



**HAL**  
open science

# Modélisation des écoulements en régime hypersonique raréfié : application aux satellites à très basse orbite et aux objets en phase de rentrée atmosphérique

Marc Schouler

► **To cite this version:**

Marc Schouler. Modélisation des écoulements en régime hypersonique raréfié : application aux satellites à très basse orbite et aux objets en phase de rentrée atmosphérique. Sciences de l'ingénieur [physics]. UNIVERSITE DE TOULOUSE, 2021. Français. NNT : . tel-03552778

**HAL Id: tel-03552778**

**<https://hal.science/tel-03552778v1>**

Submitted on 2 Feb 2022

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

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



Université  
de Toulouse



# THÈSE

En vue de l'obtention du

**DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE**

Délivré par : *l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE)*

---

---

Présentée et soutenue le 07/12/2021 par :

**Marc Schouler**

**Modélisation des écoulements en régime hypersonique raréfié :  
application aux satellites à très basse orbite et aux objets en phase de  
rentrée atmosphérique**

---

---

## JURY

IRINA GRAUR MARTIN, Professeur des Universités - IUSTI

PIETRO CONGEDO, Directeur de Recherche - INRIA

THIERRY MAGIN, Professeur - VKI

ARNAUD BULTEL, Maître de Conférences - CORIA

LUC MIEUSSENS, Professeur des Universités - IMB

YSOLDE PRÉVEREAUD, Docteur - ONERA

CÉLINE BARANGER, Docteur - CEA/CESTA

CHRISTOPHE PERIER, Expert - DGA

FRANCK HERVY, Docteur - DGA

Rapporteur

Rapporteur

Président du jury

Examineur

Directeur de thèse

Co-directrice de thèse

Membre invité

Membre invité

Membre invité

---

## École doctorale et spécialité :

*ED AA : Dynamique des fluides et Mathématiques appliquées*

## Unité de Recherche :

*Equipe d'accueil : ISAE-ONERA EDyF (ONERA-DMPE, Toulouse)*

## Directeur de Thèse :

*Luc Mieussens (Professeur, HDR - IMB, Bordeaux)*

*Ysolde Prévereaud (Docteur - ONERA/DMPE, Toulouse)*

## Rapporteur :

*Irina Graur Martin (Professeur des Universités - IUSTI)*

*Pietro Congedo (Directeur de Recherche - INRIA)*



---

# Remerciements

Après ces trois années de thèse passées à l'ONERA, je tiens à remercier chaleureusement mes encadrants Ysolde Prévèreaud et Luc Mieussens pour leur patience, leur gentillesse, et leur disponibilité exceptionnelles. Ce fut un réel plaisir d'avoir découvert à leurs côtés un nouvel univers et d'avoir eu la chance de bénéficier d'un accompagnement d'une telle qualité.

Recherche rime aussi avec financement. Dans ce cadre, je remercie la DGA d'avoir cofinancé cette thèse et plus particulièrement Frank Hervy et Christophe Perier pour l'intérêt porté à ces travaux. Je suis également reconnaissant à Irina Graur-Martin et Pietro Congedo qui ont accepté de rapporter ce manuscrit, ainsi qu'à Thierry Magin, Arnaud Bultel et Céline Baranger qui ont complété mon jury de soutenance.

Sans omettre l'importance de l'environnement scientifique dans lequel s'insère cette thèse, je souhaite exprimer toute ma gratitude aux personnes du DMPE qui ont influencé de près ou de loin l'avancée de mes travaux. A ce titre, je remercie tout particulièrement Laurent Escande, Philippe Reulet et Loïc Van Ghele pour leur disponibilité et leur aide précieuse apportée dans le cadre du travail mené sur l'IXV. Je suis également reconnaissant envers Jean-Luc Vérant d'avoir suivi avec tant d'enthousiasme et ce malgré l'étendue des responsabilités qui lui incombent, l'avancée de mes travaux. Un grand merci à Jean-Michel Lamet, Nicolas Dellinger et Yann Dauvois pour les échanges et les éclairages qu'ils m'ont apportés pendant cette période.

En complément des membres de mon département d'accueil, je remercie Nathalie Bartoli et Sylvain Dubreuil du DTIS pour m'avoir aiguillé dans les méandres du Machine Learning et des techniques d'apprentissage. Leur expertise, leur bienveillance et leur disponibilité m'ont permis d'appréhender plus sereinement la dernière partie de ce travail de thèse.

Nonobstant les aléas sanitaires, la conduite de ces travaux tient aussi à la qualité de l'environnement social quotidien. Je salue donc ici l'ensemble des personnes rencontrées dans le cadre de cette thèse. Chacune à sa manière a contribué à en faire une période inoubliable. Il serait difficile d'en dresser la liste exhaustive mais mes pensées vont tout particulièrement à Nicolas Perron, Pierre Doublet, Virgile Charton, Swann Thuillet, Thomas Alary, Ghislain Blanchard, Damien Toussaint, Adrien Quetil, Jean-François Poustis, Baptiste Thoraval, Tanguy Theulier, Remi Harry, Béatrice Fragge, Pierre Lavoie et Matthias Averseng.

Avec émotion, j'adresse également mes plus sincères remerciements à Vincent Drouet qui a la particularité d'appartenir aux trois catégories susmentionnées. Je suis fier d'avoir, d'une certaine manière, marché sur ses traces.

Loin d'oublier ceux qui constituent mes soutiens depuis la première heure, je voudrais terminer en remerciant Hannah, mon frère, ma soeur et mes parents pour leur confiance et leur soutien sans faille.



---

# Publications et communications

## Publications dans des journaux à comité de lecture

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, Survey of flight and numerical data of hypersonic rarefied flows encountered in Earth orbit and atmospheric reentry, *Progress in Aerospace Sciences*, 2020, Vol 118.

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, IXV post-flight reconstruction and analysis of the aerothermodynamic measurements along the rarefied portion of the reentry trajectory, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2021, Vol 178.

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, Atmospheric model effect on flight data reconstruction : application to the early phase of the IXV reentry, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, in press.

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, Machine Learning based reduced models for the aerothermodynamic and aerodynamic wall quantities in hypersonic rarefied conditions, in preparation.

## Communications lors de conférence et séminaires

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, *Modélisation d'écoulements hypersoniques raréfiés par DSMC*, séminaire CEA/CESTA (2021).

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, *Analysis of the Intermediate eXperimental Vehicle (IXV) Rarefied Aerothermodynamics*, Pre-RGD32 (2021).

**M. Schouler**, Y. Prévereaud, L. Mieussens, *Modèles réduits des grandeurs aérodynamiques et aérothermodynamique en conditions hypersoniques raréfiées*, séminaire HERA (2021).

## Distinction

Best Student Oral Presentation Award (Pre-RGD32 2021), pour la présentation *Analysis of the Intermediate eXperimental Vehicle (IXV) Rarefied Aerothermodynamics*.



# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>v</b>
<b>Table des figures</b>	<b>xi</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xvii</b>
<b>Liste des symboles</b>	<b>xxi</b>
<b>Introduction</b>	<b>23</b>
<b>I Contexte, rappels théoriques et introduction à la méthode DSMC</b>	<b>27</b>
<b>1 Physique des écoulements hypersoniques de rentrée atmosphérique</b>	<b>29</b>
1 Rentrée atmosphérique : définition et caractère multi-physique . . . . .	29
2 Phénomènes physiques caractéristiques des écoulements hypersoniques . . . . .	30
2.1 Phénomènes thermo-chimiques . . . . .	30
2.2 Entre équilibre et déséquilibre thermo-chimiques . . . . .	31
2.3 Les phénomènes d'interactions gaz-surface . . . . .	32
2.3.1 Interactions chimiques . . . . .	33
2.3.2 Interactions physiques . . . . .	33
3 Paramètres de similitudes pour la classification des régimes de rentrée . . . . .	34
3.1 Nombre de Mach et régime de vitesse . . . . .	34
3.2 Nombre de Knudsen et niveau de raréfaction . . . . .	35
3.3 Reynolds, Mach et Knudsen : des paramètres complémentaires . . . . .	36
4 Les écoulements hypersoniques raréfiés . . . . .	37
4.1 Topologie des écoulements raréfiés . . . . .	38
4.2 Écoulements hypersoniques à haute altitude : entre raréfaction et déséquilibre . . . . .	38
4.3 Equations physiques pour la description des écoulements raréfiés . . . . .	40
5 Méthode numérique choisie et phénomènes considérés . . . . .	41
<b>2 Dynamique des gaz hors équilibre</b>	<b>43</b>
1 La théorie cinétique des gaz : rappel général . . . . .	43
1.1 Paramètres macroscopiques . . . . .	44
1.2 Potentiels intermoléculaires et paramètres de collision . . . . .	45
2 Vers l'équation de Boltzmann . . . . .	48
2.1 Distribution de vitesse . . . . .	48
2.2 Equation de Boltzmann et théorème-H . . . . .	50
2.3 Analyse de Chapman-Enskog et conséquences . . . . .	53
2.4 Généralisation aux mélanges polyatomiques . . . . .	54
3 Réactions chimiques et transferts d'énergie . . . . .	56
3.1 Modes d'énergie internes et distributions de Boltzmann . . . . .	56
3.2 Déséquilibre thermo-chimique et phénomènes de relaxation . . . . .	58
3.2.1 Relaxation des modes d'énergie . . . . .	59
3.2.2 Relaxation chimique . . . . .	59
4 Résumé . . . . .	61

<b>3</b>	<b>Modélisation DSMC des écoulements hypersoniques raréfiés</b>	<b>63</b>
1	Principes fondamentaux et métriques usuelles	64
2	Collisions élastiques : modèles et phénomènes de transport	65
2.1	Probabilité de collision	65
2.2	Potentiel interatomique IPL et modèle de collision HS	66
2.3	Modèle de collision VHS	67
2.4	Le modèle de collision VSS	68
3	Collisions inélastiques : le modèle de Borgnakke-Larsen	69
3.1	Le modèle Borgnakke-Larsen pour les transferts R-T	70
3.2	Le modèle Borgnakke-Larsen pour les transferts V-T	72
3.3	Remarques sur le modèle Borgnakke-Larsen	72
4	Collisions inélastiques : procédure de sélection et modèles de relaxation thermique	73
4.1	Procédure de sélection	73
4.2	Nombre de collisions et probabilité de collision inélastique	74
4.3	Modèles de relaxation thermique	74
5	Modèles de relaxation chimique	75
5.1	Modèles de relaxation chimique : Le modèle TCE	75
5.1.1	Réactions de dissociation	75
5.1.2	Procédure de redistribution d'énergie post-dissociation	76
5.1.3	Réactions d'échange	77
5.2	Modèles de relaxation chimique : Le modèle Q-K	77
5.2.1	Procédure générale de redistribution d'énergie post-reaction	78
5.3	Modèles en voie de développement	79
6	Interactions gaz-surface	81
6.1	Généralités	81
6.2	Coefficient d'accommodation et modèle de Maxwell	82
6.3	Modèle Cercignani, Lampis et Lord	83
6.4	Comparaison et influence des modèles	83
7	Résumé	84
<b>II</b>	<b>Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés par DSMC</b>	<b>87</b>
<b>4</b>	<b>Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés non-réactifs</b>	<b>89</b>
1	SPARTA : modèles et fonctionnalités	89
2	Etude de convergence relative aux métriques de la DSMC	90
2.1	Analyse bibliographique d'études de convergence en DSMC	91
2.2	Etude d'un cylindre infini	92
3	Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés non-réactifs	98
3.1	Cas d'une plaque plane	98
3.1.1	Présentation du cas test	98
3.1.2	Analyse des résultats	98
3.2	Cas d'un sphère-cône de 70 degrés	100
3.2.1	Présentation du cas	100
3.2.2	Analyse des résultats	102
4	Résumé	106
<b>5</b>	<b>Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés réactifs - de Mercury à OREX</b>	<b>107</b>
1	Le programme Mercury	108
1.1	Présentation du programme et des vols d'essai Mercury-Atlas	108
1.2	Mercury MA-5 et MA-8 : calcul du flux de chaleur d'arrière corps	109
2	Le programme Apollo	112
2.1	Présentation du programme et du module de commande	112

2.2	Apollo 6 . . . . .	114
2.2.1	Conditions initiales et aux limites et paramètres numériques des simulations DSMC . . . . .	114
2.2.2	Résultats et discussion . . . . .	116
2.3	Apollo AS202 . . . . .	118
2.3.1	Structure du module et instrumentation . . . . .	118
2.3.2	Conditions initiales et aux limites et paramètres numériques des simulations DSMC . . . . .	120
2.3.3	Paramètres numériques des simulations . . . . .	121
2.3.4	Analyse des résultats . . . . .	121
3	La navette spatiale américaine . . . . .	127
3.1	Structure et instrumentation de la navette . . . . .	127
3.2	Calculs DSMC et données de vol . . . . .	128
4	L'Orbital Reentry Experiment - OREX . . . . .	130
4.1	Structure et instrumentation de la capsule . . . . .	130
4.2	Calculs DSMC et données de vol . . . . .	131
5	Résumé . . . . .	133
<b>6</b>	<b>Simulation et analyse post-flight de la portion raréfiée de la rentrée de l'IXV</b> . . . . .	<b>135</b>
1	Présentation de la mission et du véhicule . . . . .	136
1.1	Trajectoire et paramètres de vol . . . . .	136
1.2	Objectifs de la mission . . . . .	137
1.3	Le système de protection thermique . . . . .	138
1.4	L'instrumentation du véhicule . . . . .	138
2	Exploitation des données de vol par méthode inverse . . . . .	140
2.1	Principe de la méthode inverse . . . . .	140
2.2	Application à la rentrée de l'IXV . . . . .	141
2.3	Sensibilité et incertitude de la méthode inverse . . . . .	142
3	Les modèles d'atmosphère : sensibilité et incertitude . . . . .	142
3.1	Les modèles d'atmosphère principaux . . . . .	142
3.2	Sensibilité et incertitude du modèle MSISE-00 . . . . .	144
4	Paramètres numériques pour la simulation de la rentrée de l'IXV en régime raréfié . . . . .	147
4.1	Simulations DSMC . . . . .	147
4.1.1	Paramètres numériques des simulations . . . . .	147
4.1.2	Respect des critères de convergence . . . . .	148
4.2	Simulations CFD . . . . .	151
4.2.1	Description du maillage . . . . .	151
4.2.2	Paramètres numériques du calcul . . . . .	151
5	Analyse des résultats DSMC . . . . .	152
5.1	Analyse de l'écoulement . . . . .	152
5.2	Analyse des résultats aérodynamiques . . . . .	155
5.2.1	Analyse générale . . . . .	155
5.2.2	Analyse de sensibilité au coefficient d'accommodation . . . . .	156
5.2.3	Analyse de sensibilité aux autres paramètres . . . . .	156
5.3	Analyse des résultats aérothermodynamiques . . . . .	159
5.3.1	Analyse générale . . . . .	159
5.3.2	Analyse de sensibilité au coefficient d'accommodation . . . . .	164
5.3.3	Sensibilité aux modèles de relaxation et de cinétique chimique . . . . .	165
5.3.4	Sensibilité au modèle de collision . . . . .	166
5.3.5	Sensibilité aux conditions atmosphériques . . . . .	167
6	Analyse des résultats CFD versus DSMC . . . . .	168
6.1	Comparaison des champs DSMC et CFD à 90km . . . . .	168

