le type d'écoulement traité, ces interactions sont très faibles. Par conséquent, un calcul découplé s'avère suffisant pour estimer les flux convectif et radiatif à la paroi du véhicule.

Concernant la prise en compte des phénomènes d'ionisation dans les écoulements de rentrée, nous avons étendu l'approche proposée par Coquel et Marmignon [53, 54, 124] aux écoulements contenant plusieurs espèces ionisées et pour des vitesses allant jusqu'à $11km/s$. Cet ordre de grandeur est caractéristique d'un retour de mission d'exploration martienne. L'approche a permis de résoudre le problème sous la forme d'un système de lois conservatives plutôt que sous la forme non conservative classiquement utilisée. La méthode garantit ainsi une représentation satisfaisante des relations de saut à la traversée de l'onde de choc.

Le déséquilibre thermique du milieu est traité par l'approche multitempérature (T,T_{v,N_2}, T_{v,O_2},T_e). Les flux convectifs sont calculés par une méthode de linéarisation de type Roe.

L'étude a mis en évidence les phénomènes physico-chimiques les plus influents sur le champ hydrodynamique, notamment sur la prédiction du flux de chaleur : il s'agit de la cinétique chimique et de la condition de catalycité de paroi. Changer les modélisations associées à ces deux phénomènes peut faire varier du simple au double le flux convectif par exemple dans le cas de l'écoulement autour de la sonde RAM-C II.

Cependant, la méthode ne permet pas de prendre en compte la conduction thermique au sein du gaz d'électrons libres. Une quantification a posteriori de ce terme a montré que s'il ne devrait pas modifier fortement l'échauffement pariétal, il pourrait influer sur le champ de température des électrons et de densité des espèces ionisées et des électrons. Néanmoins, les résultats obtenus sur trois cas d'épreuve sont en bon accord avec les données expérimentales et les résultats numériques de la littérature.

Le troisième apport principal concerne le développement d'une plateforme de simulation des écoulements de rentrée terrestre à grande vitesse ($V \simeq 11km/s$) prenant en compte l'ionisation et le rayonnement du gaz.

Les propriétés radiatives du gaz sont calculées par une approche de type raie-par-raie permettant une description relativement fine des spectres d'émission/absorption. Suivant les conditions d'écoulement, le déséquilibre thermique est modélisé par l'approche multitempérature (T,T_{v,N_2}, T_{v,O_2},T_e) ou l'approche simplifiée (T,T_e). Pour le calcul des propriétés radiatives, le peuplement des niveaux électroniques est supposé suivre un équilibre de Boltzmann à la température des électrons T_e. Les transferts radiatifs sont résolus à l'aide de la méthode approchée des plans tangents. Les interactions entre les champs hydrodynamique et radiatif sont modélisées par une approche faiblement couplée dans laquelle la puissance radiative est introduite comme terme source dans l'équation de bilan d'énergie totale. Les autres interactions - influence sur l'énergie des modes internes ou sur le déséquilibre du peuplement des niveaux, par exemple - ont été négligées.

La méthode a été appliquée à l'écoulement autour de la sonde FIRE II. La comparaison des résultats avec les mesures en vol et les résultats numériques de la littérature a permis de valider partiellement l'approche utilisée. En effet, la méthode des plans tangents est valable dans la région d'arrêt mais surestime grandement (jusqu'à 100%) le flux radiatif lorsqu'on s'éloigne de cette zone. Au contraire, l'utilisation locale d'une méthode de calcul des transferts radiatifs plus précise - de type lancer de rayons - conduit à des grandeurs radiatives en bon accord avec les mesures en vol.

D'autre part, on a enregistré des écarts supérieurs à l'incertitude de mesure sur la prédiction de l'échauffement pariétal. L'erreur a été attribuée au traitement du champ hydrodynamique. Le peu de données expérimentales dont on dipose n'a pas permis de déterminer plus précisément l'origine de l'erreur. Les origines possibles sont par exemple le modèle de cinétique chimique, la condition de catalycité de paroi, le modèle de diffusion ...

Par ailleurs, le couplage des champs hydrodynamique et radiatif a permis d'améliorer légèrement l'accord entre les résultats numériques et les mesures en vol. Lors du couplage, sous l'effet du "radiation cooling", le flux conductif diminue jusqu'à 17% tandis que le flux radiatif diminue de 2% à 6%.

Enfin, on a adapté un schéma de relaxation aux écoulements ionisés en déséquilibre thermochimique. Ce schéma présente l'avantage, par rapport au schéma de Roe proposé par Coquel et Marmignon [52, 53], d'être plus simple de mise en œuvre, et a priori plus robuste. Nous avons validé la méthode sur des cas d'épreuve de type tube à choc, puis sur le cas bidimensionnel RAM-C II.

L'ensemble de ces résultats permet d'envisager un certain nombre de perspectives, dont on dresse ci-dessous une liste non exhaustive.

Une première perspective d'étude concerne le calcul des propriétés radiatives dans la couche de choc d'un véhicule de rentrée en atmosphère martienne. Si l'étude menée dans le cadre de la thèse laisserait à penser que les mécanismes de l'infrarouge sont prépondérants au niveau de l'avant-corps, ce point reste à confirmer.

D'autre part, si tel était le cas, le modèle de propriétés radiatives MSBE devrait être étendu

aux conditions de température et de pression rencontrées dans la couche de choc, plus élevées par rapport à celles rencontrées dans l'écoulement de sillage.

Enfin, il conviendrait de s'assurer que l'hypothèse de l'équilibre thermique reste valide vis-à-vis du calcul des propriétés radiatives du gaz.

Le second point est relatif à l'hypothèse d'une conductivité thermique des électrons négligeable. Il serait intéressant de prendre en compte ce terme sans pour autant perdre l'avantage de l'écriture d'un système sous forme conservative.

Une méthode pourrait consister à prédire le terme de conduction thermique des électrons, c'est-à-dire à estimer l'incrément - contributions explicite et implicite - lié à ce seul terme. Ceci reviendrait à résoudre l'équation :

$$\partial_t \rho_e e_e = \partial_{x_j} \left(\eta_e \partial_{x_j} T_e \right)$$

Ensuite, on résoudrait le système initial - sans le terme de conduction thermique des électrons - puis, en fin de procédure, on ajouterait à l'incrément portant sur l'entropie électronique l'incrément du calcul prédictif.

Si, à l'issue d'un tel calcul, l'effet sur le champ hydrodynamique s'avérait suffisamment faible, on conforterait alors l'intérêt de l'approche proposée par Coquel et Marmignon [53, 54, 124].

Le troisième point concerne la méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif dans le cadre des écoulements de rentrée terrestre. Les travaux de thèse ont montré que l'approximation liée à l'approche des plans tangents n'est pas valable lorsqu'on s'éloigne de la région d'arrêt. Une perspective d'étude consisterait à adapter la méthode de Monte Carlo implémentée dans le solveur ASTRE au code spectroscopique PARADE.

La difficulté d'une telle association repose sur l'occupation mémoire et le temps de calcul. Pour quantifier l'occupation mémoire requise par un tel calcul, considérons des spectres d'émission et d'absorption discrétisés en 500000 points pour des maillages géométriques d'environ 3000 points. Si l'on travaille en double précision (pour laquelle un réel est codé sur huit octets), le stockage des propriétés radiatives occupe une mémoire de :

$$2 \times (500000 \times 3000) \times 8 = 24 Go$$

Un tel calcul est aujourd'hui difficilement envisageable sur un seul processeur. A titre d'exemple, sur la machine que nous avons utilisé, l'occupation mémoire est limitée à $7Go$ pour un calcul monoprocesseur.

L'idée serait donc de paralléliser le code ASTRE :

- Pour réduire le temps de calcul, chaque processeur procéderait à la construction d'une fraction identique du nombre total de chemins optiques.
- Pour distribuer l'occupation mémoire sur chaque processeur, les points spectraux seraient répartis en autant de groupes que de processeurs, chaque groupe contenant le même nombre de points.
- Enfin, pour maintenir une bonne précision statistique, il conviendrait de s'assurer que la puissance totale émise par le gaz est répartie de manière homogène sur chaque groupe de points spectraux. En effet, dans la méthode de Monte Carlo, on limite le nombre de chemins optiques tout en améliorant la précision statistique par le fait de privilégier, lors du tirage aléatoire des longueurs d'onde, celles pour lesquelles la puissance émise est élevée.

  Supposons que pour un groupe donné, la somme des puissances émises aux différentes

longueurs d'onde soit très faible. Dans ce cas, la puissance échangée à ces longueurs d'onde est quasiment nulle et les calculs effectués pour ce groupe sont sans intérêt d'un point de vue statistique. Par conséquent, l'incertitude du résultat augmente par rapport à un calcul où tous les chemins optiques sont pertinents.

Au contraire, si la puissance émise est la même pour chaque groupe, alors la précision du résultat est identique à celle obtenue à l'issu d'un calcul monoprocesseur.

On disposerait ainsi d'un modèle radiatif performant d'un point de vue numérique et précis d'un point de vue physique, composé d'un modèle de propriétés radiatives de type raie-par-raie et d'une méthode de calcul des transferts radiatifs générale, tridimensionnelle et dont l'erreur est d'origine purement statistique.

Le quatrième point concerne la modélisation du déséquilibre des écoulements de rentrée. Nous avons utilisé une approche multitempérature, qui suppose que le peuplement des modes d'énergie suit une distribution de Boltzmann. On peut tout d'abord s'interroger sur le domaine de validité de cette approche, en terme de vitesse et d'altitude. En effet, dans les hautes couches de l'atmosphère et lorsque la vitesse est très élevée, le peuplement des niveaux électroniques a tendance à s'écarter de l'équilibre de Boltzmann. D'autre part, l'approche multitempérature n'est pas adaptée à la représentation de l'ensemble des interactions entre le champ de rayonnement et le champ hydrodynamique - contribution radiative à l'énergie de vibration des molécules en déséquilibre thermique vibrationnel, dépeuplement des états électroniques excités, ...

Il conviendrait de vérifier la validité de l'approche multitempérature en la comparant à une approche de type niveau-par-niveau, qui s'affranchirait de l'hypothèse d'un équilibre de Boltzmann sur chaque mode d'énergie et permettrait de prendre en compte l'ensemble des interactions hydrodynamique/rayonnement.

Le cinquième et dernier point que l'on propose en tant que perspective d'étude est relatif au schéma de relaxation. On a montré la simplicité de mise en œuvre de ce schéma, qui constitue son attrait principal. Pour vérifier ses qualités de robustesse, jugées a priori supérieures à celles du schéma de Roe, l'étape suivante consisterait à construire la matrice d'implicitation liée aux flux convectifs issus de la procédure explicite de relaxation.

Annexes

Annexe A

Calculs tube à choc en formulation non conservative

Dans cette annexe, on présente des résultats obtenus par Coquel et Marmignon [50] à l'issue de calculs en configuration monodimensionnelle de type tube à choc, visant à montrer que la résolution d'un système en formulation non conservative peut conduire à des erreurs importantes sur la prédiction de l'amplitude des sauts et de la vitesse de propagation.

A.1 Contexte de l'étude : les systèmes hyperboliques

Le système étudié est le système convectif nonlinéaire :

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} = 0 \tag{A.1}$$

où la matrice $\mathcal{A}$ est supposée diagonalisable à valeurs propres réelles pour tout $\mathbf{u}$ dans l'espace des phases. Cette propriété fait que le système est hyperbolique. Par ailleurs, la nonlinéarité engendre des discontinuités, devant satisfaire les relations de saut. Ces relations de saut permettent de fermer le système (A.1). Leur caractérisation dépend étroitement de l'écriture du système sous forme conservative ou non conservative.

On rappelle que le système du premier ordre (A.1) est extrait du système convecto-diffusif en négligeant les phénomènes dissipatifs modélisés par le tenseur $\mathcal{D}$:

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathcal{A}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u} - \partial_x \left(\mathcal{D}(\mathbf{u})\partial_x \mathbf{u}\right) = 0 \tag{A.2}$$

Pour un système conservatif, les relations de saut, appelées conditions de Rankine-Hugoniot, sont indépendantes de la nature du tenseur de dissipation. Pour un système non-conservatif, elles dépendent entièrement du tenseur $\mathcal{D}$ sous-jacent modélisant les phénomènes dissipatifs.

A.2 Solution numérique des systèmes hyperboliques nonlinéaires

Coquel et Marmignon [50] se sont intéressés à l'approximation numérique des solutions faibles du système extrait (A.1), appliqué à la dynamique des gaz faiblement ionisés et fermé par la donnée explicite d'un ensemble de relations de saut. L'objectif était d'étudier la sensibilité

de méthodes numériques, éprouvées dans le contexte d'un gaz parfait, à la nature conservative ou non conservative du système.

Dans les hypothèses choisies, le système (A.1) appliqué à la dynamique des gaz faiblement ionisés est sous forme non conservative lorsqu'on écrit classiquement la conservation de l'énergie du gaz d'électrons, à cause de la fermeture du champ électrique (voir §1.2.1.3). Coquel et Marmignon [50] ont montré qu'il est préférable de résoudre numériquement un système conservatif équivalent plutôt que le système non conservatif fermé par la définition des ondes de choc. En effet, dans ce dernier cas, l'erreur mesurée sur l'amplitude des sauts et sur leur vitesse de propagation, croît de manière inacceptable avec la force des discontinuités mises en jeu, alors que cette même erreur reste satisfaisante dans le cas d'une méthode sous forme conservative.

Une telle différence de comportement s'explique de la manière suivante. Pour un système non conservatif, le choix du tenseur de dissipation $\mathcal{D}$ a une influence primordiale sur l'amplitude et la vitesse des ondes de choc admissibles, tandis que cette influence est nulle dans le cas où le système est conservatif. Or, toute méthode numérique possède intrinsèquement son propre tenseur de dissipation, qualifiée de dissipation numérique, permettant d'assurer en particulier sa robustesse. A priori, un tel tenseur n'a aucune raison d'être proportionnel au tenseur physique $\mathcal{D}$. Cette différence implique que les solutions onde de choc associées aux deux tenseurs ne sont généralement pas compatibles ; sauf précisément lorsque la méthode est conservative. Les résultats numériques présentés par Coquel et Marmignon [50] illustrent cette difficulté dans le cas de méthodes non conservatives, pourtant construites sur la connaissance explicite des relations de saut du problème exact (obtenues à partir d'un système hyperbolique conservatif équivalent, possédant les mêmes solutions régulières et dont les solutions ondes de choc sont compatibles avec les phénomènes dissipatifs considérés). Les erreurs enregistrées montrent a posteriori que le tenseur de diffusion numérique ainsi construit est incompatible avec le tenseur de dissipation physique ayant servi à qualifier les discontinuités.

Il faut souligner que les conséquences de la non compatibilité des tenseurs numérique et physique persiste lorsque les phénomènes de dissipation sont pris en compte. En effet, ces phénomènes ne dominent éventuellement la dissipation numérique que dans des régions très circonscrites, de type couche limite par exemple. Partout ailleurs, la dissipation numérique gouverne la dynamique des ondes et donc la structure du champ.

La suite du chapitre reprend les expériences numériques de Coquel et Marmignon [50] qui illustrent ces propos.

A.3 Lois de conservation et relations non conservatives

En adoptant l'hypothèse supplémentaire d'égalité des coefficients isentropiques γ et γ_e, et en considérant le tenseur $\mathcal{D}$ obtenu en supposant $\mu = \mu_e = 0$ et $\eta = \eta_e \neq 0$, Coquel et Marmignon [50] ont pu écrire la loi de conservation suivante :

$$\partial_t \rho \frac{p_e}{p} + \partial_x \rho \frac{p_e}{p} u = 0 \tag{A.3}$$

Cette loi est compatible avec le tenseur $\mathcal{D}$ choisi. Le vecteur inconnu associé au système de lois de conservation équivalent s'écrit alors :

$$\mathbf{u} = (\rho_s, \rho u, \rho E, \rho_m e_{v,m}, \rho p_e / p) \tag{A.4}$$

Les hypothèses conduisant au tenseur $\mathcal{D}$ considéré sont bien sûr irréalistes, mais elles permettent de déduire de manière aisée des systèmes non conservatifs fermés par des relations de saut

compatibles avec la donnée du tenseur diffusif. On considère pour ce faire les changements de variables admissibles suivants :

$$\mathbf{v} = (\rho_s, \rho u, \rho E, \rho_m e_{v,m}, p_e/p) \tag{A.5a}$$
$$\mathbf{w} = (\rho_s, \rho u, \rho E, \rho_m e_{v,m}, p_e) \tag{A.5b}$$
$$\mathbf{z} = (\rho_s, \rho u, \ p \ , \rho_m e_{v,m}, p_e) \tag{A.5c}$$

A chacun de ces changements de variables est associé un système non conservatif différent, respectivement obtenu en substituant aux lois de conservation relevant de $\mathbf{u}$ les lois d'évolution suivantes :

$$\partial_t \frac{p_e}{p} + u\partial_x \frac{p_e}{p} = 0 \tag{A.6a}$$
$$\partial_t p_e + (\gamma p_e \partial_x u)_\Phi + (u\partial_x p_e)_\Phi = 0 \tag{A.6b}$$
$$\begin{cases} \partial_t p \ + (\gamma p \partial_x u)_\Phi \ + (u\partial_x p)_\Phi \ = 0 \\ \partial_t p_e + (\gamma p_e \partial_x u)_\Phi + (u\partial_x p_e)_\Phi = 0 \end{cases} \tag{A.6c}$$

La famille de chemins Φ permettant de définir les produits non conservatifs pour le tenseur $\mathcal{D}$ donné [117] est ici caractérisé explicitement (famille des lignes droites).

A.4 Résultats numériques sur des applications tube à choc

On présente ici quelques résultats significatifs obtenus par Coquel et Marmignon [50] pour trois problèmes monodimensionnels de type tube à choc. Le mélange gazeux contient les quatre espèces N_2, N, N^+ et e^-. La température de vibration de l'azote moléculaire est supposée distincte de la température de translation des espèces lourdes. Les paramètres décrivant les états gauche et droit initiaux sont donnés dans le tableau A.1, sous l'hypothèse d'électroneutralité. On peut noter que les compositions chimiques retenues sont telles que l'azote moléculaire est ultra minoritaire. Ce choix permet d'assurer la quasi-égalité des rapports de chaleur spécifique γ et γ_e et donc d'envisager les systèmes de lois de conservation énoncés au paragraphe A.3.

Les solutions approchées sont comparées à la solution exacte du problème de Riemann (figurée en traits pleins sur les tracés présentés). Elles sont obtenues à l'aide des schémas de Godunov, Collela-Glaz et Osher-Solomon présentés dans [50]. Les calculs sont menés soit au premier ordre d'approximation, soit au second ordre en espace en adoptant une approche de type MUSCL.

Tab. A.1: Définition des cas d'épreuve

Cas	u	p	T	T_e	y_N	y_{N^+}
A	1500	7.5e4	4000	6000	0.7999998	0.2000001
	-2000	1.5e4	1378	1000	0.8999998	0.1000001
B	2200	1.0e4	780	2000	0.7999999	0.2000000
	0	5.0e5	4742	8300	0.8989998	0.1010000
C	0	3.0e5	2452	8000	0.8998999	0.1001000
	-1500	6.5e3	346	300	0.7989998	0.2010000

Toutes les figures publiées dans [50] ne sont pas reprises ici. Notamment, nous avons omis les figures dont les résultats faisaient redondance entre les cas d'épreuve A, B ou C. Nous soulignerons cependant dans la discussion les remarques qui, découlant des résultats pour un cas d'épreuve, s'appliquent également aux autres cas.

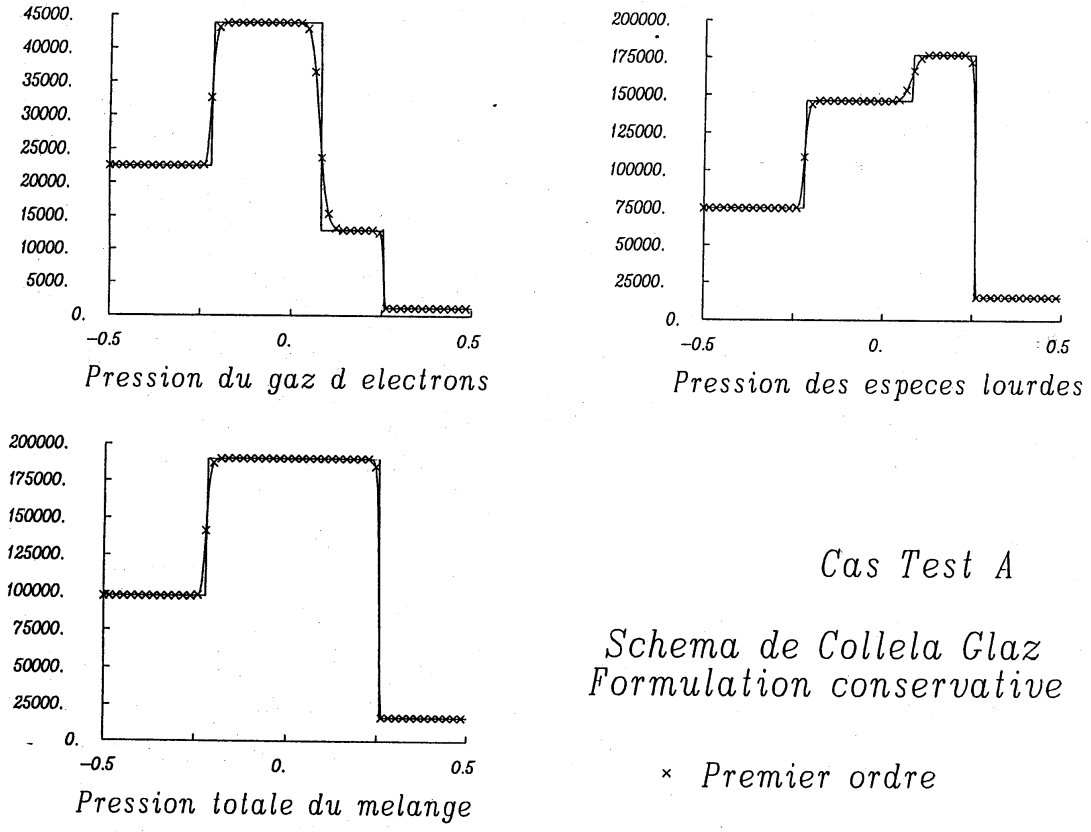
La figure A.1(a) montre les distributions de pressions partielles et totale prédites par le schéma de Collela-Glaz sous forme conservative pour le cas d'épreuve A. Les niveaux intermédiaires ainsi que les vitesses de propagation sont en très bon acord avec la solution exacte. Comme le montre la figure A.1(b), l'application de ce schéma à la formulation non conservative en p_e/p conduit au même accord (et quasiment à la même solution approchée). Ce bon accord a été constaté pour tous les cas test menés par les auteurs, quel que soit le schéma numérique utilisé au premier ordre (figures A.1(g), A.1(i) et A.1(j)).

En revanche, la méthode de Collela-Glaz en formulation non conservative en p_e (figure A.1(c)) conduit à sous-estimer de 25% l'amplitude du saut de pression des électrons à la traversée de la 3-onde de choc, la position de chacune des discontinuités étant toutefois correcte. La pression totale du mélange est parfaitement calculée, ce qui entraîne en contrepartie une légère surestimation de la pression des espèces lourdes. Lorsque la méthode de Collela-Glaz est utilisée en formulation non conservative sur les deux pressions partielles p et p_e (figure A.1(d)), ces pressions sont toutes deux sous-estimées. De plus, les vitesses de propagation numériquement prédites sont inférieures à leurs homologues exactes.

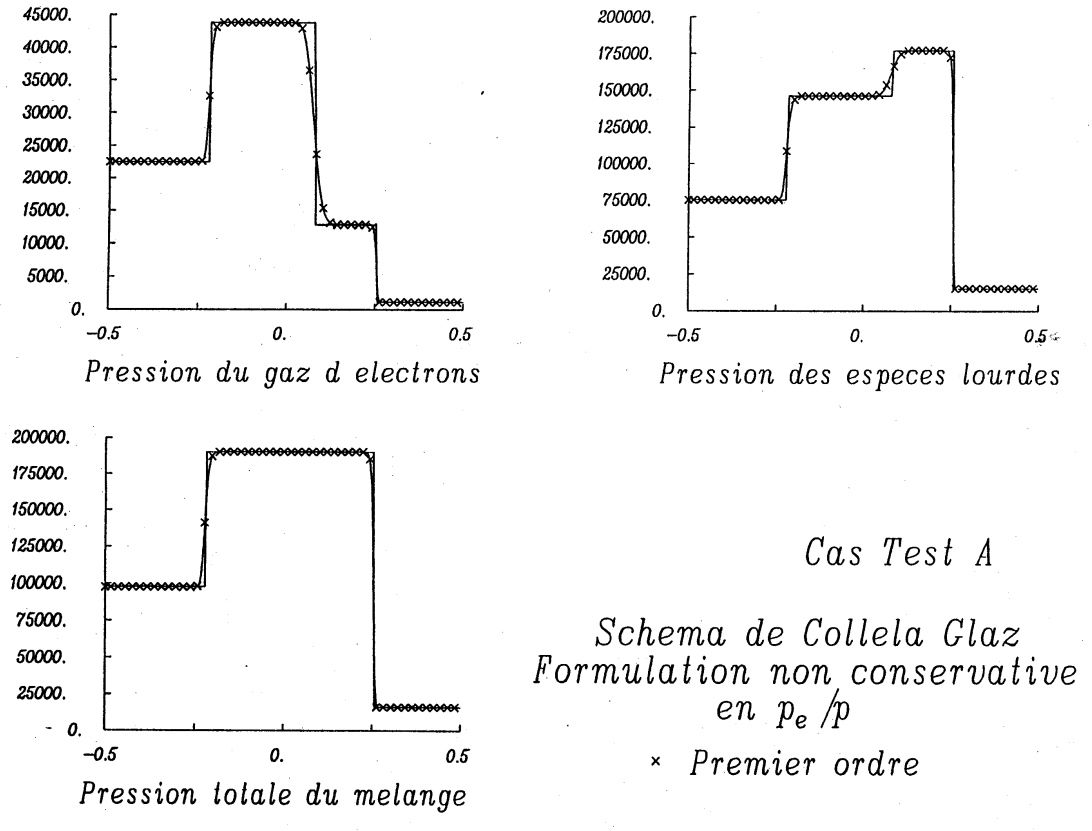
Les erreurs enregistrées sur les formulations non conservatives, présentées ici pour le cas d'épreuve A mais observées par les auteurs pour chacun des cas - parfois de manière encore plus spectaculaire - peuvent s'expliquer par une incompatibilité des opérations de projection, menées sur la pression p_e ou les pressions p et p_e, avec au moins l'une des lois de conservation sous-jacentes. Rappelons que, conformément à la loi (A.3), la grandeur p_e/p doit être partout conservée sauf à la traversée de la discontinuité de contact. La violation éventuelle de sa conservation indique le non respect de la condition de saut portant sur p_e. L'évolution du rapport p_e/p est tracée sur la figure A.1(e) pour chacune des formulations. La méthode de Collela-Glaz respecte la conservation de cette grandeur à la traversée des deux ondes de choc lorsqu'elle est utilisée en formulation conservative, et bien évidemment en formulation non conservative en p_e/p (1). Elle ne la respecte pas en formulation non conservative en p_e (2), mais la respecte en formulation non conservative en p et p_e (3). En revanche, dans ce dernier cas, la somme des projections de p et p_e n'est pas compatible avec la conservation de l'énergie totale (figure A.1(d)).

L'étude des figures A.1(f), A.1(g) et A.1(h) montre sur le cas d'épreuve B que la méthode d'Osher-Solomon en formulation non conservative en p_e/p conduit à des solutions approchées satisfaisantes en premier ordre d'approximation (figure A.1(g)), mais prédit une vitesse de propagation de la discontinuité de contact grossièrement incorrecte lorsqu'elle est portée au second ordre en espace (figure A.1(h)) alors que les niveaux de pressions partielles sont parfaitement restitués. Cette erreur n'est pas observée en fomulation conservative (figure A.1(f)).

L'utilisation de la méthode de Godunov appliquée au cas d'épreuve C conduit aux mêmes observations que précédemment (figures A.1(i) et A.1(j)).

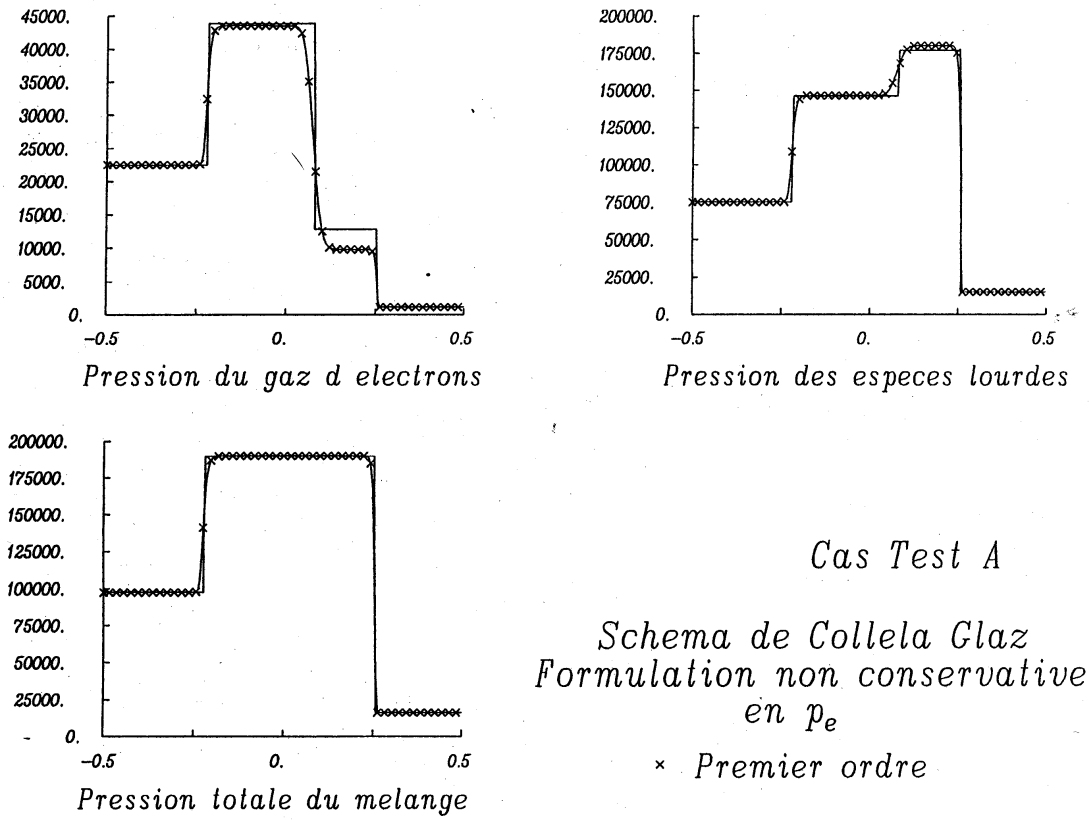


(a)

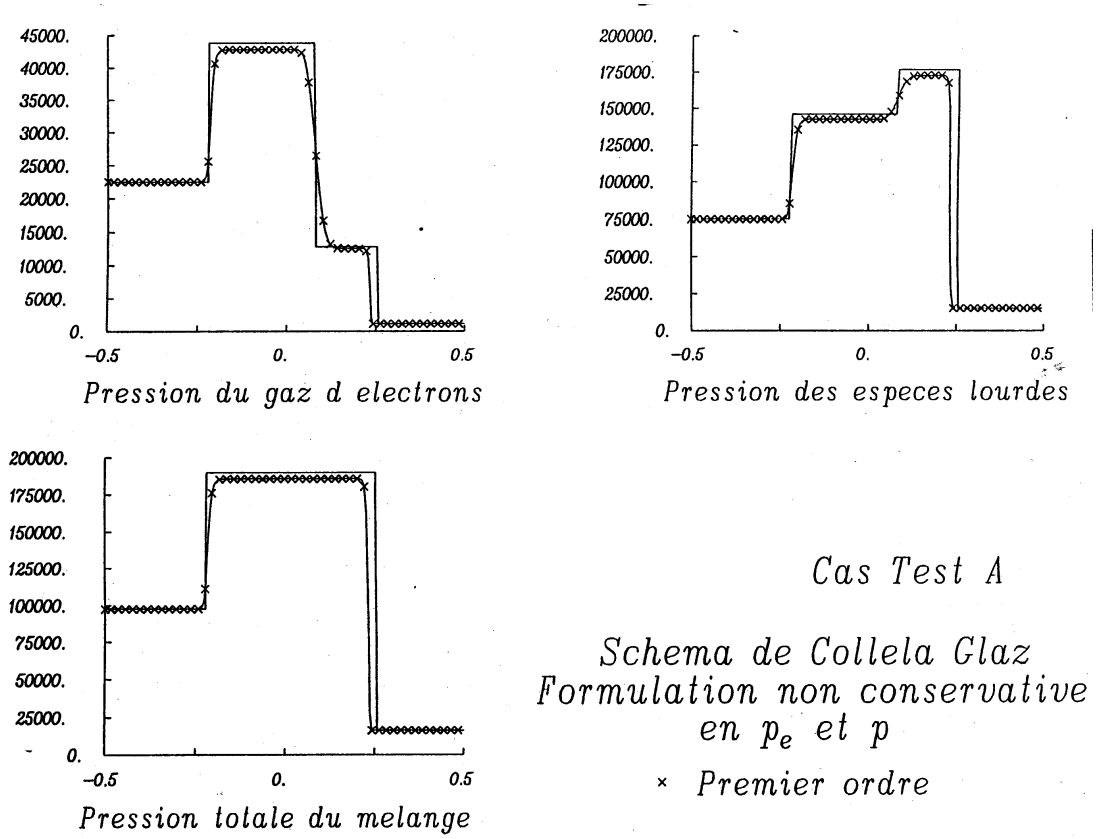


(b)