6.2	Analyse des résultats aérodynamiques . . . . .	171
6.3	Analyse des résultats aérothermodynamiques . . . . .	172
7	Influence du modèle d'atmosphère sur les grandeurs aérothermodynamiques . . . . .	175
7.1	Le modèle MSIS 2.0 . . . . .	175
7.2	Simulation du flux de chaleur avec le modèle MSIS 2.0 . . . . .	175
7.2.1	Résultats DSMC . . . . .	176
7.2.2	Résultats CFD et cohérence CFD/DSMC . . . . .	176
8	Résumé . . . . .	180
<b>III Développement de modèles réduits pour le régime hypersonique raréfié</b>		<b>183</b>
<b>7</b>	<b>Etat de l'art des modèles analytiques pour le calcul des grandeurs pariétales durant la rentrée</b>	<b>185</b>
1	Typologie des codes de rentrée . . . . .	185
2	Modèles simplifiés pour le calcul des grandeurs pariétales : méthodes par panneaux . . . . .	186
2.1	Méthodes par panneaux : grandeurs et conventions . . . . .	186
2.2	Formulations pour le régime transitionnel . . . . .	187
2.3	Formulations pour le régime moléculaire libre . . . . .	191
2.4	Modèles en régime continu . . . . .	194
2.4.1	Flux de chaleur au point d'arrêt . . . . .	194
2.4.2	Distribution du flux de chaleur . . . . .	196
2.4.3	Coefficients aérodynamiques . . . . .	196
2.5	Limites des méthodes par panneaux en régime transitionnel . . . . .	197
3	Méthodes avancées pour le calcul des grandeurs pariétales . . . . .	200
3.1	Méthodes géométriques . . . . .	200
3.2	Méthodes de Falchi . . . . .	201
3.3	Méthodes basées sur l'apprentissage statistique . . . . .	202
4	Résumé . . . . .	207
<b>8</b>	<b>Développement de modèles réduits AED et ATD</b>	<b>209</b>
1	Méthodes d'apprentissage statistique pour le calcul rapide de grandeurs pariétales . . . . .	209
1.1	Entraînement du modèle : base de données et plan d'expériences . . . . .	210
1.2	Le krigeage . . . . .	212
1.2.1	Krigeage sans bruit . . . . .	212
1.2.2	Krigeage bruité . . . . .	216
1.3	Les réseaux de neurones . . . . .	217
1.3.1	Fondamentaux des réseaux de neurones . . . . .	217
1.3.2	Concepts avancés des réseaux de neurones . . . . .	221
2	Développement de modèles réduits pour les grandeurs d'arrêt . . . . .	226
2.1	Choix des variables de design . . . . .	226
2.2	Construction de la base de données 2D-axisymétrique . . . . .	227
2.2.1	Génération du plan d'expériences . . . . .	227
2.2.2	Simulation numérique du plan d'expériences . . . . .	229
2.3	Résultats . . . . .	231
2.3.1	Résultats pour le coefficient $C_{p,stag}$ . . . . .	232
2.3.2	Résultats pour le coefficient $C_{h,stag}$ . . . . .	234
3	Développement de modèles réduits pour les distributions . . . . .	238
3.1	Choix des variables de design . . . . .	238
3.2	Construction d'une base de données 3D . . . . .	242
3.2.1	Génération du plan d'expériences . . . . .	242
3.2.2	Simulation numérique du plan d'expériences . . . . .	243
3.3	Résultats . . . . .	246

3.3.1	Résultats pour le coefficient $C_p$ . . . . .	246
3.3.2	Résultats pour le coefficient $C_h$ . . . . .	247
3.3.3	Résultats pour le coefficient $C_f$ . . . . .	248
3.3.4	Discussion . . . . .	249
4	Résumé . . . . .	250
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>257</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>260</b>



# Table des figures

1	Satellite GOCE (crédit ESA). . . . .	23
2	Satellite SLATS (crédit JAXA). . . . .	23
3	Vue d'artiste de satellites VLEO de type skimsat (crédit Thales Alenia Space). . . . .	24
4	Véhicule réutilisable IXV ayant effectué une rentrée atmosphérique en 2015 (crédit Dassault). . . . .	24
1.1	Variation de la composition chimique d'équilibre en fonction de la température d'un modèle d'air à 5 espèces à une pression de 101325 Pa et 1013.25 Pa (extrait de [1]). . . . .	32
1.2	Modèles d'air et domaine d'équilibre/déséquilibre thermochimique pour une sphère de 60 cm de diamètre (extrait de [2]). . . . .	33
1.3	Exemples de trajectoires de rentrée altitude-vitesse avec indication du nombre de Mach (extrait de [3]). . . . .	35
1.4	Température et masse volumique en fonction de l'altitude (modèle <b>US76</b> ). . . . .	37
1.5	Libre parcours moyen, Knudsen unitaire et temps intercollision moyen en fonction de l'altitude (modèle <b>US76</b> ). . . . .	37
1.6	Régimes raréfiés caractérisés par la topologie de la couche de choc lors de la rentrée d'une géométrie émoussée (extrait de [3]). . . . .	39
1.7	Domaines de validité des équations de la mécanique des fluides en fonction du nombre de Knudsen (adapté de [4, 3]). . . . .	40
2.1	Représentation d'une collision binaire dans différents référentiels (reproduit d'après [1]). . . . .	47
2.2	Schéma de collision binaire et sphère d'influence d'une sphère dure de diamètre $d$ . . . . .	48
3.1	Algorithme central de la méthode DSMC (adapté de [1]). . . . .	65
3.2	Comparaison des sections efficaces de viscosité $\sigma_\mu$ et de quantité de mouvement $\sigma_M$ des modèle VHS et VSS en fonction de $\alpha$ (reproduit d'après [1]). . . . .	69
3.3	Influence de différents modèles de réaction sur la température de translation le long de la ligne d'arrêt et la distribution de flux de chaleur pariétale (reproduits d'après [5]). . . . .	80
3.4	Comparaison du flux de chaleur obtenu par DSMC à la surface de la capsule stardust à 80 (c)-(d) et 100 (e)-(f) km à des vitesses de 12.8 (c)-(e) et 6.4 (d)-(f) km/s (extrait de [6]). . . . .	81
3.5	Comparaison des modèles de réflexion (reproduit d'après [7]). . . . .	83
4.1	Etude de sensibilité du coefficient de force axiale $C_A$ au raffinement du maillage et au nombre de particules par cellule ( $1 \equiv 5$ , $2 \equiv 10$ , $3 \equiv 15$ ) à trois altitudes (extrait de [8]). . . . .	91
4.2	Etude de sensibilité des distributions des coefficients de pression $C_p$ (a) et de flux de chaleur $C_h$ (b) en fonction du raffinement du maillage, pour un solveur DSMC et un solveur CFD (extrait de [9]). . . . .	92
4.3	Sensibilité des coefficients $C_p$ (a), $C_h$ (b), $C_f$ (c) au raffinement du maillage pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ). . . . .	95
4.4	Sensibilité des coefficients $C_p$ (a), $C_h$ (b), $C_f$ (c) au pas de temps pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ). . . . .	95
4.5	Sensibilité des coefficients $C_p$ (a), $C_h$ (b), $C_f$ (c) au nombre minimal de particules par cellule pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ). . . . .	96

4.6	Sensibilité des coefficients $C_p$ (a), $C_h$ (b), $C_f$ (c) au raffinement du maillage pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ). . . . .	96
4.7	Sensibilité des coefficients $C_p$ (a), $C_h$ (b), $C_f$ (c) au pas de temps pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ). . . . .	97
4.8	Sensibilité des coefficients $C_p$ (a), $C_h$ (b), $C_f$ (c) au nombre minimal de particules par cellule pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ). . . . .	97
4.9	Comparaison des contours de vitesse et de température de rotation ( <b>SPARTA</b> en noir, <b>MONACO</b> en bleu et <b>DAC</b> en orange). . . . .	99
4.10	Comparaison des propriétés de surfaces obtenues avec les codes <b>SPARTA</b> , <b>DAC</b> et <b>MONACO</b> . . . . .	100
4.11	Géométrie et instrumentation (Thermocouples) le long de l'abscisse curviligne $S$ normalisée par le rayon de nez $R_n$ (adapté de [10]). Dimensions en mm. . . . .	101
4.12	Comparaison des contours de masse volumique adimensionnée ( $\rho/\rho_\infty$ ), de température globale et de nombre de Mach obtenus avec les codes <b>SPARTA</b> , <b>DAC</b> et <b>dsmcFoam</b> . . . . .	103
4.13	Illustration de la structure de l'écoulement autour du sphère-cône (adapté de [11]). . . . .	104
4.14	Comparaison de mesures expérimentales et de résultats DSMC de coefficients aérodynamiques pour différents angles d'incidence. . . . .	104
4.15	Comparaison des grandeurs surfaciques (coefficients de pression et de flux de chaleur) obtenues avec les codes <b>SPARTA</b> , <b>MGDS</b> et <b>dsmcFoam</b> pour différents angles d'incidence. . . . .	105
5.1	Schéma de la capsule Mercury (adapté de [12]). Dimensions en cm. . . . .	108
5.2	Flux de chaleur en régime raréfié enregistrés lors des vols MA-2 et MA-7 (extrait de [13]). . . . .	109
5.3	Flux de chaleur en régime raréfié enregistrés lors des vols MA-5 et MA-8 (extrait de [13]). Comparaison avec les résultats DSMC obtenus avec <b>SPARTA</b> . . . . .	110
5.4	Comparaison des résultats DSMC et des mesures expérimentales en régime raréfié lors des vols MA-5 et MA-8 (extrait de [13]). . . . .	111
5.5	Photographies de deux modules de commande Apollo utilisés lors des vols d'essais, crédit : NASA . . . . .	113
5.6	Trajectoires des vols d'essais [14] . . . . .	114
5.7	Schéma du module de commande Apollo et système de coordonnées aérodynamiques (adapté de [15]). Dimensions en m. . . . .	116
5.8	Maillage surfacique de 21970 mailles utilisé pour les calculs <b>SPARTA</b> . . . . .	118
5.9	Sensibilité des coefficients aérodynamiques à l'altitude . . . . .	119
5.10	Sensibilité des coefficients aérodynamiques à l'angle d'incidence . . . . .	119
5.11	Position des calorimètres sur l'arrière-corps du module AS-202. Les symboles blancs indiquent les 4 calorimètres défectueux (adapté de [12]). . . . .	120
5.12	Données de trajectographie du module AS-202 . . . . .	121
5.13	Champs de température, flux de chaleur et lignes de courant calculés par DSMC pour quatre points de vol de la rentrée du module Apollo AS-202 . . . . .	123
5.14	Comparaison entre les résultats DSMC et les données de vol du module AS-202 . . . . .	124
5.14	Comparaison entre les résultats DSMC et les données de vol du module AS-202 (suite)	125
5.14	Comparaison entre les résultats DSMC et les données de vol du module AS-202 (fin)	126
5.15	Lancement et phases opérationnelles de la navette STS. . . . .	127
5.16	Résultats ATD numériques et expérimentaux pour la navette spatiale américaine. . . . .	130
5.17	Comparaison de résultats DSMC [16], [17] avec des résultats expérimentaux [18] et des données de vol [19] pour la navette spatiale américaine. . . . .	130
5.18	Schéma de la configuration OREX (adapté de [20]). Dimensions en mm. . . . .	131
5.19	Comparaison des mesures ATD et des résultats DSMC au point d'arrêt de la capsule OREX (Figure (a) extraite de [20]). . . . .	132

5.20	Comparaison des mesures de pression et d'accélération avec les résultats DSMC pour la capsule OREX (extrait de [20]). . . . .	133
6.1	Configuration de l'IXV [21] . . . . .	136
6.2	Résumé de la mission IXV [22] . . . . .	136
6.3	Comparaison des trajectoires de rentrée de l'IXV [23], STS-2 [24] et STS-17 [25]. . .	137
6.4	Système de protection thermique de l'IXV . . . . .	138
6.5	Instrumentation de l'IXV pour les expériences LTT, CATE et SWBLI (extrait de [26]). . . . .	139
6.6	Instrumentation de la base et des gouvernes de l'IXV. . . . .	139
6.7	Thermocouples considérés pour l'analyse des résultats et la comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux. . . . .	140
6.8	Schéma du problème 1D de conduction pour un thermocouple du nez de l'IXV (adapté de [27]). . . . .	141
6.9	Sensibilité de la masse volumique prédite par le modèle <b>MSISE-00</b> en fonction du jour de l'année à différentes altitudes. . . . .	145
6.10	Sensibilité de la masse volumique prédite par le modèle <b>MSISE-00</b> en fonction de l'heure du jour à différentes altitudes. . . . .	145
6.11	Sensibilité de la masse volumique prédite par le modèle <b>MSISE-00</b> en fonction de la longitude à 65 (a), 90 (b), 100 (c) et 120 (d) km et pour différentes latitudes. . . .	146
6.12	Comparaison de la masse volumique estimée avec le modèle <b>MSISE-00</b> et les modèles <b>US62</b> (a), <b>US76</b> (b), <b>Jacchia77</b> (c). . . . .	146
6.13	Maillage surfacique de l'IXV composé de 82726 éléments. . . . .	148
6.14	Ligne de contrôle pour l'observation des grandeurs dans le champ. . . . .	149
6.15	Représentation d'une procédure <b>SPARTA</b> de raffinement à 3 niveaux à 90 km. . . .	149
6.16	Différents domaines de calcul pour l'étude de convergence à 90 km. . . . .	149
6.17	Flux de chaleur au point d'arrêt pour quatre niveaux de raffinement à 90 km. . . .	149
6.18	Comparaison du nombre de particules par cellule (a) et du ratio $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$ (b) le long de la ligne de contrôle pour trois configurations numériques à 90 km. . . . .	151
6.19	Vue 3D du maillage 3D dans le plan de symétrie du domaine de calcul CFD. . . .	152
6.20	Contours normalisés de la masse volumique (gauche) et de la température de translation (droite) entre 115 et 95 km. . . . .	153
6.21	Contours normalisés de masse volumique (gauche) et de température de translation (droite) pour plusieurs coefficients d'accommodation $w$ à 115 km. . . . .	153
6.22	Influence du modèle de collision sur les profils de température (a) et de vitesse (b) le long de la ligne de contrôle à 90 km. . . . .	155
6.23	Système de coordonnées de l'IXV avec le centre de gravité ( <b>CG</b> ) de coordonnées $(x; y; z) = (2.575; 0; -0.079)$ m. . . . .	155
6.24	Evolution des coefficients de forces axiale et normale (a) et de moment de tangage (b) entre 115 et 90 km, et pour différentes valeurs du coefficient d'accommodation $w$ . 156	156
6.25	Influence du coefficient d'accommodation sur les distributions des coefficients de pression (gauche) et de frottement (droite) le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (a-b), 100 (c-d) et 90 (e-f) km. . . . .	157
6.26	Influence d'une incertitude de 15% sur la masse volumique sur les distributions des coefficients de pression (gauche) et de frottement (droite) le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (a-b) et 90 (c-d) km. . . . .	158
6.27	Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne centrale à l'intrados pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km. . . . .	160
6.28	Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne $x = 2.06$ m pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km. . . . .	161