Fig. A.1: Résultats numériques pour des applications tube à choc (Coquel et Marmignon [50]), planche 1/5

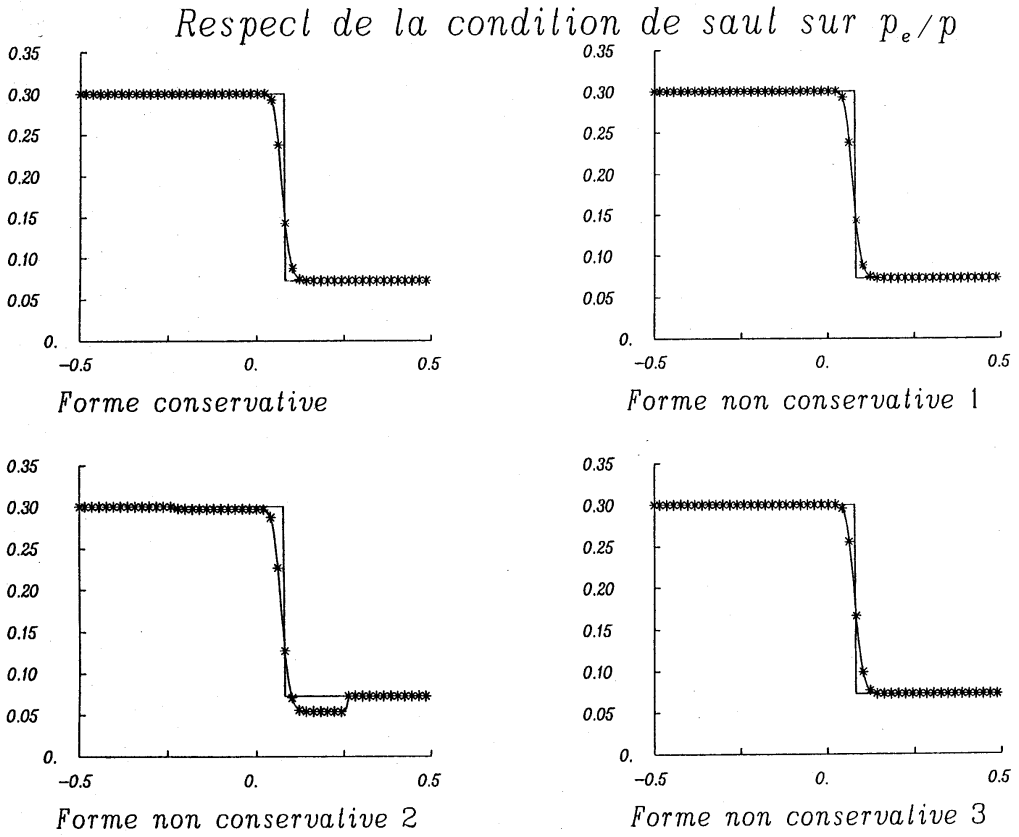


(c)

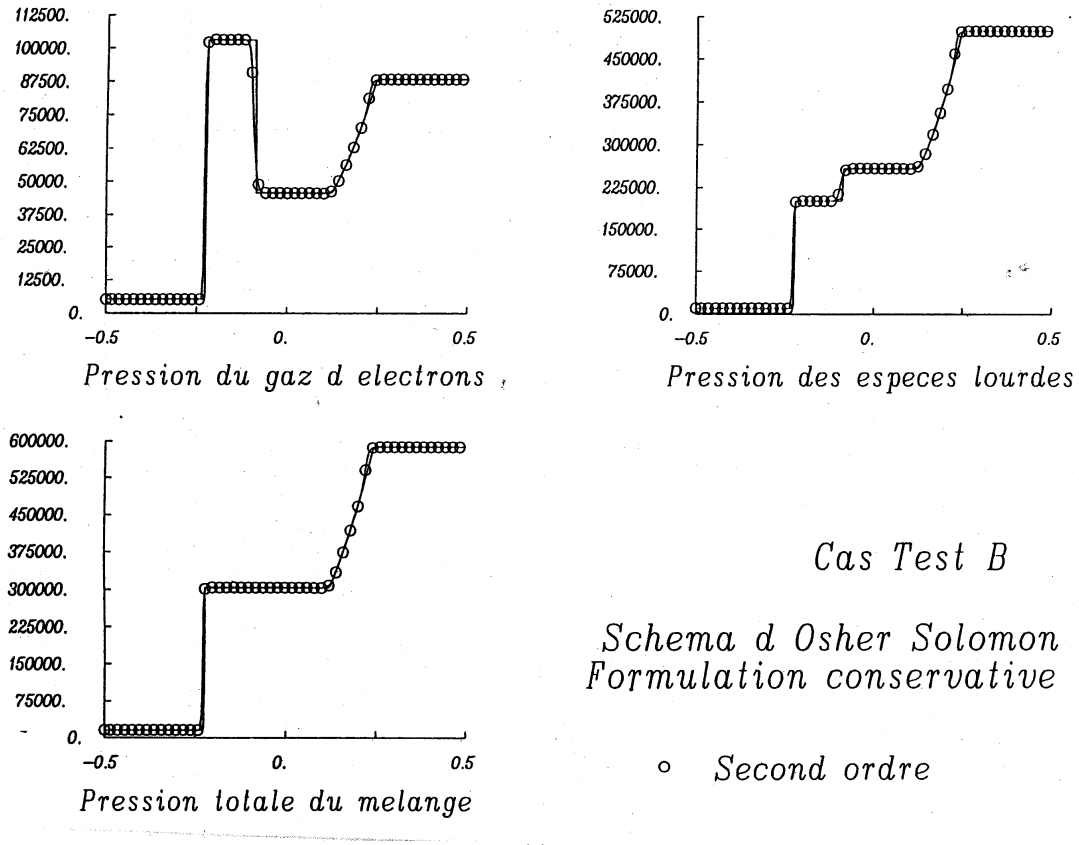


(d)

Fig. A.1: Résultats numériques pour des applications tube à choc (Coquel et Marmignon [50]), planche 2/5

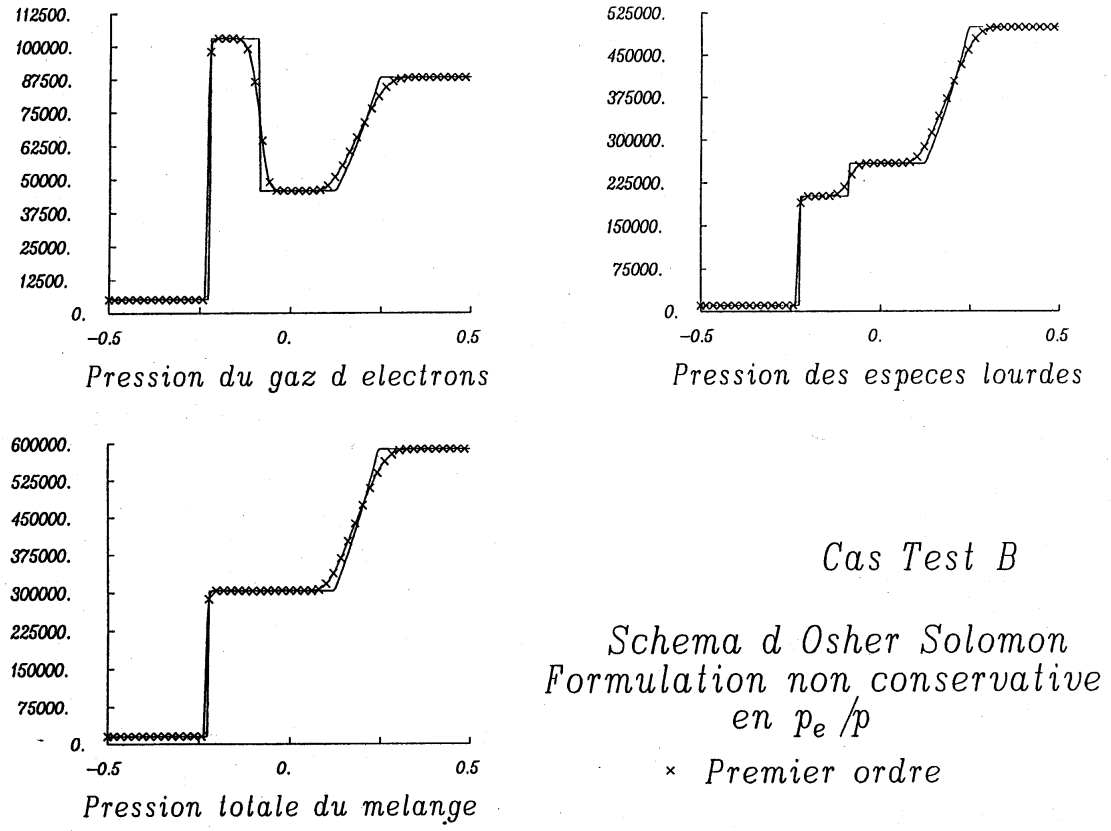


(e)

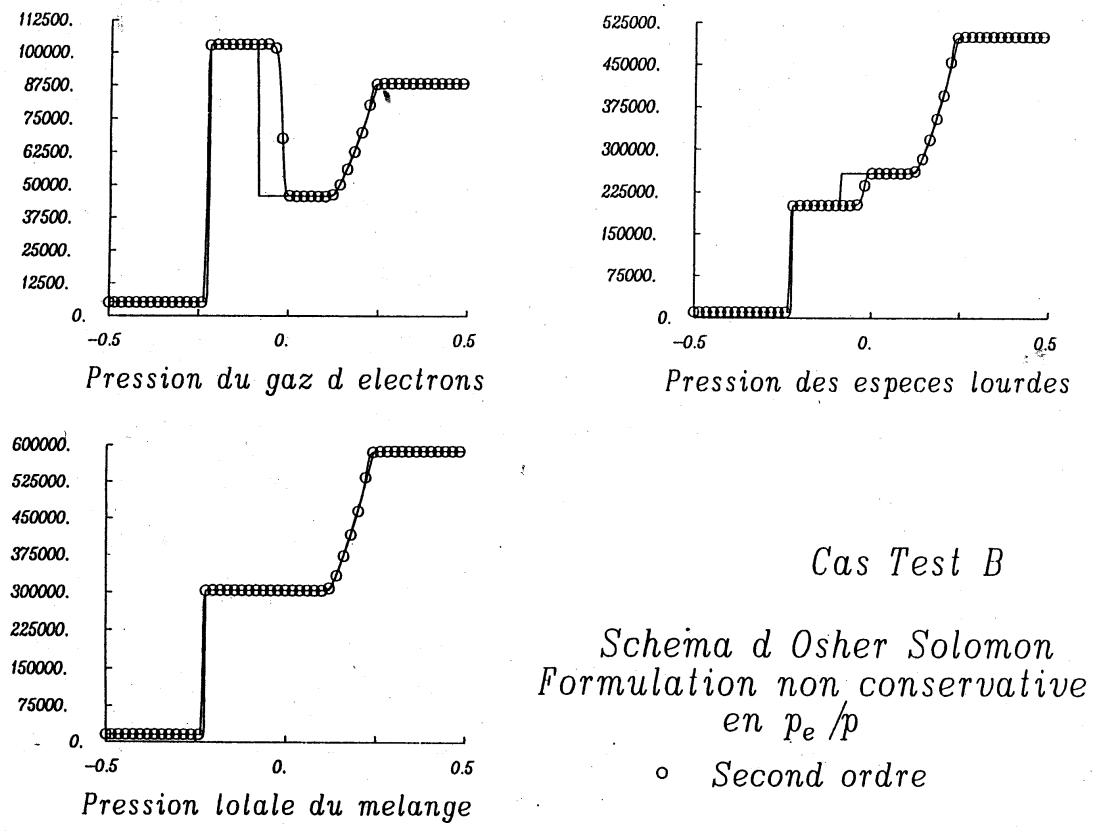


(f)

Fig. A.1: Résultats numériques pour des applications tube à choc (Coquel et Marmignon [50]), planche 3/5

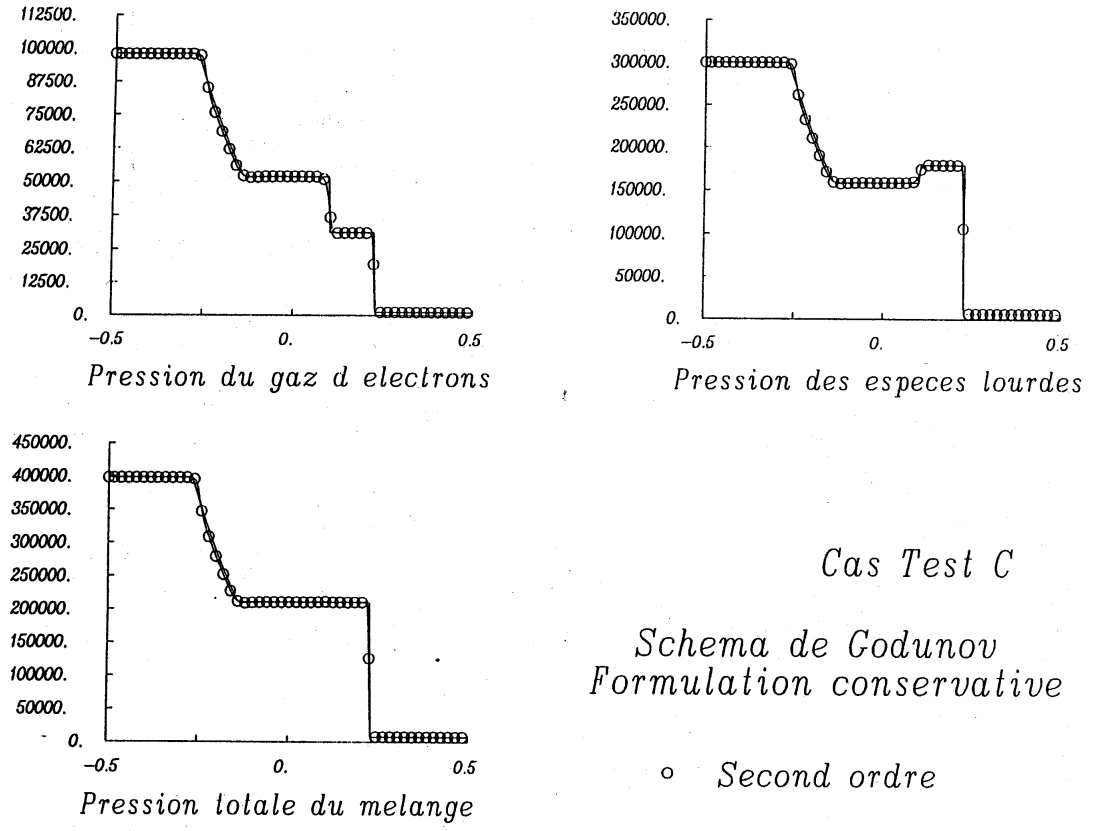


(g)

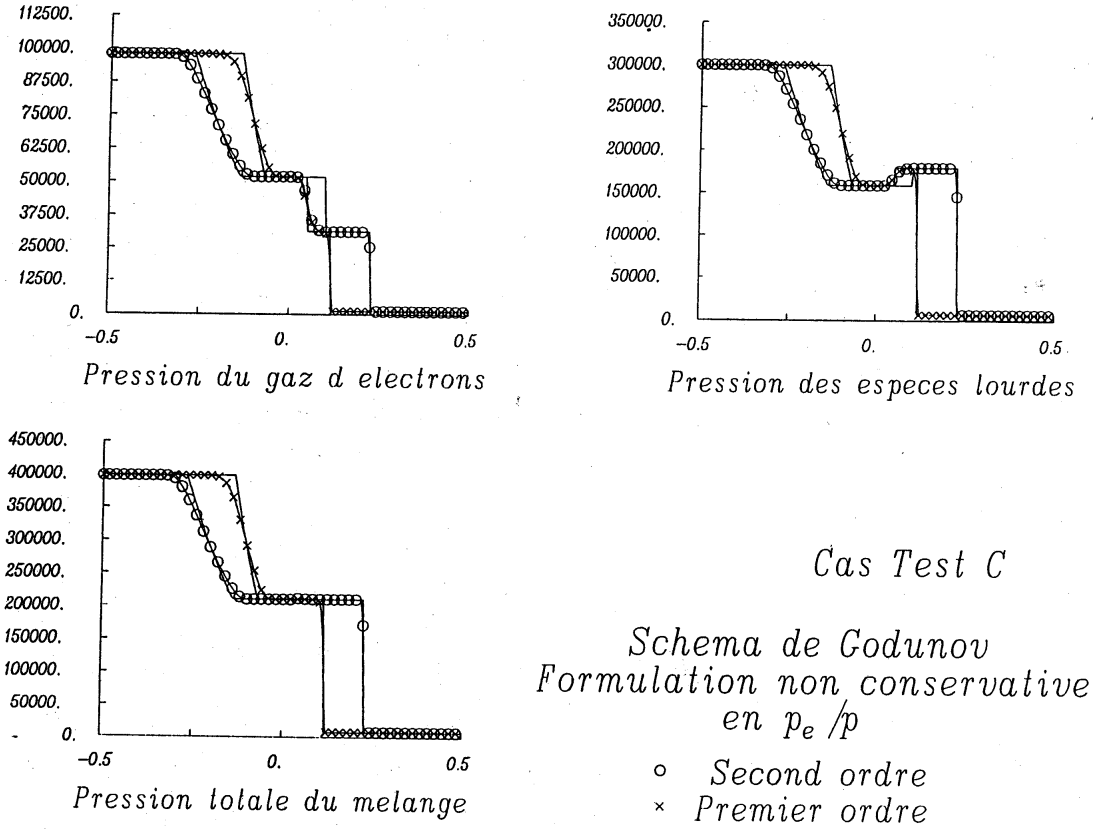


(h)

Fig. A.1: Résultats numériques pour des applications tube à choc (Coquel et Marmignon [50]), planche 4/5



(i)



(j)

Fig. A.1: Résultats numériques pour des applications tube à choc (Coquel et Marmignon [50]), planche 5/5

A.5 Bilan de l'étude

L'étude réalisée par Coquel et Marmignon [50] a mis clairement en évidence la sensibilité des méthodes d'approximation classiques à la formulation conservative ou non conservative d'un système hyperbolique. Il est donc préférable de résoudre, quand cela est possible, un système équivalent sous forme conservative plutôt que le système convectif non conservatif fermé par la donnée de ses relations de saut.

Annexe B

Obtention de l'équation de conservation de l'entropie du gaz d'électrons

Dans le cadre de la simulation numérique d'écoulements faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique, Coquel et Marmignon [51] ont défini la forme entropique suivante :

$$\rho s_e = \rho\, g\left(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\right) \tag{B.1}$$

où g est une fonction strictement croissante. Dans le cadre de leurs hypothèses, cette grandeur est gouvernée par la loi de conservation :

$$\partial_t \rho s_e + \partial_{x_j}(\rho s_e u_j) = (\gamma_e - 1)\frac{S_{e-t}}{y_e \rho^{\gamma_e - 1}}\, g'\left(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\right) \tag{B.2}$$

La démarche qui conduit à l'écriture de cette loi de conservation est rappelée ci-dessous. Afin de simplifier la présentation, seul le cas monodimensionnel est traité.

Le système convectif monodimensionnel avec terme source régissant la masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale du gaz d'électrons s'écrit :

$$\partial_t \rho y_e + \partial_x(\rho y_e u) = \dot{w}_e \tag{B.3a}$$

$$\partial_t \rho y_e u + \partial_x(\rho y_e u^2 + p_e) = n_e q_e \mathcal{E} + u\dot{w}_e + \dot{M}_{e,elas} \tag{B.3b}$$

$$\partial_t \rho y_e E_e + \partial_x(\rho y_e E_e + p_e)u = n_e q_e \mathcal{E} u + \dot{w}_e \left(\frac{p_e}{\rho y_e(\gamma_e - 1)} + \frac{u^2}{2}\right) + \dot{M}_{e,elas} u + S_{e-t} \tag{B.3c}$$

où :

$$\rho y_e E_e = \frac{p_e}{\gamma_e - 1} + \frac{1}{2}\rho y_e u^2 \tag{B.4}$$

Le terme $\mathcal{E}$ représente le champ électrique, le terme $\dot{M}_{e,elas}$ est le taux d'apport de quantité de mouvement pour le gaz d'électrons lors des collisions élastiques.

On écrit également les équations de bilan de masse et de quantité de mouvement pour le mélange :

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0 \tag{B.5a}$$

$$\partial_t \rho u + \partial_x(\rho u^2 + p + p_e) = 0 \tag{B.5b}$$

De ces deux équations, on déduit l'identité :

$$\rho(\partial_t u + u\partial_x u) = -\partial_x(p + p_e) \tag{B.6}$$

On cherche maintenant à écrire l'équation bilan de la pression des électrons.

Partant de la définition de l'énergie totale du gaz d'électrons (B.4), les dérivées temporelle et spatiale constituant le membre de gauche de la loi de conservation (B.3c) s'écrivent :

$$\partial_t\left(\frac{p_e}{\gamma_e - 1} + \frac{1}{2}\rho y_e u^2\right) = \frac{u^2}{2}\partial_t \rho y_e + \rho y_e u \partial_t u + \partial_t\left(\frac{p_e}{\gamma_e - 1}\right) \tag{B.7a}$$

$$\begin{aligned}\partial_x\left[\left(\frac{p_e}{\gamma_e - 1} + \frac{1}{2}\rho y_e u^2\right)u + p_e u\right] &= \rho y_e u\left(u\partial_x u + \frac{1}{\rho y_e}\partial_x\left(\frac{p_e}{\gamma_e - 1}\right)\right) + \partial_x(p_e u) \\ &+ \frac{u^2}{2}\partial_x \rho y_e u + \frac{p_e}{\gamma_e - 1}\partial_x u\end{aligned} \tag{B.7b}$$

En utilisant de plus l'identité (B.6) et la loi de conservation de la masse des électrons (B.3a), le membre de gauche de la loi (B.3c) s'écrit :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho y_e E_e + \partial_x(\rho y_e E_e + p_e)u &= \frac{u^2}{2}\dot{w}_e - y_e u\partial_x(p + p_e) + \frac{1}{\gamma_e - 1}\partial_t p_e \\ &+ \frac{u}{\gamma_e - 1}\partial_x p_e + \frac{p_e}{\gamma_e - 1}\partial_x u + \partial_x(p_e u)\end{aligned} \tag{B.8}$$

En utilisant l'équation (B.3b) pour éliminer le champ électrique du second membre de la loi de conservation (B.3c), ce dernier s'écrit :

$$\begin{aligned}n_e q_e \mathcal{E} u &+ \dot{w}_e\left(\frac{p_e}{\rho y_e(\gamma_e - 1)} + \frac{u^2}{2}\right) + \dot{M}_{e,elas}u + S_{e-t} \\ &= \Big(\partial_t \rho y_e u + \partial_x(\rho y_e u^2 + p_e)\Big)u + S_{e-t} + \dot{w}_e\left(\frac{p_e}{\rho y_e(\gamma_e - 1)} - \frac{u^2}{2}\right) \\ &= \Big(u\dot{w}_e - y_e\partial_x(p + p_e) + \partial_x p_e\Big)u + S_{e-t} + \dot{w}_e\left(\frac{p_e}{\rho y_e(\gamma_e - 1)} - \frac{u^2}{2}\right)\end{aligned} \tag{B.9}$$

On obtient alors la relation recherchée régissant la pression des électrons :

$$\partial_t p_e + \gamma_e p_e \partial_x u + u\partial_x p_e = (\gamma_e - 1)S_{e-t} + \frac{\dot{w}_e}{\rho y_e}p_e \tag{B.10}$$

On peut maintenant exprimer la loi de conservation gouvernant l'entropie du gaz d'électrons $s_e = \rho\, g\Big(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\Big)$. En effet, il suffit de noter que pour toute fonction $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$:

$$\partial_t f(\alpha) + u\partial_x f(\alpha) = f'(\alpha)(\partial_t \alpha + u\partial_x \alpha) \tag{B.11}$$

Ecrivons l'équation de bilan de masse volumique du mélange (B.5a) et des électrons (B.3a) sous la forme :

$$\partial_t \log \rho^{\gamma_e - 1} + (\gamma_e - 1)\partial_x u + u\partial_x \log \rho^{\gamma_e - 1} = 0 \tag{B.12}$$

$$\partial_t \log \rho y_e + \partial_x u + u\partial_x \log \rho y_e = \frac{\dot{w}_e}{\rho y_e} \tag{B.13}$$

En multipliant (B.12) et (B.13) par p_e et en les retranchant de l'équation de bilan de la pression des électrons (B.10), on peut éliminer le terme $\dot{w}_e$ et on obtient, à l'aide de la remarque (B.11) :

$$\partial_t \frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}} + u \partial_x \frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}} = (\gamma_e - 1) \frac{S_{e-t}}{y_e \rho^{\gamma_e}} \tag{B.14}$$

Combiné avec la loi de conservation de masse du mélange (B.5a) et en s'aidant à nouveau de la remarque (B.11), on aboutit à l'équation souhaitée :

$$\partial_t \rho g\left(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\right) + \partial_x \left(\rho g\left(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\right) u\right) = (\gamma_e - 1) \frac{S_{e-t}}{y_e \rho^{\gamma_e - 1}} g'\left(\frac{p_e}{y_e \rho^{\gamma_e}}\right) \tag{B.15}$$

Dans notre cas, la fonction g est la fonction : $x \longmapsto \left(\frac{x}{\gamma_e - 1}\right)^{1/\gamma_e}$

Annexe C

Tableaux de données pour les modèles physico-chimiques

Espèce	$M_s, g/mol$	$\theta_{v,s}, K$	$h_f^0, J/kg$	θ_d ou θ_i
N_2	28	3390	0.	113085
O_2	32	2270	0.	59380
NO	30	2743	2991594.1	75500
N	14	-	33590858.0	-
O	16	-	15405691.9	-
N_2^+	28	3180	53702218.9	181080
O_2^+	32	2745	36405576.6	139902
NO^+	30	3425	32834800.0	107544
N^+	14	-	133828527.9	168917
O^+	16	-	97569090.0	158270
e^-	$5.486 \cdot 10^{-4}$	-	0.	-
CO	28	3121	-3947500	128987
CO_2	44	1890 ; 954(2) ; 3360	-8943682	192110
C	12	-	59722500	-

Tab. C.1: Données thermodynamiques des espèces chimiques

Espèce	g_0	g_1	g_2	g_3	g_4	θ_{e1}, K	θ_{e2}, K	θ_{e3}, K	θ_{e4}, K
N_2	1								
O_2	3	2	1	3		11390	18990	51865	
NO	2	2	2			174	63172		
N	4	10	6			27700	41500		
O	5	3	1	5	1	228	326	22800	48600
N_2^+	2	4	2			13000	36837		
O_2^+	4	8				46862			
NO^+	1	3	6	6		28737	44537	51722	
N^+	1	3	5	5	1	70	188.5	22068	47100
O^+	4	10	6			38631	58308		
e^-	2								

Tab. C.2: Description de l'énergie électronique

Réaction	M	$T_{a,f}$	$T_{a,b}$	$k_f[m^3.mol^{-1}.s^{-1}]$			$k_b[m^3.mol^{-1}.s^{-1}]$			Source
				A_f	B_f	θ_f	A_b	B_b	θ_b	
Réactions de dissociation										
$N_2 + M \rightleftharpoons$	N_2	T	T	$7.0 \cdot 10^{15}$	-1.6	113200	$1.18 \cdot 10^{08}$	-1.47	-217	[150]
$N + N + M$	O_2			$7.0 \cdot 10^{15}$			$1.18 \cdot 10^{08}$			
	NO			$7.0 \cdot 10^{15}$			$1.18 \cdot 10^{08}$			
	N_2^+			$7.0 \cdot 10^{15}$			$1.18 \cdot 10^{08}$			
	O_2^+			$7.0 \cdot 10^{15}$			$1.18 \cdot 10^{08}$			
	NO^+			$7.0 \cdot 10^{15}$			$1.18 \cdot 10^{08}$			
	N			$3.0 \cdot 10^{16}$			$5.06 \cdot 10^{08}$			
	O			$3.0 \cdot 10^{16}$			$5.06 \cdot 10^{08}$			
	N^+			$3.0 \cdot 10^{16}$			$5.06 \cdot 10^{08}$			
	O^+			$3.0 \cdot 10^{16}$			$5.06 \cdot 10^{08}$			
	e^-	T_e	T_e	$3.0 \cdot 10^{18}$			$5.06 \cdot 10^{08}$			[149]
$O_2 + M \rightleftharpoons$	N_2	T	T	$2.0 \cdot 10^{15}$	-1.5	59500	$1.27 \cdot 10^{07}$	-1.265	-374	[150]
$O + O + M$	O_2			$2.0 \cdot 10^{15}$			$1.27 \cdot 10^{07}$			
	NO			$2.0 \cdot 10^{15}$			$1.27 \cdot 10^{07}$			
	N_2^+			$2.0 \cdot 10^{15}$			$1.27 \cdot 10^{07}$			
	O_2^+			$2.0 \cdot 10^{15}$			$1.27 \cdot 10^{07}$			
	NO^+			$2.0 \cdot 10^{15}$			$1.27 \cdot 10^{07}$			
	N			$1.0 \cdot 10^{16}$			$6.38 \cdot 10^{07}$			
	O			$1.0 \cdot 10^{16}$			$6.38 \cdot 10^{07}$			
	N^+			$1.0 \cdot 10^{16}$			$6.38 \cdot 10^{07}$			
	O^+			$1.0 \cdot 10^{16}$			$6.38 \cdot 10^{07}$			
$NO + M \rightleftharpoons$	N_2	T	T	$5.0 \cdot 10^{09}$	0.	75500	$2.1 \cdot 10^{02}$	0.192	-353	[150]
$N + O + M$	O_2			$5.0 \cdot 10^{09}$			$2.1 \cdot 10^{02}$			
	NO			$1.1 \cdot 10^{11}$			$4.2 \cdot 10^{02}$			
	N_2^+			$5.0 \cdot 10^{09}$			$2.1 \cdot 10^{02}$			
	O_2^+			$5.0 \cdot 10^{09}$			$2.1 \cdot 10^{02}$			
	NO^+			$5.0 \cdot 10^{09}$			$2.1 \cdot 10^{02}$			
	N			$1.1 \cdot 10^{11}$			$4.2 \cdot 10^{02}$			
	O			$1.1 \cdot 10^{11}$			$4.2 \cdot 10^{02}$			
	N^+			$1.1 \cdot 10^{11}$			$4.2 \cdot 10^{02}$			
	O^+			$1.1 \cdot 10^{11}$			$4.2 \cdot 10^{02}$			
Réactions d'échange										
$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$		T	T	$1.8 \cdot 10^{08}$	0.	38400	$7.23 \cdot 10^{07}$	-0.067	835	[153]
$NO + O \rightleftharpoons O_2 + N$		T	T	$2.4 \cdot 10^{03}$	1.0	19220	$1.58 \cdot 10^{04}$	0.963	3242	
Réactions d'ionisation par association										
$N + O \rightleftharpoons NO^+ + e^-$		T	T_e	$8.8 \cdot 10^{02}$	1.0	31900	$6.88 \cdot 10^{12}$	-0.612	257	[150]
$O + O \rightleftharpoons O_2^+ + e^-$				$7.1 \cdot 10^{-04}$	2.7	80600	$8.53 \cdot 10^{06}$	1.025	567	
$N + N \rightleftharpoons N_2^+ + e^-$				$4.4 \cdot 10^{01}$	1.5	67500	$9.85 \cdot 10^{11}$	-0.367	-14	
Réactions d'ionisation par impact d'électrons										
$N + e^- \rightleftharpoons N^+ + 2e^-$		T_e	T_e	$2.5 \cdot 10^{28}$	-3.82	168600	$1.44 \cdot 10^{30}$	-5.324	-433	[150]
$O + e^- \rightleftharpoons O^+ + 2e^-$				$3.9 \cdot 10^{27}$	-3.78	158500	$8.38 \cdot 10^{29}$	-5.276	313	
Réactions d'échange de charge										
$O + NO^+ \rightleftharpoons O_2 + N^+$		T	T	$1.0 \cdot 10^{06}$	0.5	77200	$1.15 \cdot 10^{06}$	0.374	-317	[150]
$O_2^+ + N \rightleftharpoons O_2 + N^+$				$8.7 \cdot 10^{07}$	0.14	28600	$6.4 \cdot 10^{07}$	0.079	-530	
$NO + O^+ \rightleftharpoons O_2 + N^+$				$1.4 \cdot 10^{-01}$	1.9	26600	$2.53 \cdot 10^{-01}$	1.853	-219	
$N_2 + O_2^+ \rightleftharpoons O_2 + N_2^+$				$9.9 \cdot 10^{06}$	0.	40700	$5.73 \cdot 10^{07}$	-0.314	-290	
$O + O_2^+ \rightleftharpoons O_2 + O^+$				$4.0 \cdot 10^{06}$	-0.09	18600	$1.1 \cdot 10^{07}$	-0.143	316	[148]
$NO^+ + N \rightleftharpoons O^+ + N_2$				$3.4 \cdot 10^{07}$	-1.08	12800	$5.38 \cdot 10^{07}$	-1.091	-334	[150]
$NO^+ + O_2 \rightleftharpoons O_2^+ + NO$				$2.4 \cdot 10^{07}$	0.41	32400	$5.55 \cdot 10^{06}$	0.384	-13	[148]
$NO^+ + O \rightleftharpoons O_2^+ + N$				$7.2 \cdot 10^{06}$	0.29	48600	$1.12 \cdot 10^{07}$	0.225	213	[150]
$N_2 + O^+ \rightleftharpoons N_2^+ + O$				$9.0 \cdot 10^{05}$	0.36	22800	$1.89 \cdot 10^{06}$	0.099	95	
$N + NO^+ \rightleftharpoons N_2^+ + O$				$7.2 \cdot 10^{07}$	0.	35500	$2.4 \cdot 10^{08}$	-0.272	-339	
$N_2 + N^+ \rightleftharpoons N_2^+ + N$				$1.0 \cdot 10^{06}$	0.5	12200	$7.87 \cdot 10^{06}$	0.247	340	