6.29	Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne $x = 3.52$ m pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km. . . . .	162
6.30	Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne $x = 3.99$ m pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km. . . . .	163
6.31	Influence des modèles de relaxation chimique (a) et de cinétique chimique (b) sur la distribution du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados de l'IXV à 90 km. Comparaison avec des données de vol. . . . .	165
6.32	Influence du modèle de collision sur la distribution du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (ab) et 90 (c) km. Comparaison avec des données de vol. . . . .	167
6.33	Influence d'une incertitude de 15% sur la masse volumique sur la distribution du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (ab) et 90 (c) km. Comparaison avec des données de vol. . . . .	167
6.34	Contours normalisés de nombre de Mach (gauche), de la masse volumique (milieu) et de la température (droite) obtenus par DSMC et CFD à 90 km. . . . .	168
6.35	Comparaison des profils de température (a)-(b), de composition chimique (c) et de vitesse (d) le long de la ligne de contrôle obtenus par DSMC et CFD à 90 km. . . . .	170
6.36	Contours de $Kn_{GLL}$ obtenus pour la simulation CFD. Les zones en gris clair correspondent à $Kn_{GLL} < 0.05$ , en gris à $0.05 < Kn_{GLL} < 0.1$ et en noir à $Kn_{GLL} > 0.1$ . . . . .	171
6.37	Comparaison des distributions des coefficients de pression (a) et de frottement (b) le long de la ligne centrale à l'intrados obtenues par simulations CFD et DSMC à 90 km. . . . .	172
6.38	Comparaison des contours de pression sur l'intrados obtenus par simulations DSMC (a) et CFD (b) à 90 km. . . . .	172
6.39	Comparaison des distributions du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados (a), en $x = 2.06$ m (b), $x = 3.52$ m (c) et $x = 3.99$ m (d) obtenues par simulations CFD et DSMC à 90 km. . . . .	173
6.40	Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km. . . . .	178
6.41	Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne $x = 2.06$ m à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km. . . . .	178
6.42	Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne $x = 3.52$ m à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km. . . . .	179
6.43	Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne $x = 3.99$ m à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km. . . . .	179
6.44	Profils de $Kn_{GLL-\rho}$ le long de la ligne de contrôle pour les deux résultats CFD. . . . .	180
6.45	Ligne de contrôle pour l'observation du critère de déséquilibre. . . . .	180
7.1	Angle d'inclinaison locale sur un élément discret. . . . .	187
7.2	Parties au vent (blanc) et à l'ombre (hachuré) d'une géométrie simple (extrait de [2]). . . . .	187
7.3	Comparaison du coefficient $C_h$ obtenu par DSMC et avec <b>ARES</b> pour OREX à 105 km. . . . .	198
7.4	Comparaison du coefficient $C_h$ obtenu par DSMC et avec <b>ARES</b> pour Apollo 6 à 115 (1 <sup>ère</sup> ligne), 130 km (2 <sup>ème</sup> ligne) et 150 km (2 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	199
7.5	Comparaison du flux de chaleur obtenu par CFD (LORE) et avec <b>ARES</b> pour l'ARD à 66 km (extrait de [28]). . . . .	200
7.6	Aérodisque et variables de design (extrait de [29]). . . . .	203
7.7	Réponses des modèles de krigeage entraînés à partir de 17 (gauche) et 117 (droite) points (extrait de [29]). . . . .	204

7.8	Micro-satellite et ses quatre variables de design. La hauteur et la longueur sont contraintes (extrait de [29]). . . . .	205
7.9	Coefficient de traînée en fonction du <i>nose radius</i> pour différents ratio <i>height/length</i> . Les résultats sont obtenus avec des modèles Fonctions de Base Radiale (RBF) entraînés avec des méthodes par panneaux (gauche) et des calculs DSMC (droite) (extrait de [29]). . . . .	205
7.10	Coefficients de traînée prédits par krigeage pour le cas d'une sphère (gauche) et d'un cube (droite) (extrait de [30]). . . . .	206
7.11	Comparaison des distributions du flux de chaleur prédites par réseau de neurones (gauche) et calculées par DSMC (droite) pour deux configurations de vol (extrait de [30]). . . . .	206
8.1	Exemple d'hypercube latin optimal. . . . .	211
8.2	Exemple d'hypercube latin diagonal. . . . .	211
8.3	Réalisations de processus gaussiens non conditionnés obtenues avec un noyau gaussien ( <i>i.e.</i> $p=2$ ) et différents paramètres $\mu$ , $\theta$ et $\sigma^2$ (inspiré de [31]). . . . .	214
8.4	Krigeage non-optimal et réalisations de processus gaussiens conditionnés obtenus avec un noyau gaussien ( <i>i.e.</i> $p=2$ ) et les paramètres $\beta_0 = 0$ , $\theta = 50$ et $\sigma^2 = 1$ . Les observations (points rouges) sont obtenues à partir de la solution de référence $y = \sin(2\pi x)$ . . . . .	215
8.5	Comparaison d'un modèle de krigeage ordinaire optimal ( $\hat{\beta}_0$ , $\hat{\theta}$ et $\hat{\sigma}^2$ ) et de krigeage ordinaire non-optimal ( $\beta_0 = 0$ , $\theta = 50$ et $\sigma^2 = 1$ ). Les observations (points rouges) sont obtenues à partir de la solution de référence $y = \sin(2\pi x)$ . . . . .	216
8.6	Krigeage interpolant et krigeage régression optimaux pour un problème 1D issu de [32]. Les observations (points rouges) sont sélectionnées parmi les données (points gris). . . . .	217
8.7	Représentation graphique d'un perceptron simple (inspiré des supports FIDLE). . . . .	219
8.8	Représentation graphique d'un perceptron multicouche (inspiré des supports FIDLE). . . . .	219
8.9	Représentations graphiques de l'algorithme de Stochastic Gradient Descent (SGD) pour des fonctions de perte simples 1D (inspiré de [33]) et 2D (extrait de [34]). . . . .	223
8.10	Courbes d'apprentissage d'un réseau de régression scalaire (a) et d'un classifieur binaire (b). . . . .	224
8.11	Répartition de la base de données pour une validation par hold-out (gauche) ou k-fold (droite) (reproduit d'après [33]). . . . .	225
8.12	Représentation des domaines physiques et d'expérience. . . . .	228
8.13	Plan d'expériences LHS de 25 points dans le repère canonique. . . . .	228
8.14	Plan d'expériences LHS de 25 points dans le repère physique. . . . .	228
8.15	Distribution des points de validation. . . . .	230
8.16	Simulation DSMC du cas $M_\infty = 30.8$ , $Kn = 14.1$ . . . . .	231
8.17	Simulation DSMC du cas $M_\infty = 33.9$ , $Kn = 1.4 \times 10^{-2}$ . . . . .	231
8.18	Coefficients de pression au point d'arrêt $C_{p,stag}$ obtenus pour différents modèles d'apprentissage. . . . .	233
8.19	Comparaison des $C_{p,stag}$ estimés et réels pour le modèle de krigeage ordinaire avec noyau gaussien. . . . .	234
8.20	VMR du coefficient $C_{p,stag}$ pour différents modèles de krigeage (a)-(c) et plan d'expériences complémentaire (d). . . . .	235
8.21	Calcul du coefficient $C_{h,stag}$ pour différents modèles d'apprentissage. . . . .	236
8.22	Comparaison des $C_{h,stag}$ estimés et réels pour le modèle de krigeage ordinaire avec noyau gaussien sur deux bases de validation. . . . .	237
8.23	VMR du coefficient $C_{h,stag}$ pour différents modèles de krigeage. . . . .	237

---

8.24	Evolution des coefficients de pression normalisés par leurs valeurs maximales, le long de la ligne centrale de plusieurs véhicules, sur une portion de leurs trajectoires de rentrée. . . . .	239
8.25	Evolution des coefficients de flux de chaleur normalisés par leurs valeurs maximales, le long de la ligne centrale de plusieurs véhicules, sur une portion de leurs trajectoires de rentrée. . . . .	241
8.26	Evolution des coefficients de frottement normalisés par leurs valeurs maximales, le long de la ligne centrale de plusieurs véhicules, sur une portion de leurs trajectoires de rentrée. . . . .	242
8.27	Représentation de l'exploration de l'espace de design avec les simulations de la base d'entraînement. . . . .	244
8.28	Comparaison du coefficient $C_p$ obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec <b>ARES</b> pour Apollo à 100 km (1 <sup>ère</sup> ligne), Apollo à 130 km (2 <sup>ième</sup> ligne), l'IXV à 115 km (3 <sup>ième</sup> ligne), OREX à 105 km (4 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	251
8.29	Comparaison du coefficient $C_p$ obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec <b>ARES</b> pour une Sphère à 110 km (1 <sup>ère</sup> ligne), Ram-C à 105 km (2 <sup>ième</sup> ligne), Orion à 100 km (3 <sup>ième</sup> ligne), le Spaceliner à 150 km (4 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	252
8.30	Comparaison du coefficient $C_h$ obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec <b>ARES</b> pour Apollo à 100 km (1 <sup>ère</sup> ligne), Apollo à 130 km (2 <sup>ième</sup> ligne), l'IXV à 115 km (3 <sup>ième</sup> ligne), OREX à 105 km (4 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	253
8.31	Comparaison du coefficient $C_h$ obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec <b>ARES</b> pour une Sphère à 110 km (1 <sup>ère</sup> ligne), Ram-C à 105 km (2 <sup>ième</sup> ligne), Orion à 100 km (3 <sup>ième</sup> ligne), le Spaceliner à 150 km (4 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	254
8.32	Comparaison du coefficient $C_f$ obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec <b>ARES</b> pour Apollo à 100 km (1 <sup>ère</sup> ligne), Apollo à 130 km (2 <sup>ième</sup> ligne), l'IXV à 115 km (3 <sup>ième</sup> ligne), OREX à 105 km (4 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	255
8.33	Comparaison du coefficient $C_f$ obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec <b>ARES</b> pour une Sphère à 110 km (1 <sup>ère</sup> ligne), Ram-C à 105 km (2 <sup>ième</sup> ligne), Orion à 100 km (3 <sup>ième</sup> ligne), le Spaceliner à 150 km (4 <sup>ième</sup> ligne). . . . .	256

# Liste des tableaux

3.1	Algorithme du modèle CLL (reproduit d'après [35]). . . . .	84
4.1	Conditions aux limites des deux cas considérés [36]. . . . .	92
4.2	Paramètres numériques des différentes simulations pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ). . . . .	93
4.3	Paramètres numériques des différentes simulations pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ). . . . .	94
4.4	Conditions expérimentales pour les essais réalisés dans la soufflerie SR3. . . . .	100
5.1	Informations sur les conditions initiales de rentrée et l'instrumentation des 4 capsules Mercury Atlas (MA) (adapté de [12], [13]). . . . .	108
5.2	Conditions atmosphériques des vols MA-5 et MA-8 [37]. . . . .	110
5.3	Paramètres numériques pour les simulations <b>SPARTA</b> des missions MA-5 et MA-8. . . . .	111
5.4	Paramètres de vols des différents vol d'essais des modules de commande Apollo [12]. . . . .	113
5.5	Conditions atmosphériques pour le module Apollo 6 simulées par Moss [15]. Les conditions grisées sont celles simulées avec <b>SPARTA</b> . . . . .	117
5.6	Paramètres numériques des simulations . . . . .	117
5.7	Influence du maillage sur les coefficients aérodynamiques à 85 km . . . . .	118
5.8	Points de trajectoire du module AS-202 sélectionnés pour les simulations <b>SPARTA</b> . . . . .	120
5.9	Paramètres numériques des simulations. . . . .	122
5.10	Conditions de vol de la navette STS (adapté de [38]). . . . .	128
5.11	Conditions atmosphériques pour les simulations OREX (adapté de [20]). . . . .	132
5.12	Paramètres numériques des simulations <b>SPARTA</b> pour trois points de vols de la trajectoire d'OREX. . . . .	132
6.1	Paramètres de vol communiqués par Thales Alenia Space Italy . . . . .	137
6.2	Conditions atmosphériques obtenues avec le modèle <b>MSISE-00</b> . . . . .	144
6.3	Paramètres des simulations DSMC <b>SPARTA</b> . . . . .	148
6.4	Paramètres pour les différentes configurations numériques à 90 km. . . . .	150
6.5	Résumé des différences relatives entre les résultats DSMC et les données de vol pour différents capteurs le long de la ligne centrale. . . . .	159
6.6	Travaux dédiés à la comparaison DSMC-CFD. . . . .	170
6.7	Coefficients aérodynamiques obtenus par simulations CFD et DSMC à 90 km. . . . .	172
6.8	Conditions atmosphériques calculées avec le modèle <b>MSIS 2.0</b> . . . . .	176
6.9	Résumé des différences relatives entre les calculs DSMC et les mesures du flux de chaleur pour plusieurs thermocouples situés le long de la ligne centrale. . . . .	177
7.1	Flux de chaleur au point d'arrêt calculé avec <b>SPARTA</b> et <b>ARES</b> pour trois altitudes de la rentrée Apollo 6 et un point de vol de la rentrée d'OREX. . . . .	198
8.1	Conditions atmosphériques et de vol des points de la base de données d'entraînement des modèles de krigeage. . . . .	229
8.2	Erreurs d'estimation du coefficient $C_{p,stag}$ pour différents modèles réduits. . . . .	232
8.3	Erreurs d'estimation du coefficient $C_{h,stag}$ pour différents modèles réduits. . . . .	235
8.4	Typologie des véhicules de rentrée. . . . .	238
8.5	Cas inclus dans la base de données d'entraînement des réseaux de neurones. . . . .	245
8.6	Cas inclus dans la base de données de validation et de test des réseaux de neurones. . . . .	246



# Glossaire

**AES** Architecture de Système d'Exploration.

**ARD** Atmospheric Reentry Demonstrator.

**ATD** Aerothermodynamiques.

**BLUP** Best Linear Unbiased Predictor.

**C-SiC** Carbon-Silicium Carbide.

**CEV** Crew Exploration Vehicle.

**CFD** Computational Fluid Dynamic.

**CLL** Cercignani, Lampis et Lord.

**CMC** Composite à Matrice Céramique.

**DFI** Development Flight Investigation.

**DL** Deep Learning.

**DOE** Design of Experiments.

**DSMC** Direct Simulation Monte Carlo.

**ESA** Agence Spatiale Européenne.

**FIRE** Flight Investigation of Re-Entry.

**GNC** Guidage Navigation et Contrôle.

**GPR** Régression par Processus Gaussien.

**HiRAP** High Resolution Accelerometer Package.

**HPC** Calcul Haute Performance.

**HS** Hard Sphere.

**IFE** In Flight Experiments.

**IPL** Inverse Power Law.

**IR** Infra-Rouge.

**ISS** International Space Station.

**IXV** Intermediate eXperimental Vehicle.

**KG** Krigeage.

**LHS** Latin Hypercube Sampling.

**MA** Mercury-Atlas.

**MAE** Mean Absolute Error.

**ML** Machine Learning.

**MLE** Maximum Likelihood Estimates.

**MSE** Mean Squared Error.

**NRLMSISE** US Naval Research Laboratory Mass Spectrometer and Incoherent Scatter radar Extended.

**NTC** No Time Counter.

**ONERA** Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales.

**OREX** Orbital Re-entry Experiment.

**POD** Proper Orthogonal Decomposition.

**Q-K** Quantum Kinetic.

**QCT** Quasi Classical Trajectory.

**R-T** Rotation-Translation.

**R-V** Rotation-Vibration.

**RBF** Fonctions de Base Radiale.

**RMSE** Root Mean Squared Error.

**RSM** Méthode de Surface de Réponse.

**SGD** Stochastic Gradient Descent.

**STS** Space Transportation System.

**TASI** Thales Alenia Space Italy.

**TC** Thermo-Couples.

**TCE** Total Collision Energy.

**TPS** Système de Protection Thermique.

**TVSL** Thin Viscous Shock Layer.

**UMI** Unité de Mesure Inertielle.

**V-T** Vibration-Translation.

**V-V** Vibration-Vibration.

**VHS** Variable Hard Sphere.

**VLEO** Very Low Earth Orbit.

**VMR** Variance Mean Ratio.

**VSL** Viscous Shock Layer.

**VSS** Variable Soft Sphere.

## Liste des symboles

$A$	facteur pré-exponentiel de la loi d'Arrhenius	
$c_{mp}$	vitesse la plus probable d'une particule	$m.s^{-1}$
$C_f$	coefficient de frottement	
$C_h$	coefficient du flux de chaleur	
$C_p$	coefficient de pression	
$d$	diamètre moléculaire	m
$D$	coefficient de diffusion	$m^2.s^{-1}$
$f$	fonction de distribution de vitesse dans l'espace de vitesse	$(m.s^{-1})^{-3}$
$\mathcal{F}$	fonction de distribution de vitesse dans l'espace des phases	$(m.s^{-1})^{-3}.m^{-3}$
$g$	vitesse relative d'une paire de particule	$m.s^{-1}$
$g'$	vitesse relative post-collision d'une paire de particule	$m.s^{-1}$
$k$	constante de Boltzmann	$1.38 \times 10^{-23} J.K^{-1}$
$k_f$	taux de réaction direct	
$k_b$	taux de réaction inverse	
$Kn$	nombre de Knudsen	
$m$	masse	kg
$m_r$	masse réduite	kg
$M$	nombre de Mach	
$n$	densité numérique de particules	molécules. $m^{-3}$
$N$	nombre totale de particules dans un système	
$N_p$	nombre totale de particules numériques d'une simulation	
$p$	pression	Pa
$p_{rot}$	probabilité d'un transfert d'énergie vers le mode de rotation	
$p_{vib}$	probabilité d'un transfert d'énergie vers le mode de vibration	
$P_{react}$	probabilité de réaction chimique directe	
$P_{inv}$	probabilité de réaction chimique inverse	
$q$	flux de chaleur	$W.m^{-2}$
$Q_{mode}$	fonction de partition d'un mode d'énergie	
$R$	constante des gaz parfaits	$8.314 J.mol^{-1}.K^{-1}$
$R_n$	rayon de nez	m
$R_s$	constante spécifique d'un gaz	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$T$	température	K
$T_{tr}$	température de translation	K
$T_{rot}$	température de rotation	K
$T_{vib}$	température de vibration	K
$T_{ov}$	température globale	K
$T_{coll}$	température de collision	K
$T_w$	température de paroi	K
$U$	vitesse véhiculaire ou de l'écoulement	$m.s^{-1}$
$v$	vitesse particulaire	$m.s^{-1}$
$v'$	vitesse particulaire thermique	$m.s^{-1}$
$w$	coefficient d'accommodation du modèle de Maxwell	
$W_p$	poids numérique des particules	
$Z_{tr}$	nombre collisionnel du mode de translation	
$Z_{rot}$	nombre collisionnel du mode de rotation	
$Z_{vib}$	nombre collisionnel du mode de vibration	

$\alpha$	paramètre du modèle VSS	
	angle d'attaque	deg.
	angle d'incidence locale	deg.
$\Delta t$	pas de temps	s
$\Delta x$	pas d'espace	m
$\epsilon_{tr}$	énergie de translation relative d'une paire collisionnelle	J
$\epsilon_{rot}$	énergie de rotation	J
$\epsilon_{vib}$	énergie de vibration	J
$\epsilon_{el}$	énergie électronique	J
$\epsilon_{coll}$	énergie de collision	J
$\epsilon_a$	énergie d'activation d'une réaction chimique	J
$\bar{\zeta}$	moyenne des degrés de liberté internes	
$\zeta_{tr}$	nombre de degrés de liberté du mode de translation	
$\zeta_{rot}$	nombre de degrés de liberté du mode de rotation	
$\zeta_{vib}$	nombre de degrés de liberté du mode de vibration	
$\zeta_{el}$	nombre de degrés de liberté du mode électronique	
$\eta$	coefficient de puissance de la température de la loi d'Arrhenius	
	coefficient de force répulsive $F \propto r^{-\eta}$	
$\theta$	angle d'inclinaison locale	deg.
$\theta_v$	température caractéristique de vibration	K
$\kappa$	conductivité thermique	W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
$\lambda$	libre parcours moyen	m
$\mu$	viscosité dynamique	Pa.s
$\nu = \omega - \frac{1}{2}$		
$\Xi$	somme des degrés de libertés moyens	
$\rho$	masse volumique	kg.m <sup>-3</sup>
$\sigma$	section efficace	m <sup>2</sup>
$\sigma_T$	section efficace totale de collision	m <sup>2</sup>
$\sigma_R$	section efficace de réaction	m <sup>2</sup>
$\bar{\tau}$	tenseur de cisaillement visqueux	Pa
$\tau_f$	temps caractéristique de l'écoulement	s
$\tau_{coll}$	temps inter-collision moyen	s
$\tau_{tr}$	temps de relaxation du mode de translation	s
$\tau_{rot}$	temps de relaxation du mode de rotation	s
$\tau_{vib}$	temps de relaxation du mode de vibration	s
$\chi$	angle de diffusion/déviaton dans le plan de collision	rad.
$\omega$	exposant de la loi de puissance $\mu \propto T^\omega$ des modèles VHS et VSS	

## Notations

$\vec{X}$	vecteur $X$
$X_\infty$	valeur de la variable $X$ dans la partie libre de l'écoulement
$X_{ref}$	valeur caractéristique ou de référence de la variable $X$
$\langle X \rangle$	valeur moyenne de la variable $X$
$X'$	valeur post-collision de la variable $X$
$[X]$	partie entière de la variable $X$

# Introduction

## Contexte

Malgré l'augmentation du nombre de satellites d'observation en orbite basse ( $h \leq 1000$  km), la résolution des images fournies peut s'avérer insuffisante pour certaines activités de surveillance ou de cartographie. Une manière de répondre à cette problématique serait de placer les satellites sur des orbites très basses ( $100 \leq h \leq 300-450$  km). En effet, l'amélioration de la résolution spatiale, l'augmentation des capacités radiométriques, le risque de collision avec des débris amoindri, etc., sont autant de raisons de privilégier ce type d'orbite [39]. En 2019, le satellite expérimental GOCE (Gravity field and steady state Ocean Circulation Explorer - Figure 1) de l'agence spatiale européenne a été mis en orbite à 224 km pour une durée de 20 mois. En 2017, le satellite de démonstration SLATS (Super Low Altitude Test Satellite - Figure 2) de l'agence spatiale japonaise a été placé en orbite pour une durée totale de 21 mois. Après plusieurs manœuvres dont un transfert d'orbite, le satellite a complété sa mission sur des altitudes comprises entre 250 et 180 km. Par ailleurs, le développement de nouvelles technologies de propulsion aérobie doit permettre de fournir des poussées suffisamment importantes et pour des durées suffisamment longues pour compenser durablement la traînée à des altitudes comprises entre 120 et 250 km [40] rendant les satellites en très basse orbite terrestre (VLEO) commercialement viables d'ici les prochaines années [41]. Dans sa redéfinition de la ligne Karman, McDowell soutient même qu'avec les moyens actuels, des satellites peuvent survivre à plusieurs révolutions sur des orbites elliptiques de périhéogés situés aussi bas que 100 km [42].



FIGURE 1 – Satellite GOCE (crédit ESA).

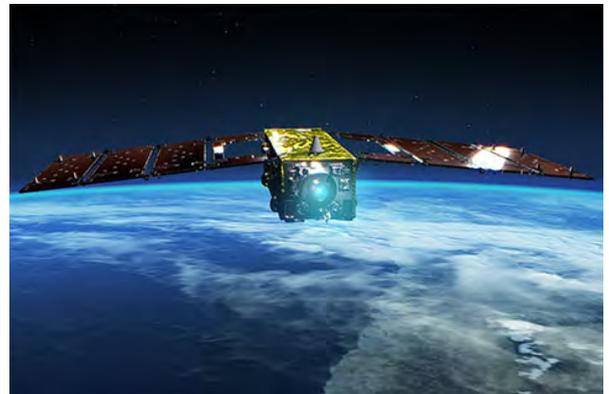


FIGURE 2 – Satellite SLATS (crédit JAXA).

Dans ces conditions, l'augmentation de la masse volumique de l'air aux altitudes VLEO par rapport aux altitudes LEO rend les effets de traînée considérables. C'est pourquoi l'exploitation de ces orbites présente de multiples enjeux de conception associés aux contraintes aérodynamiques et aérothermodynamiques rencontrées. Ainsi, il est fondamental de minimiser la traînée et les contraintes aérothermodynamiques afin de pouvoir se déplacer et se maintenir sur des orbites les plus basses possibles tout en garantissant l'intégrité de la charge utile. Bien que les satellites VLEO soient encore dans les premières phases de développement, les premiers concepts suggèrent une préférence pour des structures géométriques plus profilées que les satellites traditionnels (Figure 3). En parallèle, la loi d'opération spatiale (LOS) de 2008 impose aux opérateurs français de limiter les risques liés aux débris spatiaux lors de leur désorbitation. En particulier, cette loi préconise la réalisation de manœuvres de désorbitation pour les satellites en LEO arrivés en fin de vie. L'opérateur doit alors garantir la destruction du satellite durant la phase de rentrée atmosphérique ou assurer que

la probabilité qu'il fasse au moins une victime au sol soit inférieure à  $10^{-4}$ . De même, le développement de nouveaux véhicules de rentrée réutilisables (Figure 4) nécessite une connaissance toujours plus aboutie des conditions de vol propres à une rentrée atmosphérique. L'atteinte de ces objectifs passe donc par la maîtrise de l'ensemble des contraintes aérodynamiques (coefficients de forces et de moments) et aérothermodynamiques (flux de chaleur pariétal) rencontrées notamment à haute altitude.



FIGURE 3 – Vue d'artiste de satellites VLEO de type skimsat (crédit Thales Alenia Space).



FIGURE 4 – Véhicule réutilisable IXV ayant effectué une rentrée atmosphérique en 2015 (crédit Dassault).

## Problématique, objectifs et démarche

Les écoulements rencontrés par les satellites en orbite basse et durant la première phase de rentrée atmosphérique sont des écoulements hypersoniques raréfiés en déséquilibre fort, de sorte que les méthodes de CFD traditionnelles basées sur l'hypothèse des milieux continus ne sont pas applicables. Dans ce cas, il convient d'utiliser des méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann de type Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) [43, 1]. Cependant, en raison du couplage fort existant entre la mécanique du vol, la forme de l'objet, l'écoulement (aérodynamique et aérothermodynamique) et la réponse thermomécanique du matériau, il est impossible d'élaborer une géométrie optimisée, de simuler le cycle de vie d'un satellite VLEO ou la phase de rentrée atmosphérique d'un objet avec des outils dits de haute-fidélité. L'utilisation de codes de rentrée basés sur des modèles réduits à réponse rapide permet de pallier ce problème. Cependant, en régime raréfié, les modèles classiques souffrent d'importantes limitations responsables d'un niveau de précision largement perfectible. En effet, les fonctions de raccord permettent de calculer les grandeurs globales (*i.e.* intégrées) et locales (*i.e.* en tout point de la géométrie) en n'importe quelle altitude du régime raréfié grâce à un paramètre de raréfaction et à la connaissance de ces grandeurs dans les régimes limites continu et moléculaire libre. Le caractère arbitraire des limites du régime raréfié et du choix de la longueur de référence utilisée pour définir le paramètre de raréfaction compromet la généralisation des fonctions de raccord. De même, lorsque les formulations analytiques commettent une erreur importante, cette erreur est également propagée par les fonctions de raccord à travers le régime raréfié. Dans ce contexte, l'objectif de la thèse est de **développer de nouveaux modèles réduits en régime hypersonique raréfié pour les coefficients aérodynamiques et le flux de chaleur**. Pour atteindre cet objectif, une approche en deux étapes est adoptée. D'abord, l'évaluation de la DSMC par confrontation aux mesures et données de vol disponibles permet de mieux comprendre les mécanismes physico-chimiques à l'œuvre en conditions hypersoniques raréfiées. Cette étape permet également de mieux comprendre les modèles clés de la méthode tout en construisant une base de données de calculs préliminaires. Ensuite, les fruits de ce travail servent à développer une nouvelle approche de génération de modèles réduits exempts des limitations des modèles actuels.

## Plan de l'étude

La synthèse de ces travaux de thèse est organisée en trois parties. Dans la première partie, les chapitres 1 à 3 posent le cadre physique et numérique de notre étude. Ainsi, le premier chapitre fait le bilan des phénomènes physico-chimiques caractéristiques des conditions hypersoniques raréfiées rencontrées dans la première phase d'une rentrée atmosphérique. A la fin du chapitre sont indiqués les différents phénomènes considérés et le moyen de simulation haute fidélité retenu : la DSMC.

Le deuxième chapitre porte sur les notions principales de dynamique des gaz hors équilibre sur laquelle la DSMC se construit. A ce titre, plusieurs concepts fondamentaux de la dynamique des gaz jusqu'à l'obtention de l'équation de Boltzmann sont rappelés. Les liens entre l'équation de Boltzmann et les équations de Navier-Stokes sont ensuite abordés à travers la théorie de Chapman-Enskog. Ce chapitre se termine par une brève description moléculaire des phénomènes de relaxation thermochimique.

Le troisième chapitre présente les grands principes de la DSMC. Les hypothèses fondamentales, l'algorithme central et les métriques usuelles de la méthode sont d'abord introduits. Plusieurs modèles et aspects numériques pour la simulation des processus collisionnels sont également abordés. A cette occasion, une discussion plus approfondie est menée à propos des modèles de relaxation thermochimiques et des modèles de collision les plus utilisés.

Une fois les fondements théoriques posés, la deuxième partie, incluant les chapitres 4 à 6, se concentre sur la mise en application du code DSMC **SPARTA** (développé par le laboratoire Sandia) à des cas d'étude hypersoniques raréfiés. Le chapitre 4 fait d'abord état des spécificités de cette implémentation (*i.e.* ses modèles et fonctionnalités). Une analyse de convergence de la méthode DSMC dans le cadre de la simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés est ensuite présentée. La dernière partie du chapitre constitue une première étape de validation de la méthode par comparaison des résultats obtenus avec le code **SPARTA** aux résultats de la littérature comprenant des calculs réalisés avec d'autres codes DSMC et des mesures faites en soufflerie.

Le chapitre 5 étend l'évaluation de la méthode par comparaison à des mesures obtenues en vol. Ainsi, les résultats de calculs DSMC en conditions réactives sont analysés à la lumière des données de vol de rentrées atmosphériques des capsules Mercury, Apollo, OREX et de la navette spatiale américaine. Les travaux résumés dans ce chapitre ont donné lieu à la rédaction d'un article [44].

En raison de l'incertitude sur les conditions de vol et sur les mesures de flux de chaleur, l'évaluation de la méthode et de ses paramètres d'influence se poursuit par l'étude de la portion de la rentrée en régime raréfié de l'Intermediate eXperimental Vehicle (IXV). Le chapitre 6 introduit d'abord le véhicule, sa mission et les moyens expérimentaux embarqués. Les résultats d'un ensemble de calculs DSMC sont ensuite analysés et discutés. Pour comprendre l'origine des différences entre les mesures et les résultats numériques, les résultats d'un calcul CFD réalisé avec le code **CEDRE** sont également considérés. Les travaux présentés dans ce chapitre ont été publiés dans deux articles [45] et [46].

Grâce à une certaine connaissance des conditions hypersoniques raréfiées, des modèles prépondérants de la DSMC, d'une confiance dans le code **SPARTA** et d'une base de calculs préliminaires, la dernière partie sur le développement de modèles réduits peut être abordée. Les chapitres 7 et 8 présentent les différentes étapes suivies pour développer des modèles basés sur des méthodes d'apprentissage statistique. Ainsi le chapitre 7 donne un aperçu des méthodes classiques utilisées dans les codes de rentrée, de leurs limitations, puis fait un état de l'art des méthodes alternatives plus complexes. Le chapitre 8 décrit finalement les deux méthodes de Machine Learning (ML) retenues et leur mise en œuvre dans notre contexte.