Tab. C.3: Modèle de cinétique chimique de Park dans CELHyO2D [209]

Réaction	M	$T_{a,f}$	$T_{a,b}$	$k_f[m^3.mol^{-1}.s^{-1}]$			$k_b[m^3.mol^{-1}.s^{-1}]$		
				A_f	B_f	θ_f	A_b	B_b	θ_b
Réactions de dissociation									
$N_2 + M \rightleftharpoons$	N_2	T	T	$4.7 \cdot 10^{11}$	-0.5	113000	$2.72 \cdot 10^{04}$	-0.5	0
$N + N + M$	O_2			$1.9 \cdot 10^{11}$			$1.1 \cdot 10^{04}$		
	NO			$1.9 \cdot 10^{11}$			$1.1 \cdot 10^{04}$		
	N			$4.085 \cdot 10^{16}$	-1.5	113000	$2.27 \cdot 10^{09}$	-1.5	0
	O			$1.9 \cdot 10^{11}$	-0.5	113000	$1.1 \cdot 10^{04}$	-0.5	0
$O_2 + M \rightleftharpoons$	N_2	T	T	$7.2 \cdot 10^{12}$	-1.0	59500	$6.0 \cdot 10^{03}$	-0.5	0
$O + O + M$	O_2			$3.24 \cdot 10^{13}$			$2.7 \cdot 10^{04}$		
	NO			$3.6 \cdot 10^{12}$			$3.0 \cdot 10^{03}$		
	N			$3.6 \cdot 10^{12}$			$3.0 \cdot 10^{03}$		
	O			$9.0 \cdot 10^{13}$			$7.5 \cdot 10^{04}$		
$NO + M \rightleftharpoons$	N_2	T	T	$3.9 \cdot 10^{14}$	-1.5	75500	$1.0 \cdot 10^{08}$	-1.5	0
$N + O + M$	O_2			$3.9 \cdot 10^{14}$			$1.0 \cdot 10^{08}$		
	NO			$7.8 \cdot 10^{14}$			$2.0 \cdot 10^{08}$		
	N			$7.8 \cdot 10^{14}$			$2.0 \cdot 10^{08}$		
	O			$7.8 \cdot 10^{14}$			$2.0 \cdot 10^{08}$		
Réactions d'échange									
$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$		T	T	$7.0 \cdot 10^{07}$	0.	38000	$1.56 \cdot 10^{07}$	0.	0
$NO + O \rightleftharpoons O_2 + N$		T	T	$3.2 \cdot 10^{03}$	1.0	19700	$1.3 \cdot 10^{04}$	1.0	3580
Réactions d'ionisation par association									
$N + O \rightleftharpoons NO^+ + e^-$		T	T_e	$1.4 \cdot 10^{01}$	1.5	31900	$6.7 \cdot 10^{15}$	-1.5	0
$O + O \rightleftharpoons O_2^+ + e^-$				$1.6 \cdot 10^{11}$	-0.98	80800	$8.02 \cdot 10^{15}$		
$N + N \rightleftharpoons N_2^+ + e^-$				$1.4 \cdot 10^{07}$	0.	67800	$1.5 \cdot 10^{16}$		
Réactions d'ionisation par impact d'électrons									
$N + e^- \rightleftharpoons N^+ + 2e^-$		T_e	T_e	$1.1 \cdot 10^{26}$	-3.14	169000	$2.2 \cdot 10^{28}$	-4.5	0
$O + e^- \rightleftharpoons O^+ + 2e^-$				$3.6 \cdot 10^{25}$	-2.91	158000	$2.2 \cdot 10^{28}$		
Réactions d'échange de charge									
$O + NO^+ \rightleftharpoons O_2 + N^+$		T	T	$1.34 \cdot 10^{07}$	0.31	77270	$1.0 \cdot 10^{08}$	0.	0
$O + O_2^+ \rightleftharpoons O_2 + O^+$				$2.92 \cdot 10^{12}$	-1.11	28000	$7.8 \cdot 10^{05}$	0.5	
$N_2 + N^+ \rightleftharpoons N + N_2^+$				$2.02 \cdot 10^{05}$	0.81	13000	$7.8 \cdot 10^{05}$	0.5	
$O_2 + NO^+ \rightleftharpoons NO + O_2^+$				$1.8 \cdot 10^{09}$	0.17	33000	$1.8 \cdot 10^{07}$	0.5	
$N_2 + O^+ \rightleftharpoons O + N_2^+$				$3.4 \cdot 10^{13}$	-2.0	23000	$2.48 \cdot 10^{13}$	-2.2	
$N + NO^+ \rightleftharpoons NO + N^+$				$1.0 \cdot 10^{13}$	-0.93	61000	$4.8 \cdot 10^{08}$	0.	
$O + NO^+ \rightleftharpoons NO + O^+$				$3.63 \cdot 10^{09}$	-0.6	50800	$1.5 \cdot 10^{07}$	0.	
Réactions d'ionisation par impact moléculaire									
$N_2 + O_2 \rightleftharpoons NO + NO^+ + e^-$		T	T_e	$1.38 \cdot 10^{14}$	-1.84	141000	$1.0 \cdot 10^{12}$	-2.5	0
$NO + O_2 \rightleftharpoons O_2 + NO^+ + e^-$				$8.8 \cdot 10^{09}$	-0.35	108000	$8.8 \cdot 10^{14}$		
$NO + N_2 \rightleftharpoons N_2 + NO^+ + e^-$				$2.2 \cdot 10^{09}$	-0.35	108000	$2.2 \cdot 10^{14}$		

Tab. C.4: Modèle de cinétique chimique de Dunn et Kang [62] dans CELHyO2D [209]

Réaction	M	$k_f[m^3.mol^{-1}.s^{-1}]$			$k_b[m^3.mol^{-1}.s^{-1}]$		
		A_f	B_f	θ_f	A_b	B_b	θ_b
Réactions de dissociation							
$CO_2 + M \rightleftharpoons CO + O + M$	O_2	$6.9 \cdot 10^{15}$	-1.5	63275	$1.14 \cdot 10^{05}$	-0.75	535
	CO	$6.9 \cdot 10^{15}$			$1.14 \cdot 10^{05}$		
	CO_2	$6.9 \cdot 10^{15}$			$1.14 \cdot 10^{05}$		
	O	$1.38 \cdot 10^{16}$			$2.28 \cdot 10^{05}$		
	C	$1.38 \cdot 10^{16}$			$2.28 \cdot 10^{05}$		
$CO + M \rightleftharpoons C + O + M$	O_2	$2.3 \cdot 10^{14}$	-1.0	129000	$5.13 \cdot 10^{06}$	-1.0	0
	CO	$2.3 \cdot 10^{14}$			$5.13 \cdot 10^{06}$		
	CO_2	$2.3 \cdot 10^{14}$			$5.13 \cdot 10^{06}$		
	O	$3.4 \cdot 10^{14}$			$7.59 \cdot 10^{06}$		
	C	$3.4 \cdot 10^{14}$			$7.59 \cdot 10^{06}$		
$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	O_2	$2.0 \cdot 10^{15}$	-1.5	59500	$2.0 \cdot 10^{06}$	-1.0	0
	CO	$2.0 \cdot 10^{15}$			$2.0 \cdot 10^{06}$		
	CO_2	$2.0 \cdot 10^{15}$			$2.0 \cdot 10^{06}$		
	O	$1.0 \cdot 10^{16}$			$1.0 \cdot 10^{07}$		
	C	$1.0 \cdot 10^{16}$			$1.0 \cdot 10^{07}$		
Réactions d'échange							
$CO + CO \rightleftharpoons CO_2 + C$		$2.33 \cdot 10^{03}$	0.5	65710	$4.6 \cdot 10^{06}$	-0.25	0
$CO + O \rightleftharpoons O_2 + C$		$3.9 \cdot 10^{07}$	-0.18	69200	$1.34 \cdot 10^{08}$	-0.43	0
$CO_2 + O \rightleftharpoons O_2 + CO$		$2.1 \cdot 10^{07}$	0.	27800	$4.11 \cdot 10^{04}$	0.5	23800

Tab. C.5: Modèle de cinétique chimique martienne [38] basé sur Park [152]

A^*_{sr}	$= 1.10$	pour les interactions entre un atome et son propre ion
	$= 1.25$	pour toutes les autres interactions
B_{sr}	$= 0.20$	pour les interactions entre des atomes ou molécules et des électrons
	$= 0.15$	pour les interactions entre des atomes ou molécules et des ions
	$= 0.78$	pour les interactions entre des atomes ou molécules et des atomes ou molécules
	$= 1.00$	pour toutes les autres interactions
F_{sr}	$= 1.00$	pour toutes les interactions

Tab. C.6: Constantes des lois de mélange d'Armaly et Sutton [12]

Espèce	A_s^μ	B_s^μ	C_s^μ
N_2	0.0203	0.4329	-11.8153
O_2	0.0484	-0.1455	-8.9231
NO	0.0452	-0.0609	-9.4596
NO^+	0	2.5	-32.0453
N	0.012	0.5930	-12.3805
O	0.0205	0.4257	-11.5803
N^+	0	2.5	-32.4285
O^+	0	2.5	-32.3606
N_2^+	0	2.5	-32.0827
O_2^+	0	2.5	-32.0148
e^-	0	2.5	-37.4475
C_2	-0.011809	0.8486858	-13.182071
CN	-0.007770	0.779370	-12.825216
CO	-0.014044	0.887198	-13.269815
N_2O	-0.030419	1.174178	-14.548670
NO_2	-0.040895	1.365190	-15.457477
CO_2	-0.026654	1.107305	-14.291274
C	-0.007140	0.768602	-12.956246

Tab. C.7: Coefficients de la loi de viscosité de Blöttner proposés par Gupta *et al.* [79] pour la chimie de l'air à 11 espèces, valables sur la plage de température $1000K$ - $30000K$, et extrapolés par William [209] pour une chimie carbonée, valables sur la plage de température $100K$ - $20000K$

Paire Collisionnelle s-r	$A_{D_{sr}}$	$B_{D_{sr}}$	$C_{D_{sr}}$
N_2-N_2	0.0112	1.6182	-11.3091
O_2-N_2	0.0456	0.9271	-8.1137
O_2-O_2	0.0410	1.0023	-8.3597
N-N_2	0.0195	1.4880	-10.3654
N-O_2	0.0179	1.4848	-10.2810
N-N	0.0033	1.5572	-10.8819
O-N_2	0.0140	1.5824	-10.8819
O-O_2	0.0226	1.3700	-9.6631
O-N	-0.0048	1.9195	-11.9261
O-O	0.0034	1.5572	-11.1729
NO-N_2	0.0291	1.2676	-9.6878
NO-O_2	0.0438	0.9647	-8.2380
NO-N	0.0185	1.4882	-10.3301
NO-O	0.0179	1.4848	-10.3155
NO-NO	0.0364	1.1176	-8.9695
NO^+-N_2	0	1.9000	-13.3343
NO^+-O_2	0	1.9001	-13.3677
NO^+-N	0	1.8999	-13.1254
NO^+-O	0	1.9000	-13.1701
NO^+-NO	0.0047	1.5552	-11.3713
NO^+-NO^+	0	3.5000	-30.3210
N^+-N_2	0	1.9000	-13.1144
N^+-O_2	0	1.9000	-13.1357
N^+-N	0.0033	1.5572	-11.1616
N^+-O	0	1.9000	-13.0028
N^+-NO	0	1.8999	-13.1254
N^+-NO^+	0	3.5000	-30.0951
N^+-N^+	0	3.5000	-29.9401
O^+-N_2	0	1.9000	-13.1578
O^+-O_2	0	1.9000	-13.1810
O^+-N	0	1.9000	-13.0028
O^+-O	0.0034	1.5572	-11.1729
O^+-NO	0	1.9000	-13.1701
O^+-NO^+	0	3.5000	-30.1395
O^+-N^+	0	3.5000	-29.9722
N_2^+-N_2	0	1.9000	-13.3173
N_2^+-O_2	0	1.9000	-13.3495
N_2^+-N	0	1.9000	-13.1144
N_2^+-O	0	1.9000	-13.1578
N_2^+-NO	0	1.9000	-13.3343
N_2^+-NO^+	0	3.5000	-30.3036
N_2^+-N^+	0	3.5000	-30.0839
N_2^+-O^+	0	3.5000	-30.1273
N_2^+-N_2^+	0	3.5000	-30.2867
O_2^+-N_2	0	1.9000	-13.3173
O_2^+-O_2	0	1.9000	-13.3495
O_2^+-N	0	1.9000	-13.1144
O_2^+-O	0	1.9000	-13.1578
O_2^+-NO	0	1.9000	-13.3343
O_2^+-NO^+	0	3.5000	-30.3036
O_2^+-N^+	0	3.5000	-30.0839
O_2^+-O^+	0	3.5000	-30.1273
O_2^+-N_2^+	0	3.5000	-30.2867
O_2^+-O_2^+	0	3.5000	-30.2867

Tab. C.8: Coefficients du modèle de Gupta *et al.* [79] pour la diffusion binaire, valables sur la plage de température $1000K$ - $30000K$. La diffusion binaire est symétrique, $D_{sr} = D_{rs}$. Les coefficients de diffusion sont obtenus en $cm^2 - atm/sec$.