---

## Première partie

# Contexte, rappels théoriques et introduction à la méthode DSMC



# Chapitre 1

## Physique des écoulements hypersoniques de rentrée atmosphérique

### Sommaire

<b>1</b>	<b>Rentrée atmosphérique : définition et caractère multi-physique . . . . .</b>	<b>29</b>
<b>2</b>	<b>Phénomènes physiques caractéristiques des écoulements hypersoniques</b>	<b>30</b>
2.1	Phénomènes thermochimiques . . . . .	30
2.2	Entre équilibre et déséquilibre thermochimiques . . . . .	31
2.3	Les phénomènes d'interactions gaz-surface . . . . .	32
<b>3</b>	<b>Paramètres de similitudes pour la classification des régimes de rentrée</b>	<b>34</b>
3.1	Nombre de Mach et régime de vitesse . . . . .	34
3.2	Nombre de Knudsen et niveau de raréfaction . . . . .	35
3.3	Reynolds, Mach et Knudsen : des paramètres complémentaires . . . . .	36
<b>4</b>	<b>Les écoulements hypersoniques raréfiés . . . . .</b>	<b>37</b>
4.1	Topologie des écoulements raréfiés . . . . .	38
4.2	Écoulements hypersoniques à haute altitude : entre raréfaction et déséquilibre	38
4.3	Equations physiques pour la description des écoulements raréfiés . . . . .	40
<b>5</b>	<b>Méthode numérique choisie et phénomènes considérés . . . . .</b>	<b>41</b>

**Introduction :** L'objectif de ce chapitre est d'introduire le contexte physique de cette thèse. L'idée première est de donner un aperçu complet des phénomènes physiques rencontrés dans les écoulements hypersoniques de rentrée. Ensuite, l'introduction des nombres adimensionnés utilisés pour caractériser ces écoulements permet de se concentrer progressivement sur les écoulements hypersoniques raréfiés. Ainsi, les régimes et la topologie caractéristiques de tels écoulements sont d'abord discutés. Ensuite, la distinction entre les concepts fondamentaux de raréfaction et de déséquilibre permet finalement d'identifier les équations physiques les plus appropriées pour décrire ce type d'écoulement. La dernière partie du chapitre présente succinctement la méthode numérique retenue et les phénomènes pris en compte.

### 1 Rentrée atmosphérique : définition et caractère multi-physique

On parle de rentrée atmosphérique lorsqu'un objet (météorite, étage de lanceur, satellite, etc.) pénètre les couches denses de l'atmosphère d'une planète. Cette notion de densité étant relative, le début de cette phase intervient lorsque le niveau des sollicitations aérodynamiques de l'air n'est plus négligeable par rapport au poids de l'objet. Comme on le verra par la suite, sur Terre, le point d'entrée d'un véhicule d'une taille de l'ordre de quelques mètres correspond à une altitude de 120 km et coïncide avec le démarrage des mesures lorsqu'il est instrumenté. De manière générale, on distingue deux types de rentrées : les rentrées *contrôlées* et les rentrées *non contrôlées*. Dans le premier cas, l'angle de pénétration, la zone d'atterrissage et la trajectoire nominale sont entièrement pré-déterminés. Le suivi de la trajectoire en temps réel permet d'assurer le respect de la trajectoire nominale grâce à différentes fonctions de contrôle. Ainsi, la fonction de navigation permet de déterminer la position de l'objet et de suivre la progression de la trajectoire. La fonction de guidage détermine l'accélération à appliquer au véhicule pour suivre la trajectoire nominale et

la fonction de pilotage transforme la consigne d'accélération en commandes sur les actionneurs physiques du véhicule. Dans le cas d'une rentrée non contrôlée, la trajectoire jusqu'au point d'impact est la conséquence des forces extérieures naturelles (aérodynamiques, gravité, inertie, etc.) qui s'exercent sur l'objet sans l'action d'un système de contrôle quelconque. Compte tenu des altitudes orbitales envisagées pour les satellites très basses orbites [42], on considérera dans ce travail que leurs conditions de vol correspondent également à des conditions de rentrée.

Le caractère déterminant d'une rentrée atmosphérique provient du fait qu'en raison des importantes vitesses mises en jeu, le ralentissement des objets lors de la traversée de l'atmosphère est accompagné de contraintes aérothermodynamiques fortes pouvant compromettre l'intégrité de leur structure. Ainsi, s'il est préférable qu'un satellite en fin de vie ou qu'une météorite se désintègre avant d'atteindre le sol, toutefois ce n'est pas toujours le cas. En effet, certains composants de satellites arrivent parfois jusqu'au sol avec des tailles et des vitesses susceptibles de causer d'importants dégâts. Une façon de minimiser les risques est de diriger l'objet vers une zone non-habitée lors d'une rentrée partiellement contrôlée où seuls le point de rentrée et la pente initiale sont contraints au tout début de la trajectoire. Pour les capsules et véhicules spatiaux, il est crucial de garantir que l'altération de leur structure soit assez faible pour qu'ils puissent atteindre le sol en bon état. Cela passe donc par un bon dimensionnement du Système de Protection Thermique (TPS) et par un suivi de la trajectoire de rentrée. Dans les deux cas, la conception du TPS et l'élaboration du corridor de rentrée nécessitent de connaître au mieux l'environnement aérothermodynamique à tout moment de la rentrée.

Une rentrée atmosphérique constitue donc un problème multi-physique très complexe où la trajectographie se détermine à partir des forces aérodynamiques, elles-mêmes fortement dépendantes de la forme de l'objet. De plus, les contraintes thermiques extrêmes peuvent être à l'origine de phénomènes de dégradation physico-chimique responsables d'une modification importante de la forme de l'objet. La modélisation d'une rentrée atmosphérique est donc une tâche particulièrement difficile dont la précision dépend de l'étendue des phénomènes pris en compte.

## 2 Phénomènes physiques caractéristiques des écoulements hypersoniques

Au cours d'une rentrée, on rencontre principalement des écoulements hypersoniques caractérisés par la formation d'un choc en amont de l'objet en mouvement. Pour une géométrie pointue, le choc est rectiligne attaché tandis que pour une géométrie émoussée, il sera normal détaché au niveau du point d'arrêt et devient oblique au delà. Dans le cadre d'une rentrée atmosphérique, les objets considérés sont principalement émoussés (*e.g.* navette, capsule ou réservoir) et la topologie du choc (épaisseur et distance au corps) dépend de la vitesse, de l'altitude et de la taille de l'objet. En règle générale, la couche de choc est une zone critique où interviennent de nombreux mécanismes physico-chimiques complexes.

### 2.1 Phénomènes thermo-chimiques

D'un point de vue moléculaire, la formation du choc est le résultat de la forte zone de compression en amont du véhicule où s'accumulent les particules du gaz. Ainsi, la notion concrète de choc correspond à la zone à travers laquelle la vitesse chute rapidement tandis que la température et la pression augmentent brusquement. Cette augmentation de température correspond à l'augmentation de l'énergie cinétique (aussi dite de translation) des particules à mesure que la fréquence de collisions s'accroît. A partir d'un certain degré d'excitation thermique, cette augmentation de température peut s'accompagner par l'activation de différents modes d'énergie (de rotation, de vibration et électronique) au sein desquels l'énergie de translation est transférée. Comme on le verra plus en détails dans la section 3 du chapitre 2, on peut alors attribuer à chaque mode d'énergie une

température  $T_{\text{mode}}$  comme mesure de son niveau d'énergie moyenne  $\langle \epsilon_{\text{mode}} \rangle$  selon la relation :

$$\langle \epsilon_{\text{mode}} \rangle = \frac{1}{2} \zeta_{\text{mode}} k T_{\text{mode}}, \quad (1.1)$$

où  $k$  est la constante de Boltzmann et  $\zeta_{\text{mode}}$  est le nombre de degrés de liberté du mode. En parallèle, l'augmentation de température peut donner lieu à diverses réactions chimiques de dissociation, d'échange et de recombinaison. L'ensemble de ces phénomènes constitue ce que l'on appelle les *effets de gaz réels*. Si l'on considère un écoulement d'air à une pression de 101325 Pa, l'apparition des effets de gaz réel se fait dans les conditions thermiques suivantes [47, 48] :

- **Lorsque la température est inférieure à 800 K :**  
seuls les modes de translation et de rotation sont actifs. Le gaz peut être considéré comme idéal, les capacités thermiques ( $C_p$  et  $C_v$ ) sont constantes tout comme le coefficient de Laplace  $\gamma = 1.4$  et la relation des gaz parfaits  $P = n k T$  est vérifiée.
- **Lorsque la température dépasse 800 K :**  
le mode vibrationnel s'active, les capacités thermiques ( $C_p$  et  $C_v$ ) ne sont plus constantes mais dépendantes de la température et  $\gamma \neq 1.4$ . La relation des gaz parfaits reste quant à elle vraie.
- **Quand la température atteint 2500 K :**  
le gaz devient réactif et les molécules de dioxygène commencent à se dissocier.
- **Autour de 4000 K :**  
le dioxygène est complètement dissocié, la dissociation du diazote débute ainsi que la production de monoxyde d'azote.
- **Finalement, lorsque la température atteint 9000 K :**  
la dissociation du diazote s'achève et les espèces commencent à s'ioniser (*i.e.* à perdre des électrons).

Comme on le verra plus tard, les températures caractéristiques pour lesquelles les différents phénomènes apparaissent dépendent de l'intensité des processus collisionnels et donc de la pression. A haute altitude, où la pression est bien plus faible par exemple, les réactions d'ionisation peuvent être négligeables pour des températures largement supérieures à 9000 K.

## 2.2 Entre équilibre et déséquilibre thermochimiques

Pour bien comprendre et décrire un écoulement hypersonique de rentrée, il faut considérer les notions fondamentales de *relaxation*, d'*équilibre* et de *déséquilibre* du gaz. En définissant le temps caractéristique  $\tau_f$  de l'écoulement comme le temps de convection (*i.e.* le temps moyen mis par une particule pour traverser le domaine d'étude), on peut alors comparer ce temps aux temps caractéristiques des phénomènes thermochimiques mis en jeu. Ainsi, pour les modes d'énergie et la chimie, ces temps caractéristiques correspondent aux temps de relaxation. Pour les modes d'énergie interne, le temps de relaxation  $\tau_{\text{mode}}$  est égal au temps nécessaire pour que suffisamment de collisions aient lieu pour que la température  $T_{\text{mode}}$  s'équilibre avec celle du mode de translation  $T_{\text{tr}}$ . Pour la chimie, les effets de gaz réel induisent une modification de la composition chimique. Dans des conditions de pression données, la température régit la composition du gaz. La Figure 1.1, montre les compositions d'équilibre en fonction de la température à différentes pressions. Lorsque cet état d'équilibre est atteint, la composition n'évolue plus. Le temps de relaxation chimique  $\tau_{\text{ch}}$  désigne alors le temps nécessaire pour que les collisions moléculaires permettent d'atteindre la composition chimique d'équilibre.

En comparant le temps caractéristique de l'écoulement aux différents temps de relaxation, on peut donc qualifier l'état d'équilibre du gaz. D'un point de vue thermique, si l'on considère un mode d'énergie interne quelconque, on distingue les situations suivantes :

- **Lorsque  $\tau_{\text{mode}} \ll \tau_f$ , le mode est à l'équilibre thermique :**  
Le mode s'équilibre de façon quasi-instantanée et sa température n'est pas nécessaire pour décrire l'écoulement.

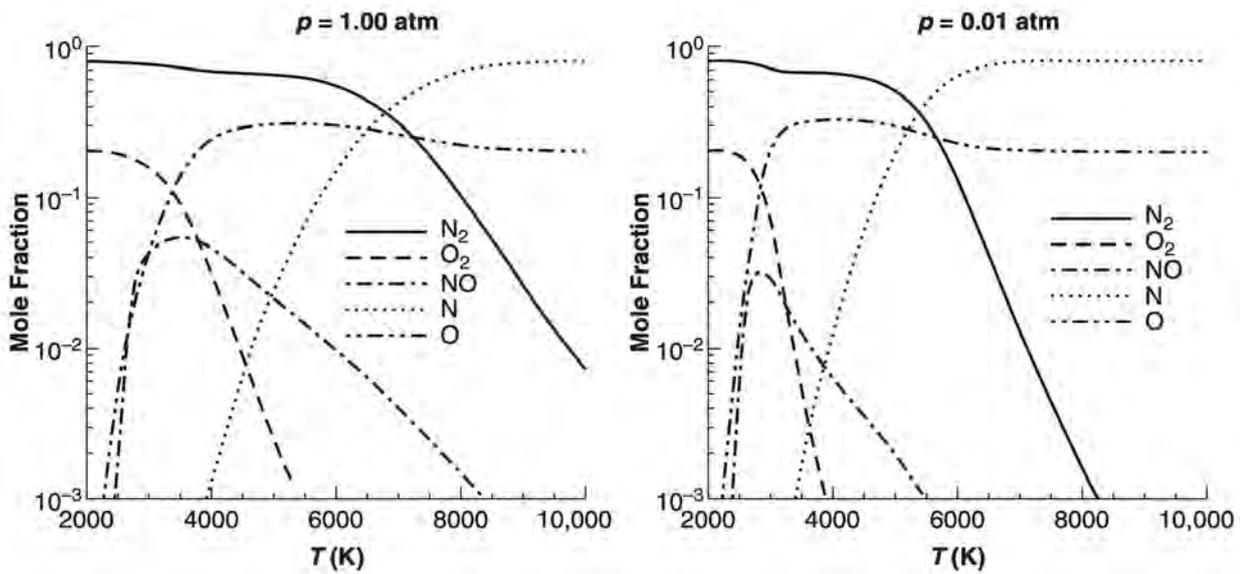


FIGURE 1.1 – Variation de la composition chimique d'équilibre en fonction de la température d'un modèle d'air à 5 espèces à une pression de 101325 Pa et 1013.25 Pa (extrait de [1]).

- **Lorsque  $\tau_{\text{mode}} \gg \tau_f$ , le mode est thermiquement figé :**  
Les collisions ne sont pas assez nombreuses pour que la température du mode en question soit modifiée.
- **Finalement, lorsque  $\tau_{\text{mode}} \simeq \tau_f$ , le mode est en déséquilibre thermique :**  
Dans cet état intermédiaire, la fréquence des collisions est assez élevée pour que l'effet des transferts d'énergie soit visible sur la température  $T_{\text{mode}}$ , mais la fréquence des collisions est tout de même trop faible pour que l'équilibre thermique soit atteint.

On retrouve les mêmes types d'écoulement pour les effets de chimie :

- **Lorsque  $\tau_{\text{ch}} \ll \tau_f$ , l'écoulement est à l'équilibre chimique :**  
Dans ces conditions, l'évolution de la composition chimique du gaz est quasi-instantanée et directement donnée par la température et la pression.
- **Lorsque  $\tau_{\text{ch}} \gg \tau_f$ , l'écoulement est chimiquement figé :**  
La fréquence de collisions est trop faible pour induire des modifications notables de composition.
- **Enfin, lorsque  $\tau_{\text{ch}} \simeq \tau_f$ , l'écoulement est en déséquilibre chimique :**  
Le nombre de collisions est assez élevé pour que des réactions chimiques se produisent, mais il est trop faible pour atteindre la composition d'équilibre.

Étant donné que l'état potentiel d'équilibre, de déséquilibre ou figé est lié à l'intensité des processus collisionnels, cet état est directement dépendant de l'altitude, de la vitesse et de la taille de l'objet. La Figure 1.2 indique, pour une sphère de 60 cm de diamètre, les gammes d'altitude et de vitesse auxquelles les différents phénomènes mentionnés ici interviennent.

### 2.3 Les phénomènes d'interactions gaz-surface

Dans le cadre des écoulements hypersoniques de rentrée, la compréhension des phénomènes d'interactions gaz-surface est déterminante pour l'estimation des grandeurs aérodynamique et aérothermodynamique. De manière générale, les phénomènes d'interactions gaz-surface désignent l'ensemble des mécanismes mis en jeu lorsque les particules de gaz impactent une paroi. Ces phénomènes comprennent aussi bien les interactions chimiques comme la catalycité, que les interactions physiques à l'origine d'une altération des états d'énergie et de vitesse des particules.

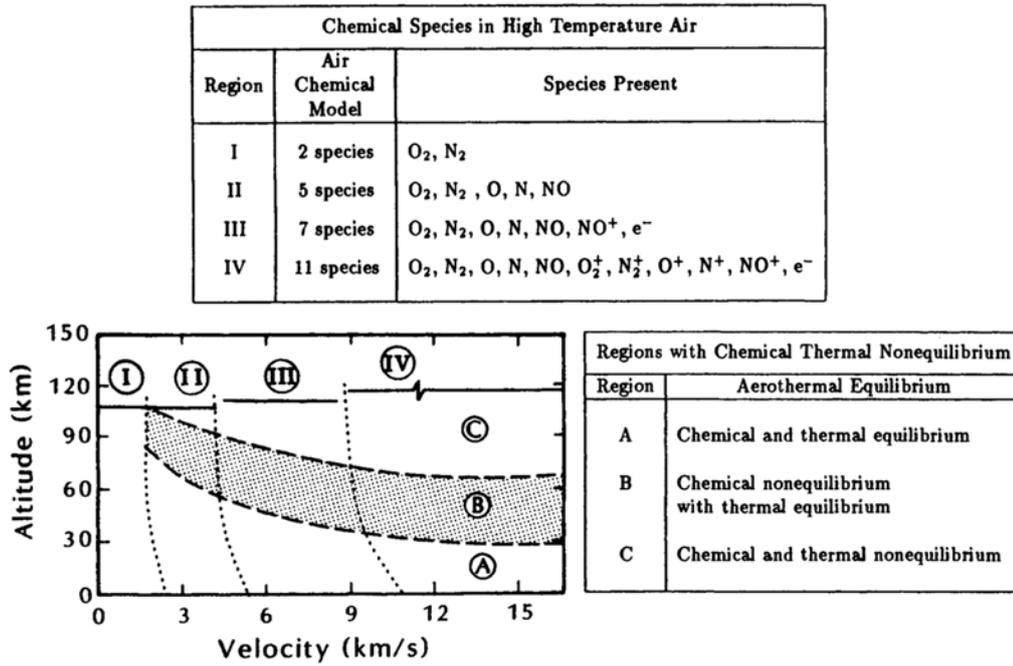


FIGURE 1.2 – Modèles d'air et domaine d'équilibre/déséquilibre thermochimique pour une sphère de 60 cm de diamètre (extrait de [2]).

### 2.3.1 Interactions chimiques

Comme indiqué précédemment, la zone de choc est le siège d'une multitude de réactions chimiques à l'origine de la production d'une grande quantité d'espèces monoatomiques. Lorsque ces dernières interagissent avec une paroi, des réactions de catalycité peuvent se produire. Ces réactions se font suivant quatre mécanismes :

- (i) **Adsorption des atomes** :  
Lorsqu'un atome est capturé par la surface au niveau d'un site libre.
- (ii) **Recombinaison d'Eley-Rideal** :  
Lorsqu'un atome se lie avec une particule adsorbée et que la liaison à la paroi est rompue.
- (iii) **Recombinaison Langmuir-Hinselwood** :  
Lorsqu'un atome adsorbé migre le long de la paroi jusqu'à se lier avec un autre atome adsorbé.
- (iv) **Desorption des atomes** :  
Lorsque les atomes adsorbés ont suffisamment d'énergie pour casser leur liaison à la surface et la quitter.

La probabilité que ces mécanismes se produisent est liée aux propriétés de la surface. Ainsi, on dit qu'un matériau est *totalemt catalytique* lorsque toutes les particules interagissant avec la paroi se recombinent. Inversement, il est dit *totalemt non catalytique* lorsque la paroi est inerte et qu'aucune particule ne se recombine à son contact. En pratique, les matériaux sont à minima *partiellement catalytiques* et donnent lieu à la recombinaison d'une partie des particules. Les réactions de recombinaison étant exothermiques, elles produisent de la chaleur directement transmise à la paroi sous la forme d'un flux de chaleur diffusif  $q_{diff}$ .

### 2.3.2 Interactions physiques

On désigne par interactions physiques les interactions gaz-surface qui donnent lieu à des transferts de quantité de mouvement et d'énergie entre les particules et la paroi. De manière très intuitive, une particule incidente de masse  $m$  dispose d'une vitesse  $v_i$  et d'une énergie  $\epsilon_i$  répartie au sein de

ses différents modes internes actifs. Après collision avec la paroi, la particule dispose désormais d'une vitesse  $v_r$  et d'une nouvelle énergie  $\epsilon_r$ . Lors de cette collision, la particule aura donc cédé à la paroi la quantité de mouvement  $m(v_i - v_r)$ , l'énergie cinétique  $\frac{1}{2}m(v_i^2 - v_r^2)$  et l'énergie interne  $\epsilon_i - \epsilon_r$ . En pratique, la caractérisation de ces interactions est très difficile puisque l'expérience a montré que l'état post-collision des particules dépend à la fois du matériau mais aussi de l'altitude. En général on distingue trois catégories de réflexion [3] :

- (i) Les réflexions **spéculaires**, pour les surfaces lisses non contaminées :
  - La réflexion dépend de l'angle d'incidence uniquement,
  - La quantité de mouvement normale est transmise à la paroi,
  - La quantité de mouvement tangentielle et l'énergie ne sont pas altérées.
- (ii) Les réflexions **diffuses**, typiques des surfaces rugueuses :
  - La réflexion dépend des conditions pariétales uniquement,
  - La particule transfère la totalité de sa quantité de mouvement,
  - D'un point de vue énergétique, la particule s'équilibre thermiquement avec la paroi.
- (iii) Une réflexion **mixte** :
  - Les propriétés de la particules sont modifiées de façon intermédiaire, *i.e.* entre des conditions limites spéculaires et diffuses.

Pour décrire au mieux ces mécanismes, de nombreux modèles d'interactions gaz-surface ont été développés [49]. Dans le cadre de la cinétique des gaz, ces modèles cherchent à décrire ces phénomènes à travers les contributions des flux de particules incidents et réfléchis grâce à des coefficients phénoménologiques. Certains de ces modèles sont présentés dans la section 6 du chapitre 3.

### 3 Paramètres de similitudes pour la classification des régimes de rentrée

Lorsqu'un objet effectue une rentrée atmosphérique, l'écoulement environnant passe par une succession de régimes à mesure que la vitesse de l'objet diminue et que les conditions atmosphériques de température et de masse volumique évoluent. On utilise alors une série de nombres adimensionnés permettant de différencier ces régimes particuliers.

#### 3.1 Nombre de Mach et régime de vitesse

Le nombre de Mach noté  $M_\infty$ , est un paramètre fondamental dans le cadre d'une rentrée atmosphérique puisqu'il est représentatif des conditions de compressibilité dans l'écoulement. D'un point de vue physique, le nombre de Mach s'interprète comme le rapport entre la vitesse moyenne du flux de particules par rapport à la vitesse de propagation de l'information (*i.e.* des propriétés) au sein de l'écoulement. Il se définit donc comme le rapport entre la vitesse  $U_\infty$  de l'objet et la vitesse locale  $a$  du son :

$$M_\infty = \frac{U_\infty}{a} = \frac{U_\infty}{\sqrt{\gamma R_{s,\text{air}} T_\infty}}, \quad (1.2)$$

où  $\gamma = 1.4$ ,  $R_{s,\text{air}}$  et  $T_\infty$  sont respectivement le coefficient de Laplace, la constante spécifique de l'air et la température dans l'écoulement non perturbé. Le nombre de Mach permet alors de distinguer les régimes de vitesse suivants :

- **Lorsque  $M_\infty < 1$ , l'écoulement est subsonique :**  
la vitesse du véhicule est inférieure à celle du son mais les phénomènes de compressibilité sont encore visibles si  $M_\infty \geq 0.4$ . Ce régime intervient après que le véhicule a été fortement ralenti, il correspond donc à la fin d'une rentrée atmosphérique.
- **Lorsque  $M_\infty \simeq 1$ , l'écoulement est transsonique :**  
dans ce régime transitoire, la vitesse du véhicule est très proche de celle du son et des phénomènes d'instabilité dynamiques importants peuvent avoir lieu pour des corps émoussés.

- **Lorsque  $M_\infty > 1$ , l'écoulement est supersonique :**  
dès que la valeur critique de 1 est dépassée, un choc se forme en amont de l'objet. Dans ces conditions, les contraintes thermiques sont encore faibles.
- **Finalement, lorsque  $M_\infty > 5$ , l'écoulement est hypersonique :**  
bien que cette valeur limite ne soit pas absolue, elle constitue la valeur communément acceptée pour repérer ce régime. En réalité, le régime hypersonique se caractérise surtout par l'apparition des effets de gaz réel discutés plus tôt.

La Figure 1.3 présente différents types de trajectoire de rentrée. Pour les trajectoires véhiculaires, on peut distinguer les phases de décélérations fortes en début et en fin de rentrée. Lors d'une rentrée orbitale, l'objet passe d'une vitesse de l'ordre de 7.5 km/s et un Mach de 28 à 120 km d'altitude, à une vitesse et un Mach nuls au niveau du sol.

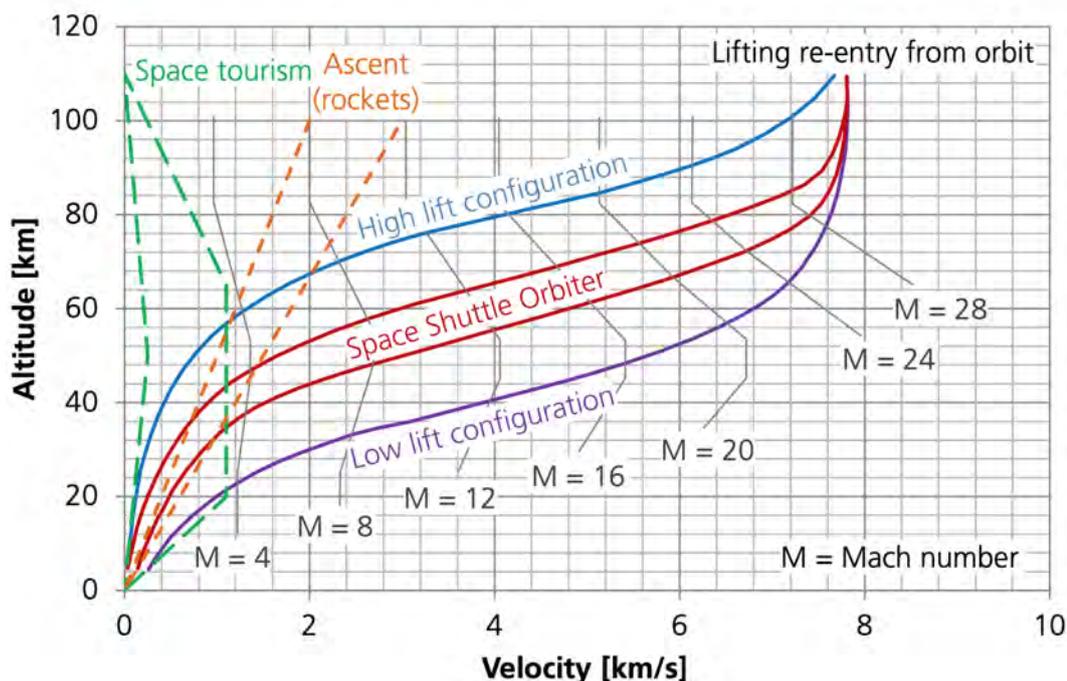


FIGURE 1.3 – Exemples de trajectoires de rentrée altitude-vitesse avec indication du nombre de Mach (extrait de [3]).

### 3.2 Nombre de Knudsen et niveau de raréfaction

Une rentrée atmosphérique est également marquée par d'importantes variations de masse volumique et de température. A partir des données du modèle d'atmosphère **US76** [50], la Figure 1.4 montre la croissance exponentielle de la masse volumique  $\rho$  à mesure que l'altitude diminue et l'évolution de la température  $T$  en fonction des régions d'atmosphère. On peut ainsi y distinguer les cinq couches principales d'atmosphère [48] :

- **La troposphère** s'étend du sol à 8 km aux pôles et 15 km à l'équateur.
- **La stratosphère** se situe entre 15 et 50 km, elle contient la couche d'ozone.
- **La mésosphère** est comprise entre 50 et 80 km.
- **La thermosphère** démarre à environ 80 km et dispose d'une limite supérieure comprise entre 350 et 800 km, selon l'activité solaire.
- **L'exosphère** correspond à la dernière couche de l'atmosphère et n'a pas de limite supérieure stricte. A partir de 5000 km, on y observe toutefois une densité particulière similaire à celle d'un vide interplanétaire.

Pour caractériser l'activité collisionnelle du gaz à une altitude donnée, on peut considérer le libre parcours moyen  $\lambda$  (proportionnel à  $1/\rho$ ) qui correspond à la distance moyenne parcourue par une particule de gaz entre deux collisions. On peut alors introduire le nombre de Knudsen  $Kn$  comme le rapport entre le libre parcours moyen et une longueur de référence  $L_{\text{ref}}$  :

$$Kn = \frac{\lambda}{L_{\text{ref}}}. \quad (1.3)$$

Pour s'assurer de la pertinence de ce critère, il faut veiller à choisir judicieusement la longueur de référence et le libre parcours moyen. En général, ce nombre est utilisé comme un critère global et l'on utilise alors le libre parcours moyen dans l'écoulement non perturbé  $\lambda_{\infty}$ . Pour la longueur de référence, Schlegat [3] suggère d'utiliser le rayon de nez  $Rn$  pour une étude au point d'arrêt tandis que pour une étude des grandeurs aérodynamiques intégrées, la longueur totale de l'objet est plus pertinente. Comme on le verra dans le dernier chapitre du manuscrit, il est surtout primordial de rester cohérent dans le choix de la longueur de référence lorsque les effets de raréfaction sont évalués conjointement sur des géométries distinctes.

A partir du nombre de Knudsen, il est possible de distinguer les régimes de raréfaction suivants [51, 52] :

- **Lorsque  $Kn > 10$ , le régime est moléculaire libre :**

Les interactions entre les particules incidentes et les particules réfléchies par la paroi solide de l'objet sont négligeables. La connaissance de la loi de réflexion des particules permet dans ce cas d'exprimer analytiquement les sollicitations aérodynamiques et aérothermodynamiques exercées sur l'objet.

- **Lorsque  $0.1 < Kn < 10$ , le régime est transitionnel :**

Les interactions gaz-surface et intermoléculaires deviennent importantes, la distribution de vitesse des particules incidentes est affectée par les particules réfléchies.

- **Lorsque  $0.001 < Kn < 0.1$ , le régime est de glissement :**

La couche limite est dans un état particulier où la température du gaz adjacent à la paroi n'est pas égale à la température de paroi et la vitesse n'est pas nulle. On parle alors de saut de température et de vitesse de glissement sur une distance à la paroi de l'ordre d'un libre parcours moyen qui constitue la couche de Knudsen.

- **Lorsque  $Kn < 0.001$ , le régime est continu :**

Ce régime marque la fin du régime raréfié. Les phénomènes de saut de température et de vitesse de glissement disparaissent et l'intégralité des interactions moléculaires est directement prise en compte dans les propriétés de transport.

La Figure 1.5 montre l'évolution du libre parcours moyen et du temps intercollision moyen en fonction de l'altitude et à partir des données du modèle **US76**. En identifiant le libre parcours moyen au nombre de Knudsen obtenu pour une longueur de référence unitaire, on peut faire apparaître les altitudes limites des différents régimes de raréfaction.