Espèce moléculaire m	Espèce collisionnelle s	a_{ms}^{MWP}	b_{ms}^{MWP}
N_2			
	N	180	0.0262
	O	72.4	0.0150
	N_2	221	0.0290
	O_2	229	0.0295
	NO	225	0.0293
O_2			
	N	72.4	0.0150
	O	47.7	0.0590
	N_2	134	0.0295
	O_2	138	0.0300
	NO	136	0.0298
NO			
	N	49.5	0.0420
	O	49.5	0.0420
	N_2	49.5	0.0420
	O_2	49.5	0.0420
	NO	49.5	0.0420

Tab. C.9: Constantes du modèle de Park [150] pour la relaxation vibrationnelle

Paire collisionnelle m-m'	$a_{m,m'}^{L}$	$b_{m,m'}^{L}$	$c_{m,m'}^{L}$	$d_{m,m'}^{L}$
$N_2 - O_2$	-22.81	200.84	-556.32	0.0
$N_2 - NO$	-12.97	-18.63	309.29	0.0
$O_2 - NO$	-17.53	20.61	62.47	0.0068

Tab. C.10: Coefficients des temps de relaxation du modèle de Losev *et al.* [123] pour les transferts V-V

Paire Collisionnelle $e^- - n$	a_{en}	b_{en}	c_{en}	d_{en}	e_{en}
$e^- - N_2$	$2.73 \cdot 10^{-20}$	$1.32 \cdot 10^{-23}$	$-1.41 \cdot 10^{-27}$	$6.63 \cdot 10^{-32}$	0
$e^- - O_2$	$2.65 \cdot 10^{-20}$	$1.41 \cdot 10^{-24}$	$-4.14 \cdot 10^{-28}$	$8.12 \cdot 10^{-32}$	0
$e^- - NO$	$4.11 \cdot 10^{-20}$	$3.54 \cdot 10^{-24}$	$1.46 \cdot 10^{-27}$	$-8.30 \cdot 10^{-32}$	0
$e^- - N$	$4.12 \cdot 10^{-19}$	$-1.63 \cdot 10^{-22}$	$3.53 \cdot 10^{-26}$	$-3.64 \cdot 10^{-30}$	$1.42 \cdot 10^{-34}$
$e^- - O$	$4.26 \cdot 10^{-19}$	$-1.43 \cdot 10^{-22}$	$2.67 \cdot 10^{-26}$	$-2.43 \cdot 10^{-30}$	$8.53 \cdot 10^{-35}$

Tab. C.11: Coefficients des sections efficaces de collision élastique entre électron et espèces neutres [129]

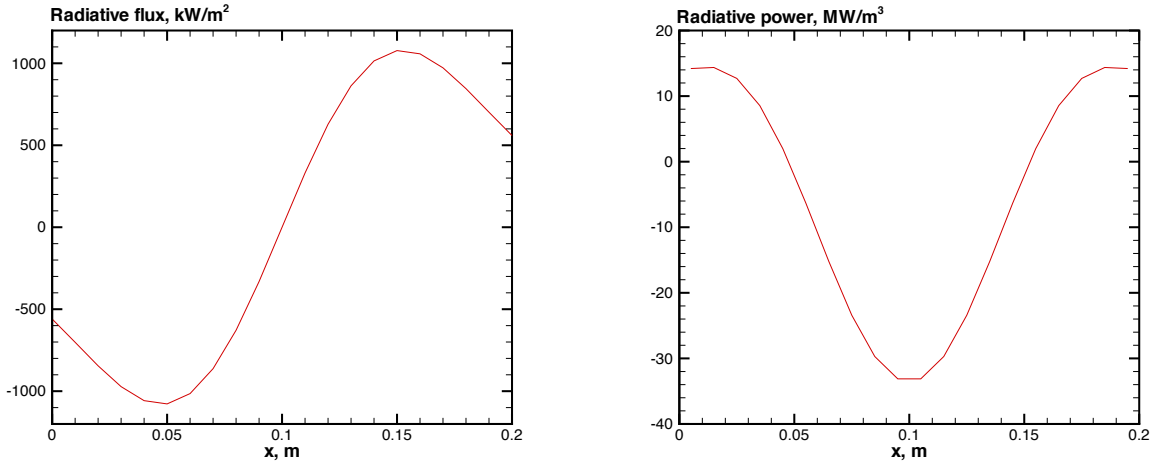
Annexe D

Validation du code plan tangent sur une application de type mur plan référencée

Dans le cadre des écoulements de rentrée, la méthode des plans tangents est classiquement utilisée pour fournir le flux radiatif à la paroi du véhicule et la puissance radiative volumique au sein de l'écoulement. Avant d'appliquer cette méthode, nous l'avons validée sur un problème académique de type mur plan en comparant la solution exacte (quasi-analytique) à la solution obtenue par la méthode des plans tangents.

Le problème mur plan [185, 170] consiste à considérer deux plans parallèles séparés par un milieu semi-transparent. On suppose les plans infinis, isothermes, distants de L, à propriétés radiatives isotropes et uniformes. On notera x l'abscisse d'un point selon la normale aux plans. Le milieu est supposé non diffusant, homogène et anisotherme. Le coefficient d'absorption du milieu est constant, égal à $10m^{-1}$. La distribution de température obéit à un profil parabolique selon x, symétrique par rapport au plan médian. La température vaut $500K$ au niveau des deux parois et $2500K$ au milieu du gaz. Enfin, l'émissivité des parois est supposée égale à 0,8. Le milieu est discrétisé en 20 tranches de $1cm$.

Les résultats sont présentés sur la figure D.1. Le flux radiatif à la paroi vaut $559,7kW/m^2$, la solution analytique étant $560,5kW/m^2$ [195]. Les résultats sont donc tout-à-fait similaires, le très faible écart constaté pouvant provenir de la méthode numérique d'intégration. Le profil de puissance radiative est identique à celui présenté dans [195], validant ainsi l'implémentation de la méthode des plans tangents.



(a) **Flux radiatif** (b) **Puissance volumique radiative**

Fig. D.1: Cas test mur plan

Par ailleurs, les fonctions exponentielles intégrales E_n utilisées dans la méthode des plans tangents sont calculées à l'aide des approximations polynômiales et rationelles, données par Abramowitz et Stegun [2] et présentées ci-dessous :

- $0 \leq x \leq 1$

$$E_1(x) + \log x = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5 + \epsilon(x)$$
$$|\epsilon(x)| < 2 \cdot 10^{-7}$$
$$a_0 = -0.57721566 \quad a_3 = \quad 0.05519968$$
$$a_1 = \quad 0.99999193 \quad a_4 = -0.00976004$$
$$a_2 = -0.24991055 \quad a_5 = \quad 0.00107857$$

- $1 \leq x < \infty$

$$xe^x E_1(x) = \frac{x^4 + a_3 x^3 + x^2 + a_1 x + a_2}{x^4 + b_3 x^3 + x^2 + b_1 x + b_2} + \epsilon(x)$$
$$|\epsilon(x)| < 2 \cdot 10^{-8}$$
$$a_1 = \quad 8.5733287401 \quad b_1 = \quad 9.5733223454$$
$$a_2 = 18.0590169730 \quad b_2 = 25.6329561486$$
$$a_3 = \quad 8.6347608925 \quad b_3 = 21.0996530827$$
$$a_4 = \quad 0.2677737343 \quad b_4 = \quad 3.9584969228$$

- $\forall x$

$$E_{n+1}(x) = \frac{1}{n}[e^{-x} - xE_n(x)] \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

Annexe E

Tableaux de résultat des calculs sur le cas d'épreuve FIRE II

Dans cette annexe, on présente les tableaux des résultats de calcul sur le cas d'épreuve FIRE II. Chaque tableau correspond à un point de vol. Les trois points de vol sont référencés par le temps écoulé depuis le tir de la fusée : $t = 1634s$, $t = 1643s$ et $t = 1648,5s$. On distingue les résultats suivant le modèle de cinétique chimique (Dunn et Kang, Park et Park et Wilson) et la méthode de résolution des transferts radiatifs (méthode des plans tangents ou méthode de lancer de rayon, sachant que pour cette dernière le paramètre $\theta_{\max}$ vaut soit 90° soit 5°). On inclut les résultats des calculs couplés et découplés. On inclut également les données mesurées en vol, extraites de Cauchon [29]. Les résultats sont commentés au chapitre 6.

FIRE II	Point location :	Stagnation		Offset	
1634s	Wavelength range, Å	800-15,000	2000-15,000	800-15,000	2000-15,000
Incident radiative flux W/cm^2	Flight data [29]		8.4±20%		6.3±20%
	Park coupled, TS*	17.6	8.5	13.8	6.7
	Park uncoupled, TS*	18.8	9.1	15.9	7.4
	Park coupled, RTM† 90°	15.4	7.2	11.8	5.4
	Park uncoupled, RTM† 90°	16.4	7.8	13.7	6.6
	Dunn-Kang uncoupled, TS*	36.8	15.6		
	PW‡ uncoupled, TS*	594.9	217.2		
Steradiancy W/cm^2-sr	Flight data [29]		1.6±20%		1.2±20%
	Park coupled, RTM† 5°		1.50		1.17
	Park uncoupled, RTM† 5°		1.60		1.40

	Point location on surface :	$y = 0.0305m$ (stagnation)	$y = 0.1854m$	$y = 0.2972$	$y = 0.3358$
$q^C + \alpha q^{R-}$ W/cm^2	Flight data [55]	170±5%	170±5%	160±5%	25±5%
	Park coupled, TS*	146 (=133+13)	141 (=130+11)	135 (=127+8)	38 (=38+0)
	Park uncoupled, TS*	150 (=136+14)			
	PW‡ uncoupled, TS*	572 (=112+460)			
	Dunn-Kang uncoupled, TS*	168 (=141+27)			

* TS : Tangent Slab
† RTM : Ray Tracing Method
‡ PW : Park and Wilson (these results are obtained using one million spectral points, other results are obtained using 250000 spectral points)

Tab. E.1: Résultats de calcul au point de vol $1634s$

FIRE II	Point location :	Stagnation		Offset	
1643s	Wavelength range, Å	800-40,000	2000-40,000	800-40,000	2000-40,000
Incident radiative flux W/cm^2	Flight data [29]		340±23%		180±32%
	Park coupled, TS*	492	310	315	194
	Park uncoupled, TS*	592	366	377	227
	Park coupled, RTM† 90°	437	266	277	164
Steradiancy W/cm^2-sr	Flight data [29]		64±23%		34±32%
	Park coupled, RTM† 5°		58		37

	Point location on surface :	$y = 0.0305m$ (stagnation)	$y = 0.1702m$	$y = 0.2845$	$y = 0.3150$
$q^C + \alpha q^{R-}$ W/cm^2	Flight data [55]	1020±5%	925±5%	915±5%	130±5%
	Park coupled, TS*	1006 (=688+318)	953 (=685+267)	827 (=673+151)	47 (=41+6)
	Park uncoupled, TS*	1113 (=727+386)			

* TS : Tangent Slab
† RTM : Ray Tracing Method

Tab. E.2: Résultats de calcul au point de vol $1643s$ (50000 points spectraux)

FIRE II	Point location :	Stagnation		Offset	
1648.5s	Wavelength range, Å	800-15,000	2000-15,000	800-15,000	2000-15,000
Incident radiative flux W/cm^2	Flight data [29]		22±20%		16±32%
	Park coupled, TS*	74.6	28.7	73.5	32.2
	Park uncoupled, TS*	73.4	29.1	77.2	28.9
	Park coupled, RTM† 90°	62.9	22.9	44.9	17.7
Steradiancy W/cm^2-sr	Flight data [29]		4.2±20%		3±32%
	Park coupled, RTM† 5°		4.7		5.0

	Point location on surface :	$y = 0.0305m$ (stagnation)	$y = 0.1676m$	$y = 0.2540$	$y = 0.2936$
$q^C + \alpha q^{R-}$ W/cm^2	Flight data [55]	675±5%	630±5%	605±5%	75±5%
	Park coupled, TS*	773 (=729+54)	737 (=695+42)	710 (=669+41)	86 (=74+12)
	Park uncoupled, TS*	828 (=775+53)			

* TS : Tangent Slab
† RTM : Ray Tracing Method

Tab. E.3: Résultats de calcul au point de vol $1648,5$ (50000 points spectraux)

Références bibliographiques

[1] R. Abgrall. Extension of Roe's approximate Riemann solver to equilibrium and nonequilibrium flows. In Vieweg P.Wesseling Ed., editor, *8th GAMM Conference on Num. Method in Fluids Mech.*, volume 29, 1990.

[2] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 9^{th} edition, 1989.

[3] N. Afonina, V. Gromov, and V. Sakharov. Numerical investigation of nonequilibrium phenomena around the generic model. INTAS Project 5204, slides for the 1^{st} Intermediate Meeting in Toulouse (France), May-June 2005.

[4] W.F. Ahtye. Thermal conductivity in vibrationally excited gases. *Journal of Chemical Physics*, 57 :5542–5555, 1972.

[5] A. Aliat. *Modélisation d'un écoulement hypersonique de CO en déséquilibre physico-chimique et radiatif derrière une onde de choc*. PhD thesis, Université de Provence, 2002.

[6] A. Aliat, A. Chikhaoui, and E. V. Kustova. Nonequilibrium kinetics of a radiative CO flow behind a shock wave. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 68(5), 2003.

[7] R.A. Allen, P.H. Rose, and J.C. Camm. Nonequilibrium and equilibrium radiation at super-satellite reentry velocities. Res. Rept 156, AVCO-Everett Research Laboratory, Everett, MA, 1962.

[8] J.D. Anderson, Jr. Nongray radiative transfer effects on the radiating stagnation region shock layer and stagnation point heat transfer. NOLTR 67–104, US Naval Ordnance Laboratory, White Oak, MD., 1967.

[9] J.D. Anderson, Jr. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw–Hill, 1989.

[10] F. André, M.-Y. Perrin, and J. Taine. FTIR measurements of CO_2 line positions and intensities at high temperature in the $3700-3750 cm^{-1}$ spectral region. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 228(1) :187–205, 2004.

[11] J.P. Appleton and K.N.C. Bray. The conservation equations for a non-equilibrium plasma. *J. Fluid Mech.*, 20(4) :659–672, 1964.

[12] B.F. Armaly and K. Sutton. Viscosity of multicomponent partially ionized gas mixtures. AIAA Paper 80–1495, 1980.

[13] B.F. Armaly and K. Sutton. Thermal conductivity of partially ionized gas. AIAA Paper 81–1174, 1981.

[14] A. Balakrishnan, C. Park, and M.J. Green. Radiative viscous shock layer analysis of Fire, Apollo, and PAET flight data. AIAA paper 85–1064, June 1985.

[15] P.F. Barbante. *Accurate and Efficient Modelling of High Temperature Nonequilibrium Air Flows*. PhD thesis, ULB Bruxelles, 2001.

[16] C. Berthon. *Contribution à l'analyse numérique des équations de Navier-Stokes compressibles à deux entropies spécifiques*. Phd thesis, Université Paris VI, 1999.

[17] G.A. Bird. Low density aerothermodynamics. AIAA Paper 85–0994, 1985.

[18] G.A. Bird. Nonequilibrium radiation during re-entry at 10km/s. AIAA Paper 87–1543, 1987.

[19] V. Blackmann. Vibrational relaxation in oxygen and nitrogen. Technical report, Princeton University, 1955.

[20] 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.

[21] C. Borgnakke and P.S. Larson. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixtures. *Journal of Computational Physics*, 18 :405–420, 1975.

[22] A. Bourdon. Electron-vibration energy exchange models in nitrogen plasma flows. *Physical Review E*, 55(4), 1997.

[23] A. Broc. *Prise en compte du rayonnement dans les écoulements hyperenthalpiques*. PhD thesis, Université Paris XI, 1998.

[24] R. Brun. *Transport et relaxation dans les écoulements gazeux*. Masson, 1986.

[25] G.V. Candler. *The Computation of Weakly Ionized Hypersonic Flows in Thermo-Chemical Nonequilibrium*. PhD thesis, Stanford University, 1988.

[26] G.V. Candler and R.W. MacCormack. The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. AIAA paper 88–0511, 1988.

[27] T.N. Canning and W.A. Page. Measurements of radiation from the flow fields of bodies flying at speeds up to 13.4 kilometers per second. In W.C. Nelson, editor, *The High Temperature Aspects of Hypersonic Flows*, pages 569–582. Pergamon, New York, 1964.

[28] A.B. Carlson, H.A. Hassan, and J.N. Moss. Monte-Carlo simulation of re-entry plasmas. AIAA Paper 89–0683, 1989.

[29] 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.

[30] 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.

[31] C. Chackerian and R.H. Tipping. Vibrational-rotational and rotational intensities for CO isotopes. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 99 :431–449, 1983.

[32] C. Chackerian and W. Urban. Experimental determination of the $^1\Sigma^+$ state electric dipole moment function of carbon monoxide up to a large internuclear separation. *Canadian Journal of Physics*, 62 :1579–1585, 1984.

[33] C. Chalons. *Bilans d'entropie discrets dans l'approximation numérique des chocs non classiques. Application aux équations de Navier-Stokes multi-pression 2D et à quelques systèmes visco-capillaires*. Phd thesis, Ecole polytechnique, 2002.

[34] C. Chalons and F. Coquel. Numerical approximation of the Navier-Stokes equations with several independent specific entropies. In *Hyperbolic Problems : Theory, Numerics, Applications*. Springer, 2003.

[35] C. Chalons and F. Coquel. Navier–Stokes equations with several independent pressure laws and explicit predictor-corrector schemes. *Numerische Mathematik*, 101(3) :451–478, September 2005.

[36] S. Chapman and T.G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, 1970.

[37] J.-M. Charbonnier. Analysis of the results for TC3 presented at the 1^{st} international workshop on radiation of high temperature gases in atmospheric entry. In *Proceedings of the 1^{st} International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[38] J.-M. Charbonnier, J. Couzi, W. Dieudonne, and J.-L. Vérant. International workshop on radiation of high temperature gases in atmospheric entry, TC3 : Definition of an axially symmetric testcase for high temperature gas radiation prediction in Mars atmosphere. NG 104–07–TF–001, CNES, 2003.

[39] P. Charrier, B. Dubroca, G. Duffa, and R. Turpault. Multigroup model for radiating flows during atmospheric hypersonic re-entry. In *Proceedings of International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[40] Y. Chauvat. *Le phénomène de carbuncle : analyse d'une pathologie des schémas numériques à capture de choc*. PhD thesis, SUPAERO Toulouse, 2005.

[41] S. Chauveau, C. Deron, M.-Y. Perrin, P. Rivière, and A. Soufiani. Radiative transfer in LTE air plasmas for temperatures up to 15000K. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 7 :113–130, 2003.

[42] F.M. Cheatwood, F.R. DeJarnette, and H.H. Hamilton, II. Geometrical description for a proposed aeroassist flight experiment vehicle. Technical Memorandum TM-87714, NASA, 1986.

[43] G. Q. Chen, C. D. Levermore, and T. P. Liu. Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy. *Comm. Pure Appl. Math*, 48(7) :787–830, 2003.

[44] G.G. Chernyi, S.A. Losev, S.O. Macheret, and B.V. Potapkin. Physical and chemical processes in gas dynamics : Cross sections and rate constants, vol.1. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 196, 1995.

[45] F. Coquel, C. Flament, V. Joly, and C. Marmignon. Viscous nonequilibrium flow calculations. In *Computing Hypersonic Flows*. Birkhäuser, 1993.

[46] F. Coquel, E. Godlewski, A. In, B. Perthame, and P. Rascle. Some new Godunov and relaxation methods for two phase flows. In *Proceedings of an International conference on Godunov methods : Theory and Applications*. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2001.

[47] F. Coquel and V. Joly. Développement d'un code de calcul d'écoulements hypersoniques en déséquilibre chimique et vibrationnel. Rapport de Synthèse Final 29/1123 AY, ONERA, 1992.

[48] F. Coquel and M.-S. Liou. Stable and low diffusive hybrid upwind splitting methods. Technical Report TP 1992–113, ONERA, 1992.

[49] F. Coquel and M.-S. Liou. Hybrid upwind splitting (HUS) by a field-by-field decomposition. Technical Memorandum TM–106843, NASA, 1995.

[50] F. Coquel and C. Marmignon. Simulation numérique d'écoulements faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique. ONERA Report RSF. no 6/1929AY, 1993.

[51] F. Coquel and C. Marmignon. A Roe-type linearization for a conservative and consistent reformulation of the Euler equations for weakly ionized gases. In *Congrès ENUMATH, Paris*, 1995.

[52] F. Coquel and C. Marmignon. A Roe-type linearization for the Euler equations for weakly ionized multi-component and multi-temperature gas. AIAA paper 95–1675, 1995.

[53] F. Coquel and C. Marmignon. Simulation numérique d'écoulements faiblement ionisés en déséquilibre thermochimique. ONERA Report RTS. no 12/1929AY 024A, 1995.

[54] F. Coquel and C. Marmignon. Numerical methods for weakly ionized gas. *Astrophysics and Space Sciences revue*, 260(1–2) :15–27, 1998. ISSN 0004–640X. Non-Equilibrium Radiative Hypersonic Flows (Mont Sainte Odile, 1997).

[55] 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.

[56] A. E. Cross and W. L. Jones, Jr. Electrostatic probe measurements of plasma parameters for two reentry flight experiments at 25,000 feet per second. Technical Note TN–D–6617, NASA, 1973.

[57] L. da Silva M. and M. Dudeck. A line-by-line spectroscopic code for the simulation of plasma radiation during planetary entries : the SESAM code. AIAA paper 04–2157, 2004.

[58] R.S. Devoto. Simplified expressions for the transport properties of ionized monoatomic gases. *The Physics of Fluids*, 10 :2105–2112, 1967.

[59] W. Dieudonné and M. Spel. private communication, 2006.

[60] W. Dieudonné, M. Spel, and J.-M. Charbonnier. Modeling sensitivity analysis for TC3 on the orbiter aerothermal properties. In *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[61] M. Dumbser, J.-M. Moschetta, and J. Gressier. A matrix stability analysis of the carbuncle phenomenon. *Journal of Computational Physics*, 197 :647–670, 2004.

[62] M.G. Dunn and S.W. Kang. Theoretical and experimental studies of re-entry plasmas. Technical Report CR–2232, NASA, 1973.

[63] I.V. Egorov, V.A. Gorelov, and S.T. Surzhikov. Physical models top study heating of orbital transfer space vehicles using aerobraking into the Earth's atmosphere with velocities 9-12km/s and altitudes 70-120km. The cooperation TsAGI-ONERA Stage 2, TsAGI, 2006.

[64] C. Flament. *Ecoulements de fluide visqueux en déséquilibre chimique et vibrationnel : mModélisation, applications internes et externes*. PhD thesis, Université Paris VI, 1990.

[65] C. Flament, F. Coquel, C. Marmignon, and H. Hollanders. Viscous non equilibrium flow calculation by an implicit finite volume method. AIAA paper 91–0702, 1991.

[66] 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 Paper 2867, NASA, 1989.

[67] P.A. Gnoffo, L.C. Hartung, and R.B. Greendyke. Heating analysis for a Lunar transfer vehicle at near-equilibrium flow conditions. AIAA paper 93–0270, January 1993.

[68] S.K. Godunov. A difference scheme for numerical computation of discontinuous solution of hydrodynamic equations. *Matematicheskii Sbornik*, 47 :271–306, 1959.

[69] T. Gökcen. Computation of nonequilibrium radiating shock layers. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(1) :34–40, January–March 1995.

[70] R.M. Goody and Y.L. Yung. *Atmospheric Radiation*. Oxford University Press, 1989.

[71] V.A. Gorelov, L.A. Kildushova, and A.Y. Kireev. Ionization particularities behind intensive shock waves in air at velocities of 8-15 km/s. AIAA Paper 94–2051, 1994.

[72] V.A. Gorelov, A.Y. Kireev, S.V. Shilenkov, and S.T. Surzhikov. Nonequilibrium radiative heat transfer in conditions of superorbital entry in the Earth's atmosphere. In *Proceedings of International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003. See also : Prediction of Nonequilibrium Ionization and Emission At Superorbital Flight in Air, AIAA–Paper 2004–2380.

[73] R. Gosse and G. Candler. Diffusion model comparisons for direct reentry applications. AIAA paper 2003-3635, 2003.

[74] J.J. Gottlieb and C.P.T. Groth. Assessment of Riemann solvers for unsteady one-dimensional inviscid flows of perfect gases. *Journal of Computational Physics*, 78 :437–458, 1988.

[75] R.B. Greendyke and L.C. Hartung. Convective and radiative heat transfer analysis for the FIRE II forebody. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 31(6) :986–992, November–December 1994.

[76] J. Gressier and J.-M. Moschetta. On the pathological behavior of upwind schemes. AIAA paper 98–0110, 1998.

[77] P. Gubernatis. *Ecoulements hypersoniques dissipatifs : modèles physiques et numériques, application aux ondes de choc et aux tuyères bidimensionnelles*. PhD thesis, Université de Provence, 1989.

[78] G. Guelachvili, D. De Villeneuve, R. Farrenq, W. Urban, and J. Verges. Dunham coefficients for seven isotopic species of CO. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 98 :64–79, 1983.

[79] 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.

[80] R.N. Gupta. Navier-Stokes and viscous shock-layer solutions for radiating hypersonic flows. AIAA paper 87–1576, June 1987.

[81] R.N. Gupta. Viscous shock-layer study of thermochemical nonequilibrium. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 10(2) :257–266, 1996.

[82] R.N. Gupta, J.N. Moss, and J.M. Price. Assessment of thermochemical nonequilibrium and slip effects for orbital reentry experiment OREX. AIAA paper 96–1859, 1996.

[83] C.F. Hansen and S.P. Heins. A review of the thermodynamic, transport, and chemical rate properties of high-temperature air. NACA TN 4359, 1958.

[84] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49(3) :357–393, 1983.

[85] A. Harten, P. D. Lax, and B. Van Leer. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Rev.*, 25 :35–61, 1983.

[86] L.C. Hartung. Development of a nonequilibrium radiative heating prediction method for coupled flowfield solutions. AIAA paper 91–1406, 1991.

[87] L.C. Hartung. Hypersonic nonequilibrium flow over the FIRE II forebody at 1634 sec. Technical Memorandum 109141, NASA, July 1994.

[88] L.C. Hartung. Predicting radiative heat transfer in thermochemical nonequilibrium flow fields, theory and user's manual for the LORAN code. Technical Memorandum 4564, NASA, September 1994.

[89] L.C. Hartung and H.A. Hassan. Radiation transport around axisymmetric blunt body vehicles using a modified differential approximation. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 7(2) :220–227, April–June 1993.

[90] L.C. Hartung, R.A. Micheltree, and P.A. Gnoffo. Coupled radiation effects in thermochemical nonequilibrium shock-capturing flowfield calculations. AIAA paper 92–2868, 1992.

[91] L.C. Hartung, R.A. Mitcheltree, and P.A. Gnoffo. Stagnation point nonequilibrium radiative heating and the influence of energy exchange models. AIAA Paper 91–0571, 1991.

[92] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and R.B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquid*. John Wiley & Sons, 1954.

[93] HITRAN special issue. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 96(2), December 2005.

[94] 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.

[95] N. Jacquinet-Husson, A. Chédin, N.A. Scott, and V.A. Chursin. The GEISA spectroscopic database system revisited for IASI direct radiative transfer modelling. *Atmospheric and Oceanic Optics*, 16(3) :256–282, 2003.

[96] R.L. Jaffe. Rate constants for chemical reactions in high-temperature nonequilibrium. AIAA paper 85–1038, 1985.

[97] R.L. Jaffe. The calculations of high-temperature equilibrium and nonequilibrium specific heat data for N_2, O_2, NO. AIAA paper 89–1736, 1989.

[98] S. Jin and Z. Xin. The relaxation schemes for systems of conservation laws in arbitrary space dimension. *Comm. Pure. Appl. Math.*, 48 :235–276, 1995.

[99] I.A. Johnston. *Simulation of Flow Around Hypersonic Blunt-Nosed Vehicles for the Calibration of Air Data Systems*. PhD thesis, University of Queensland, 1999.

[100] V. Joly, F. Coquel, C. Marmignon, W. Aretz, S. Metz, and H. Wilhelmi. Numerical modelling of heat transfer and relaxation in nonequilibrium air at hypersonic speeds. *La Recherche Aérospatiale*, 3 :219–234, 1994.

[101] S. Jonas, H.-H. Fruehauf, and O. Knab. Fully coupled approach to the calculation of nonequilibrium hypersonic flows using a Godunov type method. In *Proc. of 1st European Computational Fluid Dynamics Conference, Brussels (Belgium)*, September 1992.

[102] E. Josyula and W.F. Bailey. Governing equations for weakly ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. AIAA Paper 2002–2228, 2002.

[103] S. Kanne, T.H. Gogel, M. Dupuis, and E.W. Messerschmid. Simulation of radiation experiments on reentry vehicles using the new radiation database PARADE. AIAA Paper 97–2562, 1997.

[104] W. Karzas and R. Latter. Electron radiative transition in a Coulomb field. *Astrophysical Journal Supplement*, pages 6–167, 1961.

[105] R. D. Kay and T. Gogel. Coupled radiation computations for the comet nucleus sample return mission. AIAA Paper 94–2091, 1994.

[106] R.D. Kay, T.P. Roberts, T.H. Gogel, and E.W. Messerschmid. Computation of high velocity 2D-axisymmetric re-entry flows with consideration of radiation. In *Proceedings of Second European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, ESA SP–367, Noordwijk, The Nederlands*, November 1994.

[107] S.-S. Kim, C. Kim, O.-H. Rho, and S.K. Hong. Cure for shock instability : Development of an improved Roe scheme. AIAA paper 2002–0548, 2002.

[108] O. Knab, T.H. Gogel, H.-H. Frühauf, and E.W. Messerchmid. CVCV-model validation by means of radiative heating calculations. AIAA paper 95–0623, January 1995.

[109] K. Koura. Electron and vibrational energy conservation equations for Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles. *AIAA journal*, 25(1), January 1987.

[110] F. Lagoutière. *Modélisation mathématique et résolution numérique de problèmes de fluides compressibles à plusieurs constituants*. Phd thesis, Université Paris VI, 2000.

[111] L. Landau and E. Teller. Theory of sound dispersion. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 10, 1936.

[112] B. Larrouturou. On upwind approximations of multi-dimensional multi-species flows. *Computational Methods in Applied Sciences*, 1992.

[113] C. Laux. Optical diagnostics and radiative emission of air plasmas. HTGL Report T–28, August 1993. Stanford University PhD Thesis.

[114] P.D. Lax. Hyperbolic systems of conservation laws, II. *Comm. Pure Appl. Math.*, 10 :537–566, 1957.

[115] P.D. Lax. *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*. CBMS Monograph, 1973.

[116] J.-H. Lee. Basic governing equations for the flight regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles. AIAA Paper 84-1729, 1984.

[117] P. G. LeFloch. Shock waves for non-linear hyperbolic systems in non-linear form. IMA Preprint series 593, University of Minnesota, 1989.

[118] M.-S. Liou. A sequel to AUSM : AUSM$^+$. *Journal of Computational Physics*, 129 :364–382, 1996.

[119] M.-S. Liou. Mass flux schemes and connection to shock instability. *Journal of Computational Physics*, 160 :623–648, 2000.

[120] M.-S. Liou, B. van Leer, and J.-S. Shuen. Splitting of inviscid fluxes for real gases. *Journal of Computational Physics*, 87 :1–24, 1990.

[121] K. Lobb. Experimental measurement of shock detachment distance on sphere fired in air at hypervelocities. In W. C. Nelson, editor, *Proc. of the AGARD-NATO in The High Temperature Aspect of Hypersonic Flow*. Pergamon Press, 1962.

[122] F.C. Lockwood and N.G. Shah. A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. In *Proceedings of Eighteenth International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute, 1981.

[123] S.A. Losev, P.V. Kozlov, L.A. Kuznetsova, V.N. Makarov, Yu ;V. Romanenko, S.T. Surzhikov, and G.N. Zalogin. 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.

[124] C. Marmignon and F. Coquel. Simulation numérique d'écoulements en déséquilibre thermochimique et faiblement ionisés. TRS 14/1929 AY, ONERA, 1997.

[125] P.V. Marrone and C.E. Treanor. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels. *The Physics of Fluids*, 6(9), 1963.

[126] E.A. Mason and L. Monchick. Heat conductivity of polyatomic and polar gases. *The Journal of Chemical*, 36(6) :1622–1640, 1962.

[127] J. Masurel, G. Jobard, and X. Bouis. Heat flux study and pressure measurements on ARD and Soyuz vehicles in perfect gas conditions in the S4MA wind tunnel. Technical Report PV 4/8015 GY 400 G, ONERA, 1996.

[128] R. Matsuzaki. Effect of free electron and rotational coupling on electron temperature in ionized nonequilibrium flow of air. AIAA paper 88–2669, 1988.

[129] R. Matsuzaki and N. Hirabayashi. Study of chemical reaction models for high enthalpy flow of air. Technical Report NAL TR-982, 1988.

[130] F. Mazoué, J. Graciano, L. Tournebize, and L. Marraffa. Updated analysis of the radiative heat flux during the entry of the Huygens probe in the Titan atmosphere. In *Proceedings of International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[131] M.H. Mentzoni and R.V. Row. Rotational excitation and electron relaxation in nitrogen. *Physical Review*, 130(6), 1963.