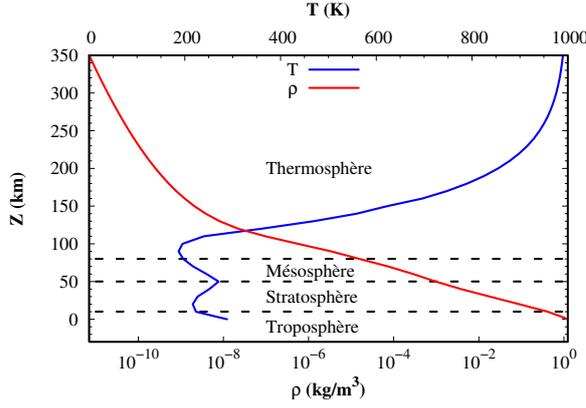
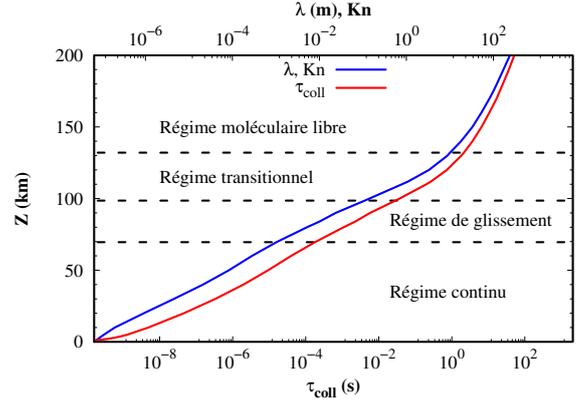
### 3.3 Reynolds, Mach et Knudsen : des paramètres complémentaires

En mécanique des fluides, le nombre de Reynolds est un incontournable des nombres adimensionnés pour la caractérisation des écoulements. Dans le cadre d'une rentrée atmosphérique, ce nombre permet de distinguer les comportements dynamiques de l'écoulement, selon qu'il soit laminaire, transitoire ou turbulent. Il se définit comme le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses selon l'expression :

$$Re = \frac{\rho_{\infty} L_{\text{ref}} U_{\infty}}{\mu_{\infty}}, \quad (1.4)$$

avec  $\mu$  la viscosité de l'écoulement. Pour une longueur de référence fixée, on peut alors relier le nombre de Reynolds aux nombres de Mach et de Knudsen par la relation de von Karman :

$$Kn = \frac{M_{\infty}}{Re} \sqrt{\frac{\gamma \pi}{2}}. \quad (1.5)$$


 FIGURE 1.4 – Température et masse volumique en fonction de l'altitude (modèle **US76**).

 FIGURE 1.5 – Libre parcours moyen, Knudsen unitaire et temps intercollision moyen en fonction de l'altitude (modèle **US76**).

En considérant un écoulement sur une plaque plane de couche limite d'épaisseur  $\delta$ , on peut également définir le nombre de Knudsen basé sur cette épaisseur :

$$Kn_\delta = \frac{\lambda}{\delta}. \quad (1.6)$$

Compte tenu de la relation qui existe entre le nombre de Reynolds et l'épaisseur de couche limite ( $\delta \propto L_{\text{ref}}/\sqrt{Re}$ ), on peut écrire :

$$Kn_\delta \simeq \frac{M_\infty}{\sqrt{Re}}, \quad (1.7)$$

qui constitue le paramètre de raréfaction de Tsien [53, 54]. A partir de ce paramètre, on peut redéfinir les limites des régimes de raréfaction de la manière suivante :

- Lorsque  $M_\infty/\sqrt{Re} < 0.01$ , le régime est continu.
- Lorsque  $0.01 < M_\infty/\sqrt{Re} < 1$ , le régime est de glissement.
- Lorsque  $M_\infty/\sqrt{Re} > 1$  et  $M_\infty/Re < 10$ , le régime est transitionnel.
- Lorsque  $M_\infty/Re > 10$ , le régime est moléculaire libre :

Dans ce cas, l'épaisseur de couche limite est du même ordre que la longueur de référence et les nombres de Knudsen  $Kn$  et  $Kn_\delta$  sont équivalents.

Ce critère de raréfaction est particulièrement utilisé pour des applications expérimentales et l'étude des coefficients aérodynamiques [3, 55]. Plus récemment, les travaux de Singh et Sewhartzentruber [56] sur les corrélations aérothermodynamiques ont mis en évidence l'importance d'un paramètre de raréfaction analogue :

$$Wr = \frac{M_\infty^{2\omega}}{Re}, \quad (1.8)$$

où  $\omega$  est le paramètre de puissance dans la loi de viscosité  $\mu \propto T^\omega$ . En fonction de la grandeur étudiée, un paramètre de raréfaction permet de favoriser l'apparition d'un comportement remarquable par rapport à l'altitude (dépendance linéaire, sinusoïdale, etc.).

## 4 Les écoulements hypersoniques raréfiés

Dans le cadre de cette thèse, on s'intéresse particulièrement à la première phase de rentrée atmosphérique et aux cycles orbitaux en très basses orbites. Par conséquent, les écoulements étudiés

sont principalement des écoulements hypersoniques rencontrés à haute altitude et que l'on qualifie de raréfiés.

#### 4.1 Topologie des écoulements raréfiés

On a vu dans la section précédente que le nombre de Knudsen pouvait être utilisé pour distinguer les différents régimes raréfiés. Ce nombre n'étant toutefois pas absolu, il est parfois plus pertinent de distinguer les régimes de raréfaction à partir de la topologie de l'écoulement. Lors de la rentrée d'une géométrie émoussée, la classification de Probstein [57] reprise par Schlegat [3] permet de distinguer différents régimes à partir de la topologie de la couche de choc :

- A haute altitude, l'écoulement est d'abord dans un état **moléculaire libre** :  
les profils de vitesse et de pression totale sont globalement constants le long de la ligne d'arrêt, jusqu'à ce que les particules entrent en collision avec la paroi.
- L'écoulement devient ensuite **moléculaire perturbé** :  
la pression totale et la vitesse sont modifiées légèrement plus en amont du point d'arrêt. Le flux de particules incident est affecté par les particules réfléchies et les propriétés macroscopiques de l'écoulement ne sont pas pertinentes.
- Plus bas, l'écoulement entre dans un état de **fully merged layer** :  
il n'y a pas de choc à proprement parler mais une couche de choc apparaît en amont de l'objet, à une distance  $\Delta s$  de l'ordre du libre parcours moyen ( $\Delta s \simeq \lambda$ ). La couche limite et la couche de choc se mélangent de manière indiscernable, la pression totale au point d'arrêt augmente et la vitesse décroît jusqu'à une valeur non nulle (vitesse de glissement).
- Lorsque l'écoulement atteint l'état d'**incipient merged layer** :  
un choc épais et diffus apparaît mais il ne forme pas une réelle discontinuité. L'épaisseur de choc  $\delta s$  est de l'ordre du libre parcours moyen infini amont ( $\delta s \simeq \lambda_\infty$ ) et le choc se distingue progressivement de la couche limite.
- Lorsque l'écoulement est dans un état de **viscous layer** :  
l'épaisseur de la couche limite diminue, le choc forme une discontinuité et la pression totale décroît légèrement plus que dans le cas continu. La longueur des effets de saut de température et de glissement diminue ( $\simeq \lambda$ ) et la couche de choc devient essentiellement non visqueuse.
- Finalement lorsque l'écoulement est **continu** :  
la couche limite visqueuse est considérablement moins épaisse et séparée du choc qui forme une discontinuité ( $\delta s \ll \Delta s$ ). Les phénomènes de saut de température et de glissement disparaissent, les effets de viscosité à la paroi deviennent négligeables.

L'illustration de ces régimes est présentée sur la Figure 1.6 où la forme du choc est accompagnée des profils de pression totale et vitesse le long de la ligne d'arrêt.

#### 4.2 Écoulements hypersoniques à haute altitude : entre raréfaction et déséquilibre

Lorsqu'on étudie des écoulements hypersoniques raréfiés rencontrés à haute altitude, il convient de distinguer le caractère raréfié du caractère déséquilibré de l'écoulement. Bien que fondamentalement différentes, ce sont des notions souvent confondues. Comme discuté plus tôt, un écoulement est dit raréfié lorsque la masse volumique est telle que le libre parcours moyen est grand devant une longueur caractéristique donnée. La raréfaction se quantifie donc à partir du nombre de Knudsen global défini par l'équation (1.3).

Pour le terme de déséquilibre, la définition peut varier selon la communauté. Lorsqu'on étudie des écoulements hypersoniques continus, la notion de déséquilibre se rapporte aux conditions chimiques et thermiques, on parle alors de déséquilibre thermo-chimique. En dynamique des gaz, on considère que l'écoulement est dans un état de déséquilibre lorsque la distribution de vitesse n'est pas une distribution d'équilibre. Comme on le verra plus en détails dans la section 2 du chapitre 2, cette définition provient de l'analyse de Chapman-Enskog qui détermine sous quelles conditions

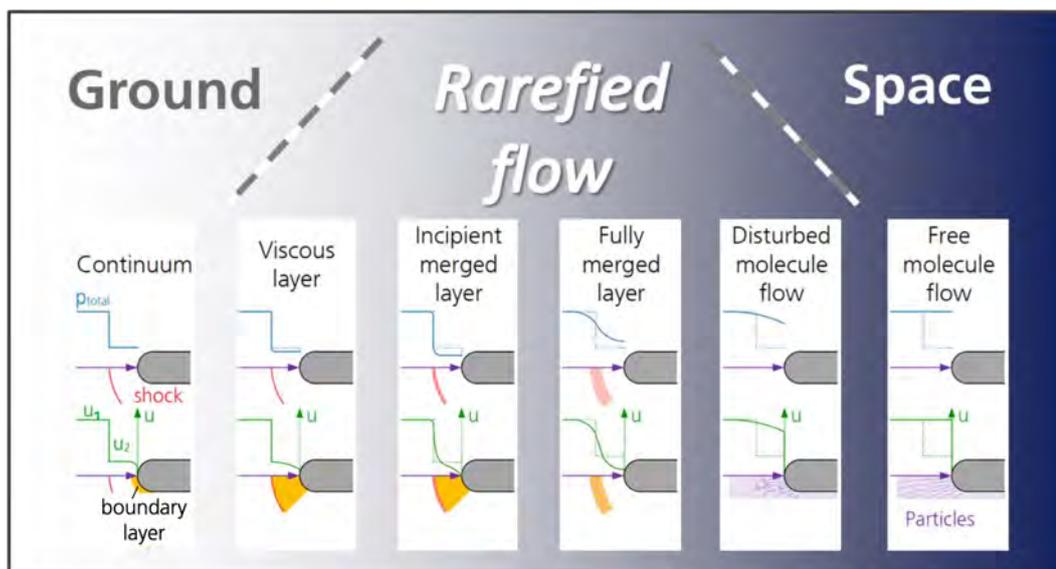


FIGURE 1.6 – Régimes raréfiés caractérisés par la topologie de la couche de choc lors de la rentrée d'une géométrie émoussée (extrait de [3]).

l'équation de Boltzmann se réduit aux équations de Navier-Stokes. Plus particulièrement, cette analyse montre que les équations de Navier-Stokes sont obtenues lorsque la distribution de vitesse présente une faible déviation de la distribution d'équilibre. Mathématiquement, on peut établir que cette déviation est proportionnelle à des termes de la forme :

$$Kn_{GLL-Q} = \frac{\lambda}{Q} \nabla Q, \quad (1.9)$$

où le libre parcours moyen correspond désormais à la valeur locale dans l'écoulement. Le nombre de Knudsen local  $Kn_{GLL-Q}$  ainsi défini s'interprète comme le pourcentage de changement d'une propriété macroscopique  $Q$  sur une longueur de l'ordre du libre parcours moyen. Il permet de quantifier le niveau de déséquilibre dans l'écoulement et la précision locale des équations de Navier-Stokes.

Cette définition du déséquilibre au sens statistique (*i.e.* des distributions) est plus large et le déséquilibre thermochimique en est une manifestation. Le déséquilibre au sens général est donc favorisé par des conditions particulières rencontrées dans certaines régions d'un écoulement [36] :

- Les régions de l'écoulement qui présentent un **temps de résidence particulaire faible** : conséquence des vitesses élevées en régime hypersonique,
- Les régions de l'écoulement au **temps de relaxation élevé** : conséquence des températures importantes à l'origine de l'activation de modes internes plus lents à équilibrer et d'une fréquence de collision trop faible,
- Les régions de l'écoulement aux **gradients élevés** : caractéristique d'un choc ou d'une couche limite,
- Les régions de **libre parcours moyen et temps intercollision importants** : caractéristique des écoulements de haute altitude et des sillages d'objets où la densité particulaire est faible.

On constate ainsi que les écoulements hypersoniques raréfiés remplissent l'ensemble de ces conditions. On peut donc en déduire l'assertion suivante : un niveau de raréfaction élevé implique un niveau de déséquilibre important. La réciproque n'est pas nécessairement vraie puisqu'à la limite du régime continu, certains écoulements hypersoniques peuvent encore présenter des régions localement déséquilibrées.

### 4.3 Equations physiques pour la description des écoulements raréfiés

La Figure 1.7 initialement introduite par Bird dans [4] permet d'identifier les domaines de validité des modèles mathématiques de la mécanique des fluides, en fonction du nombre de Knudsen. Ce schéma, très populaire dans la littérature propre à la dynamique des gaz, se rencontre sous différentes formes. La différence majeure entre les schémas porte sur la limite d'applicabilité des équations de Navier-Stokes qui peut être placée autour de  $10^{-1}$  [4, 51] ou  $10^{-3}$  [3]. En fait, cette différence provient du nombre de Knudsen employé. Sur le schéma original, Bird utilise un Knudsen local pour lequel la longueur de référence est basée sur le gradient adimensionné de la masse volumique. On retrouve donc le nombre de Knudsen défini par l'équation (1.9) avec  $Q \equiv \rho$ . D'après Bird, lorsque  $Kn_{GL-\rho} > 0.1$ , l'erreur commise en appliquant les équations de Navier-Stokes est significative et marque la limite de leur applicabilité. Ce critère, parfois abaissé à une valeur de 5% [1], est appelé critère de *continuum breakdown*. Il indique que l'hypothèse des milieux continus sur laquelle se basent les équations de Navier-Stokes n'est plus vérifiée et qu'une méthode de résolution de l'équation de Boltzmann doit être privilégiée. Si l'on utilise maintenant le Knudsen global défini dans la section 3.2, la limite d'applicabilité des équations de Navier-Stokes coïncide avec la limite du régime continu. La concordance entre ces deux critères confirme donc que pour un écoulement faiblement raréfié, un faible niveau de déséquilibre est attendu. Comme on le verra dans le chapitre 6, lorsque  $Kn \simeq 10^{-3}$ , l'emploi d'une méthode Computational Fluid Dynamic (CFD) basée sur les équations de Navier-Stokes est a priori aussi légitime qu'une méthode basée sur la cinétique des gaz comme la Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Dans ce cas, le contrôle du critère de *continuum breakdown* permet d'identifier les zones où la CFD est susceptible de commettre une erreur importante.