[132] R.C. Millikan and D.R. White. Systematics of vibrational relaxation. *Journal of Chemical Physics*, 39(12) :3209–3213, 1963.

[133] R.A. Mitcheltree. A parametric study of dissociation and ionization models at 12 km/sec. AIAA paper 91–1368, 1991.

[134] R.A. Mitcheltree and P.A. Gnoffo. Thermochemical nonequilibrium issues for Earth reentry of Mars missions. AIAA paper 90–1698, 1990.

[135] M.F. Modest. *Radiative Heat Transfer, 2nd edition.* McGraw Hill Inc., 1993.

[136] L. Monchick, K.S. Yun, and E.A. Mason. Formal kinetic theory of transport phenomena in polyatomics gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 39(3) :654–669, 1963.

[137] P. Nagel. Développement de méthodes de calcul des intensités et flux radiatifs autour d'un véhicule hypersonique. Rapport de stage, ONERA/Université de Stuttgart, 2005.

[138] P.D. Neufeld, A.R. Janzen, and R.A. Aziz. Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals for the Lennard-Jones (12-6) potential. *The Journal of Chemical Physics*, 57(3), 1972.

[139] W.E. Nicolet. User's manual for the generalized radiation transfer code (RAD/EQUIL). Technical Report CR–116353, NASA, 1969.

[140] NIST atomic spectra database. http ://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_ asd.

[141] W.B. Olstad. Stagnation-point solutions for inviscid radiating shock layers. Technical Note TN D–5792, NASA, June 1970.

[142] D.R. Olynick, W.D. Henline, L.C. Hartung, and G.V. Candler. Comparison of coupled radiative flow solutions with project FIRE II flight data. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 9(4) :586–594, October–December 1995. See also AIAA paper 94-1955.

[143] P. Omaly, W. Dieudonné, and M. Spel. Synthesis and analys for test case 3. In *Proceedings of ESA 2nd International Workshop on Radiation of High Temperature Gas in Planetary Atmosphere Entry, ESA SP–583, Porquerolles, France*, November 2004.

[144] C. Park. Calculation of nonequilibrium radiation in the flight regimes of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles. In H.F. Nelson, editor, *Thermal Design of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles : Progress in Astronautics and Aeronautics*, volume 96, pages 395–418. American Institute of Aeronautics and Astronautics, New York, NY, 1985. See also AIAA paper 84–0306.

[145] C. Park. Nonequilibrium air radiation (NEQAIR) program : User's manual. Technical Memorandum 86707, NASA, Feb. 1985.

[146] C. Park. On convergence of computation of chemically reacting flows. AIAA paper 85–0247, 1985.

[147] C. Park. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air. AIAA paper 87–1574, 1987.

[148] C. Park. A review of reaction rates in high temperature air. AIAA paper 89–1740, 1989.

[149] C. Park. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. Wiley Interscience, 1990.

[150] C. Park. Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions, I : Earth entries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 7(3), 1993.

[151] C. Park, J.T. Howe, R.L. Jaffe, and G.V. Candler. Chemical-kinetic problems of future NASA missions. AIAA paper 91–0464, January 1991.

[152] C. Park, J.T. Howe, R.L. Jaffe, and G.V. Candler. Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions, II : Mars entries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 8(1), 1994.

[153] C. Park and S.-H. Lee. Validation of multi-temperature nozzle flow code NOZNT. AIAA paper 93–2862, 1993.

[154] C. Park and G.P. Menees. Odd nitrogen production by meteoroids. *Journal of Geophysical Research*, 83 :4029–4135, 1978.

[155] C. Park and F.S. Milos. Computational equations for radiating and ablating shock layers. AIAA paper 90–0356, January 1990.

[156] B. Pfeiffer, M. Fertig, M. Winter, and M. Auweter Kurtz. PARADE a program to calculate the radiation of atmospheric re-entry in different atmospheres. In *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[157] J.D. Ramshaw and C.H. Chang. Ambipolar diffusion in two temperature multicomponent plasma. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 13(3) :489–498, 1993.

[158] P. Rivière, A. Soufiani, and M.-Y. Perrin. Line by line and statistical narrow-band calculations of radiative transfer in some atmospheric entry problems. In *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[159] T.P. Roberts. Modelling gas/surface interaction processes of ablating wall boundaries associated with planetary entry. In *Proceedings of Second European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, ESA SP–367, Noordwijk, The Nederlands*, November 1994.

[160] P. L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference scheme. *Journal of Computational Physics*, 43(2) :357–372, 1981.

[161] L.S. Rothman, R.R. Gamache, R.H. Tipping, C.P. Rinsland, M.A.H. Smith, D. Chris Benner, V. Malathy Devi, J.M. Flaud, C. Camy-Peyret, A. Perrin, A. Goldman, S.T. Massie, L.R. Brown, and R.A. Toth. The HITRAN molecular data base : editions of 1991 and 1992. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 48 :243–257, 1992.

[162] O. Rouzaud, J. Hylkema, J.-L. Vérant, and L. Tessé. Development of the PHARAON platform and ONERA numerical solvers for gas radiation. In *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[163] T. Sakai and K. Sawada. Calculation of nonequilibrium radiation from a blunt-body shock layer. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 15(1) :99–105, 2001.

[164] T. Sakai, T. Tsuru, and K. Sawada. Computation of hypersonic radiating flowfield over a blunt body. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 15(1) :91–98, 2001.

[165] D.G. Samaras. *Theory of Ion Flow Dynamics*. Dover Publications Inc. New York, 1971.

[166] C.J. Schexnayder, J.S. Evans, and P. Huber. Comparison of theoretical and experimental electron density for Ram C flights. Technical Report SP–252, NASA, 1970.

[167] S. Séror. *Extension de l'approche déficitaire pour le calcul des couches limites hypersoniques en déséquilibre chimique et vibrationnel. Modélisation du couplage Vibration/Réactions d'échange*. PhD thesis, SupAero Toulouse, 1997.

[168] O.P. Shatalov. Recommended data on rate constants of physical and chemical processes in N-O atoms system. Technical report, Moscow State University - Russia, Institut of Mechanics AVOGADRO Center.

[169] J. S. Shuen, M. S. Liou, and B. van Leer. Splitting of inviscid fluxes for real gases. Technical Memorandum 100856, NASA, 1988.

[170] R. Siegel and J.R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Taylor and Francis Washington DC, 3rd edition, 1992.

[171] A.J. Smith. ESA plasma radiation database (PARADE). Development history, status, current developments and future prospects. In *Proceedings of International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[172] A.J. Smith, T. Gogel, P. Vandevelde, and L. Marraffa. PlasmA RAdiation DatabasE PARADE final report ESTEC contract 11148/94/nl/fg. ESA Contract Report TR28/96, Fluid Gravity Engineering Ltd, 1996.

[173] M.W. Smith, W.L. Wiese, and B.M. Glennon. Atomic transition probabilities : Hydrogen through neon. NSRDS 4, NBS, 1966.

[174] J. Steger and R.W. Warming. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamics equations with application to finite difference methods. NASA TM–78605, 1979.

[175] Y.V. Stupochenko, S.A. Losev, and A.I. Osipov. *Relaxation in Shock Waves*. Springer-Verlag, 1967.

[176] S.T. Surzhikov. Database of atomic lines for radiative gas dynamics models. AIAA paper 2002–2898, 2002.

[177] S.T. Surzhikov. Radiation, modeling, spectral data. In *Lecture Series 2002–07, Physico-chemical Models for High Enthalpy and Plasma Flows, von Karman Institute for Fluid Dynamics*, 4–7 June 2002.

[178] S.T. Surzhikov. Computing system for solving radiative gasdynamic problems of entry and reentry space vehicles. In *Proceedings of the 1st International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry, ESA SP–533, Lisbon, Portugal*, October 2003.

[179] S.T. Surzhikov. TC3 : Convective and radiative heating of MSRO for simplest kinetic models. In *Proceedings of ESA 2nd Radiation Workshop, ESA SP–583, Porquerolles, France*, November 2004.

[180] S.T. Surzikov. Numerical simulation of heat radiation generated by entering space vehicle. AIAA paper 2004–2379, 2004.

[181] S.T. Surzikov, I.V. Sharikov, V.A. Gorelov, and A.Yu. Kireev. Aerothermodynamic model of a martian descent space vehicle. In *Proc. of the European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, 2005.

[182] G.W. Sutton and A. Sherman. *Engineering Magnetohydrodynamics*. McGraw-Hill Series In Mechanical Engineering, 1965.

[183] K. Sutton. Air radiation revisited. AIAA paper 84–1733, June 1984.

[184] J. Taine. *Rayonnement Thermique des Gaz et des Particules*. Document support de cours. Centrale Formation - ICTM, 2001.

[185] J. Taine and J.-P. Petit. *Transferts thermiques - Mécanique des fluides anisothermiques*. Dunod Paris, 3ème edition, 2003.

[186] J. Taine and A. Soufiani. Gas IR radiative properties : from spectroscopic data to approximate models. *Advances in Heat Transfer*, 33 :295–414, 1999.

[187] J.C. Taylor, A.B. Carlson, and H.A. Hassan. Monte Carlo simulation of reentry flows with ionization. AIAA paper 92–493, 1992.

[188] J.C. Taylor, A.B. Carlson, and H.A. Hassan. Monte Carlo simulation of radiating reentry flows. AIAA paper 93–2809, 1993.

[189] J.C. Taylor, D.R. Olynick, and H.A. Hassan. Upwind techniques for ionized flows. AIAA paper 94–1957, 1994.

[190] G. Tchuen. *Modélisation et simulation numérique des écoulements à haute enthalpie : influence du déséquilibre électronique*. PhD thesis, Université d'Aix-Marseille I, 2003. See also AIAA paper 2004–2462.

[191] G. Tchuen, 2004. Private communication.

[192] G. Tchuen, Y. Burtschell, and D.E. Zeitoun. Numerical prediction of weakly ionized enthalpy flow in thermochemical nonequilibrium. AIAA paper 2004–2462, 2004.

[193] L. Tessé. *Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2001.

[194] 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.

[195] L. Tessé, F. Dupoirieux, B. Zamuner, and J. Taine. Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward Monte Carlo methods and a k-correlated approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45 :2797–2814, 2002.

[196] F.. Thivet. *Modélisation et calcul d'écoulements hypersoniques en déséquilibre chimique et thermodynamique*. PhD thesis, Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique - Combustion (EM2C), September 1992.

[197] F. Thivet, M.-Y. Perrin, and S. Candel. A unified nonequilibrium model for hypersonic flows. *Physics of Fluid A*, 3(11) :2799–2812, 1991.

[198] R. Turpault. *Modélisation, approximation numérique et applications du transfert radiatif en déséquilibre spectral couplé avec l'hydrodynamique*. PhD thesis, Université Bordeaux I, 2003.

[199] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. V - a second order sequel to Godunov's method. *Journal of Computational Physics*, 32 :101–136, 1979.

[200] B. van Leer. Flux vector splitting for the Euler equations. In 8^{th} *International Conference in Numerical Methods in Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 1982.

[201] W.G. Vincenti and C.H. Jr. Kruger. *Introduction to Physical Gas Dynamics*. Robert E. Krieger Publishing Company, 1982.

[202] R. Viskanta. Overview of computational radiation transfer methods for combustion systems. In *Proceedings of 3rd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Banff, Canada*, May 2003.

[203] Y. Wada and M.-S. Liou. A flux splitting scheme with high-resolution and robustness for discontinuities. AIAA paper 94–0083, 1994.

[204] Y. Wada and M.-S. Liou. An accurate and robust flux splitting scheme for shock and contact discontinuities. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18 :633–657, 1997.

[205] L. Walpot. *Development and Application of a Hypersonic Flow Solver*. PhD thesis, Delft University, 2002.

[206] D.V. Walters and R.O. Buckius. Rigorous development for radiation heat transfer in nonhomogeneous absorbing, emitting and scattering media. *Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(12) :3323–3333, 1992.

[207] K.J. Weilmuenster and P.A. Gnoffo. Solution strategies and heat transfer calculations for three-dimensional configurations at hypersonic speeds. AIAA paper 92–2921, 1992.

[208] C.R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 18(4), 1950.

[209] J. William. Etude des processus physico-chimiques dans les écoulements détendus à haute enthalpie : Application à la soufflerie à arc F4. Note technique NT 2000–5, ONERA, 2000.

[210] J. Wilson. Ionization rate of air behind high-speed shock waves. *The Physics of Fluids*, 9(10) :1913–1921, October 1966.

[211] K.L. Wray. Chemical kinetics of high temperature air. In F.R. Ridell, editor, *Hypersonic Flow Research, Progress in Astronautics and Rockestry*, volume 7, pages 181–204. Academic Press, New York, 1962.

[212] H.C. Yee. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *Journal of Computational Physics*, 68 :151–179, 1987.

[213] J.M. Yos. Transport properties of nitrogen, oxygen and air to 30,000K. Technical Memorandum RAD TM–63–7, March 1963.

[214] Y.B. Zel'dovich and Y.P. Raizer. *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. Academic Press, 1966.

Prise en compte de l'ionisation et du rayonnement dans la modélisation des écoulements de rentrée terrestre et martienne

Résumé :
Ce travail porte sur la simulation numérique des écoulements de rentrée martienne et terrestre. Parmi les phénomènes physico-chimiques complexes mis en jeu, les points abordés concernent plus particulièrement l'ionisation du gaz dans la couche de choc et l'effet du rayonnement sur les flux thermiques pariétaux. Le traitement de l'ionisation repose sur l'approche de Coquel-Marmignon permettant d'écrire le système d'équations sous forme conservative. L'approche numérique est basée sur le schéma de Roe et elle est validée sur trois cas d´épreuve pour des vitesses allant jusqu'à $11km/s$. Un schéma de relaxation, plus simple de mise en œuvre et mieux adapté, est également proposé. Le traitement du rayonnement dépend du cas d'application. Pour les applications terrestres, le modèle de propriétés radiatives est de type raie-par-raie et la méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif est la méthode des plans tangents. Les champs hydrodynamique et radiatif sont couplés par une méthode itérative. La comparaison avec les mesures en vol de la campagne FIRE II montre que l'approche est satisfaisante, excepté lorsque l'approximation liée aux plans tangents n'est plus valable (faible rayon de nez, loin de la région d'arrêt). Au point d'arrêt, le rayonnement participe jusqu'à 40% à l'échauffement pariétal. Pour les applications martiennes, le modèle de propriétés radiatives, limité aux contributions des espèces CO et CO_2 dans l'infrarouge, est de type statistique à bandes étroites et la méthode numérique de type Monte Carlo. La méthode de couplage hydrodynamique/rayonnement est similaire au cas terrestre. Les calculs, menés sur un véhicule générique typique de la mission Mars Premier, montrent qu'au niveau de l'arrière-corps, le rayonnement contribue de manière significative à l'échauffement pariétal.
Mots-clés :
hypersonique, rentrée atmosphérique, écoulement faiblement ionisé, rayonnement, schéma de Roe, schéma de relaxation

Ionisation and Radiation Modeling for Simulation of Earth and Mars Entry Flows

Abstract :
This work deals with numerical simulation of entry probes in martian and earth atmospheres. Among the complex physico-chemical phenomena occuring in such flows, the issues adressed herein concern in particular ionisation in the shock layer and radiation effect on thermal fluxes at the wall. The treatment of ionisation is based on Coquel-Marmignon approach, which enables to write the equation system under conservative form. The numerical approach is based on Roe's scheme and is validated on three testcases for velocities reaching $11km/s$. A relaxation scheme, simpler to implement and better adapted, is also proposed. The treatment of radiation depends on the application case. For Earth entries, the radiative properties model is based on a line-by-line approach and the radiative transfer method follows the tangent slab approximation. Hydrodynamic and radiative fields are coupled using an iterative method. Comparison with FIRE II flight data shows that the approach is satisfactory, except when the tangent slab approximation is no more valid (low nose radius, away from the stagnation region). At stagnation point, radiation participates up to 40% of the wall heating. For martian entries, the radiative properties model is limited to contributions of CO and CO_2 species in the infrared part of the spectrum using a Statistical Narrow Band model. Radiative transfers are computed using a Monte Carlo method. Hydrodynamic/radiation coupling follows the same approach as for the Earth case. Calculations, done on a generic vehicle geometry typical of Mars Premier mission, show that on the rear part, radiation contributes significantly to the wall heating.
Keywords :
hypersonic flow, atmospheric reentries, weakly ionised gas, radiation, Roe's scheme, relaxation scheme