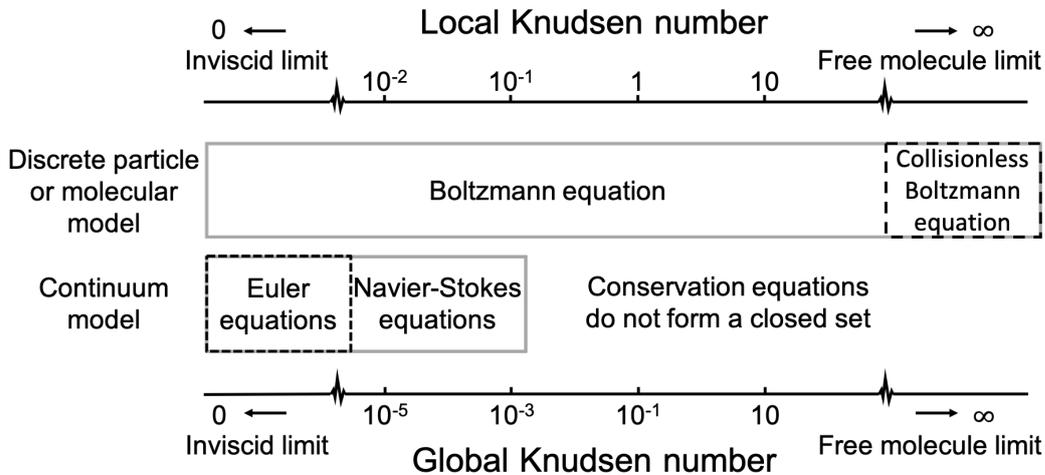


FIGURE 1.7 – Domaines de validité des équations de la mécanique des fluides en fonction du nombre de Knudsen (adapté de [4, 3]).

## 5 Méthode numérique choisie et phénomènes considérés

Dans ce chapitre, les concepts et phénomènes fondamentaux des écoulements hypersoniques ont été introduits. En plus de la complexité due à la composante multi-physique des écoulements hypersoniques de rentrée, l'importance des effets de déséquilibre des écoulements raréfiés se traduit par un niveau de précision considérablement diminué des équations traditionnelles de la mécanique des fluides. Pour cette raison, la DSMC, méthode stochastique de résolution de l'équation de Boltzmann introduite par Bird [4] et présentée dans le chapitre 3, est retenue comme moyen de simulation haute fidélité. En particulier, le code **SPARTA** [58] décrit plus en détails au début du chapitre 4 est choisi pour réaliser l'ensemble des simulations DSMC de cette étude. Cet outil permet de simuler la grande majorité des effets de gaz réels présentés dans ce chapitre. Néanmoins, compte tenu des vitesses considérées ( $< 10$  km/s), les réactions d'ionisation et le mode d'énergie électronique ne seront pas considérés. Ainsi, un modèle d'air à 5 espèces sera utilisé et les modèles de relaxation thermo-chimiques de **SPARTA** permettront de simuler les phénomènes de déséquilibre thermiques et chimiques. Finalement, bien que les effets de catalycité soient non négligeables dans des conditions faiblement raréfiées (*i.e.*  $Kn \leq 0.01$ ) [59, 60], l'absence de modèle de catalycité dans **SPARTA** et, par souci de limiter la quantité de paramètres d'influence, le choix a été fait de ne pas étudier ces effets. Avant la présentation des aspects numériques de ce travail, le chapitre suivant porte sur les concepts fondamentaux de la dynamique des gaz qui permettent de comprendre les principes de la DSMC.



# Chapitre 2

## Dynamique des gaz hors équilibre

### Sommaire

<b>1</b>	<b>La théorie cinétique des gaz : rappel général</b>	<b>43</b>
1.1	Paramètres macroscopiques	44
1.2	Potentiels intermoléculaires et paramètres de collision	45
<b>2</b>	<b>Vers l'équation de Boltzmann</b>	<b>48</b>
2.1	Distribution de vitesse	48
2.2	Equation de Boltzmann et théorème-H	50
2.3	Analyse de Chapman-Enskog et conséquences	53
2.4	Généralisation aux mélanges polyatomiques	54
<b>3</b>	<b>Réactions chimiques et transferts d'énergie</b>	<b>56</b>
3.1	Modes d'énergie internes et distributions de Boltzmann	56
3.2	Déséquilibre thermochimique et phénomènes de relaxation	58
<b>4</b>	<b>Résumé</b>	<b>61</b>

**Introduction :** En s'appuyant sur les ouvrages de Bird [43] et Boyd [1], ce chapitre rappelle les aspects fondamentaux de la dynamique des gaz hors équilibre qui interviennent dans la construction de la méthode Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Les bases de la théorie cinétique sont abordées jusqu'à l'obtention de l'équation de Boltzmann. Afin de mettre en évidence les limites des équations de Navier-Stokes dans le régime raréfié, les liens entre ces équations et celle de Boltzmann sont discutés à travers la théorie de Chapman-Enskog. Pour mieux comprendre les concepts clefs de la DSMC, les notions de mode et transferts d'énergie intermoléculaires ainsi que de relaxation thermochimique sont introduites.

### 1 La théorie cinétique des gaz : rappel général

Si les équations de Navier-Stokes datent de la première moitié du 19<sup>ème</sup> siècle avec la publication des équations de Navier [61] en 1823 étendues ensuite par Stokes [62] en 1845, l'équation de Boltzmann et ses travaux sur la théorie cinétique [63] ne viennent que plus tard, en 1872. Les motivations inhérentes au domaine sont de faire le lien entre le comportement d'un gaz à l'échelle microscopique (déplacement et collisions des particules) et ses propriétés macroscopiques (température, masse volumique, pression, etc.) indépendamment des conditions d'équilibre ou de continuité du milieu.

En théorie cinétique des gaz, on considère le mouvement des particules<sup>1</sup> dû à leur vitesse et aux collisions qu'elles subissent. Chaque particule possède une masse (typiquement entre  $10^{-26}$  et  $10^{-25}$  kg), une taille (de l'ordre d'un angstrom,  $10^{-10}$  m), une position, une vitesse et une énergie interne. Dans les conditions normales de température et de pression (*i.e.* au niveau de la mer), un  $m^3$  d'air contient environ  $2.5 \times 10^{25}$  molécules et le libre parcours moyen est de l'ordre de  $6 \times 10^{-8}$  m. A 100 km d'altitude, la densité numérique de l'air chute à  $1.2 \times 10^{19}$  molécules par  $m^3$  et le libre parcours moyen se situe autour de 14 cm [50].

1. Tout au long du document, on désignera par particule un atome ou une molécule d'une espèce chimique quelconque.

## 1.1 Paramètres macroscopiques

Comme cela a été dit précédemment, le but de la théorie cinétique est de relier les propriétés macroscopiques aux propriétés microscopiques. Considérons un volume  $\delta V$  d'un **gaz mono espèce monoatomique** dilué<sup>2</sup> constitué de  $N$  particules chacune de masse, diamètre et vitesse  $(m, d, v_i)_{i=1,N}$ . L'équation d'état du gaz est l'équation des gaz parfaits :

$$p = \rho R_s T, \quad (2.1)$$

avec  $\rho$  la masse volumique ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ),  $T$  la température (K) et  $R_s$  la constante spécifique du gaz ( $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ) donnée par  $R_s = R/M$  où  $R = 8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$  est la constante universelle des gaz parfaits et  $M$  est la masse molaire du gaz ( $\text{kg}/\text{mol}$ ). Cette relation peut également s'écrire :

$$p = n k T, \quad (2.2)$$

où  $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$  est la constante de Boltzmann et  $n$  désigne la densité numérique de particules du gaz ( $\cdot/\text{m}^3$ ), qui pour le volume  $\delta V$  ( $\text{m}^3$ ) s'écrit :

$$n = \frac{\sum_{i=1}^N 1}{\delta V}. \quad (2.3)$$

La masse volumique correspondante vaut alors :

$$\rho = m \frac{\sum_{i=1}^N 1}{\delta V} = m n \quad (2.4)$$

et la vitesse moyenne  $\langle v \rangle$  du gaz vérifie :

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i, \quad (2.5)$$

où les  $v_i$  sont les vitesses des  $N$  particules. Pour la suite, on adopte la notation :

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i, \quad (2.6)$$

pour la moyenne de toute quantité moléculaire  $Q$ .

La vitesse d'une particule s'écrit alors :

$$\vec{v}_i = \langle \vec{v} \rangle + \vec{v}'_i. \quad (2.7)$$

où  $v'_i$  est la vitesse thermique (*i.e.* la différence entre la vitesse de la particule  $v_i$  et la vitesse moyenne  $\langle v \rangle$ ). Le tenseur de pression  $\bar{p}$  s'exprime en coordonnées cartésiennes à partir d'un bilan de quantité de mouvement à travers un élément de surface [43]. Ses composantes sont données par :

$$\bar{p} = nm \langle \vec{v}' \otimes \vec{v}' \rangle = \rho \langle \vec{v}' \otimes \vec{v}' \rangle = \rho \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}'_i \otimes \vec{v}'_i \right]. \quad (2.8)$$

La pression scalaire  $p$  s'obtient à partir de la trace du tenseur de pression :

$$p = \frac{1}{3} \rho \langle v'^2 \rangle = \frac{1}{3} \rho \left[ \langle v'_x{}^2 \rangle + \langle v'_y{}^2 \rangle + \langle v'_z{}^2 \rangle \right]. \quad (2.9)$$

Comme le mouvement des particules leur confère une énergie cinétique de translation, on peut définir l'énergie cinétique spécifique moyenne du gaz :

$$e_{tr} = \frac{1}{2} \langle v'^2 \rangle. \quad (2.10)$$

2. On dit qu'un gaz est dilué lorsque  $\delta \gg d$  où  $\delta$  est la distance moyenne entre les particules du gaz et  $d$  le diamètre moyen des particules.

En combinant les équations (2.9) et (2.10), on obtient :

$$p = \frac{2}{3}\rho e_{\text{tr}}. \quad (2.11)$$

On définit alors la température  $T$  par la relation :

$$e_{\text{tr}} = \frac{3}{2}R_s T = \frac{3}{2}\frac{k}{m}T, \quad (2.12)$$

En combinant les équations (2.10) et (2.12), on retrouve l'équation des gaz parfaits (2.1). On peut alors définir la température du gaz comme étant la température de translation :

$$T_{\text{tr}} = \frac{1}{3}\frac{m}{k}\langle v'^2 \rangle. \quad (2.13)$$

La sous-section suivante montre comment les interactions entre les particules permettent de relier les coefficients de transport aux propriétés particulières introduites ici.

## 1.2 Potentiels intermoléculaires et paramètres de collision

Pour un gaz dilué, la compréhension des interactions intermoléculaires est déterminante pour décrire les phénomènes de transport. A l'échelle moléculaire, les particules interagissent selon un champ qui résulte des forces électrostatiques de Coulomb agissant sur les charges élémentaires (protons et neutrons) des corps en interaction [1]. Des forces d'attraction faibles et des force répulsives fortes agissent lorsque la distance de séparation des particules est respectivement grande ou faible. En général, les forces d'attraction sont négligeables et seul le potentiel dû aux forces répulsives est considéré. En reprenant les notations de Sharipov [64], le potentiel intermoléculaire  $U(r)$  se définit comme le potentiel d'énergie de deux particules séparées d'une distance  $r$ . Quand le potentiel est connu, la force  $F$  d'interaction entre ces particules est alors donnée par la relation :

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr}. \quad (2.14)$$

En pratique, il est difficile d'accéder à une expression exacte du potentiel  $U(r)$  c'est pourquoi des simplifiés des potentiels interatomiques, aussi appelés modèles d'interaction, sont utilisés. Les deux potentiels les plus simples sont les potentiels Hard Sphere et Inverse Power Law.

- **Le potentiel Hard Sphere (HS)** est le plus élémentaire. Comme son nom l'indique, il propose de considérer les particules comme des sphères dures de diamètre  $d$  et s'écrit :

$$U(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < d \\ 0 & \text{sinon} \end{cases},$$

et possède l'interprétation physique suivante. Deux particules ne peuvent être distantes d'une longueur inférieure à leur diamètre, et lorsque leur distance de séparation  $r > d$ , alors la force d'interaction est nulle. Ce modèle doit en grande partie son succès à sa simplicité puisqu'il ne dépend que du diamètre  $d$  facilement accessible à partir d'une mesure de viscosité ou d'une conductivité thermique [64]. Toutefois, ce modèle présente un inconvénient majeur : il est incapable de capturer une dépendance réaliste de la viscosité à la température, ce qui est particulièrement problématique lorsque la température varie de façon significative [65]. Comme on le verra par la suite, ce modèle de potentiel est à l'origine du modèle de collision du même nom avec lequel il est généralement confondu.

- **Le potentiel Inverse Power Law (IPL)** propose une expression plus réaliste du potentiel interatomique :

$$U(r) = \frac{a}{(\eta - 1)r^{\eta-1}}, \quad (2.15)$$

et de la force d'interaction associée :

$$F(r) = \frac{a}{r^\eta}.$$

Là aussi, l'expression des paramètres  $a$  et  $\eta$  peut être obtenue à partir de mesures de viscosité puisque le paramètre  $\eta$  peut être relié à la loi de puissance  $\mu \propto T^\omega$  selon la relation :

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{\eta} = \omega. \quad (2.16)$$

Un tel potentiel présente une pente de croissance finie du niveau énergétique en fonction de la distance entre les particules. Ainsi, contrairement au modèle HS, ce potentiel est capable de restituer la loi de puissance entre la viscosité et la température. Comme l'expliquent Gimelshein et Wysong [65], ce modèle de potentiel a été peu utilisé en DSMC à cause de son coût de calcul jugé trop important.

Comme on le verra dans le chapitre 3, aujourd'hui la DSMC s'appuie principalement sur des modèles de collision (en anglais *cross section collision models*) qui constituent une simplification des modèles d'interaction interatomique.

Afin d'introduire les autres paramètres de collision, considérons maintenant deux particules de vitesses et masses respectives  $(\vec{c}, m_1)$  et  $(\vec{z}, m_2)$  subissant une collision binaire qui induit les nouvelles vitesses  $\vec{c}'$ ,  $\vec{z}'$ . On peut alors introduire les vitesses relatives :

$$\begin{aligned} \vec{g} &= \vec{c} - \vec{z}, \\ \vec{g}' &= \vec{c}' - \vec{z}'. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Le centre de masse de masse réduite  $m_r$  est :

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (2.18)$$

et l'écriture des équations de conservation de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement permet d'obtenir la relation :

$$g = g'. \quad (2.19)$$

où  $g$  et  $g'$  dénotent respectivement  $\|\vec{g}\|$  et  $\|\vec{g}'\|$ . La dynamique d'une collision binaire peut être vue de trois manières. Elle peut être considérée dans le référentiel du laboratoire (Figure 2.1a), dans le référentiel du centre de masse (Figure 2.1b) ou dans le référentiel de vitesse relative (Figure 2.1c). Pour analyser les collisions, on se place généralement dans le référentiel de vitesse relative où la particule se déplace avec la vitesse  $\vec{g}$  dans un champ stationnaire de particules de vitesse  $\vec{Z}$ . On peut ensuite introduire les paramètres de collision représentés sur la Figure 2.1d. Ainsi, en se plaçant dans le plan normal à  $\vec{g}$  contenant l'origine O, la section efficace différentielle  $\sigma d\Omega$  pour une collision définie par les paramètres d'impact  $b$  et  $\epsilon$  s'écrit :

$$\sigma d\Omega = b db d\epsilon, \quad (2.20)$$

où  $d\Omega$  est l'angle solide unitaire selon le vecteur  $\vec{g}'$ ,  $b$  est la distance d'approche maximale de trajectoire non perturbée et  $\epsilon$  est l'angle entre le plan de collision et le plan de référence. La section efficace différentielle représente la probabilité qu'une particule impliquée dans une collision soit déviée selon l'élément  $d\Omega$ . Toujours d'après la Figure 2.1d, l'angle solide  $d\Omega$  vérifie la relation :

$$d\Omega = \sin \chi d\chi d\epsilon. \quad (2.21)$$

Il en vient :

$$\sigma = \frac{b}{\sin \chi} \frac{db}{d\chi}. \quad (2.22)$$

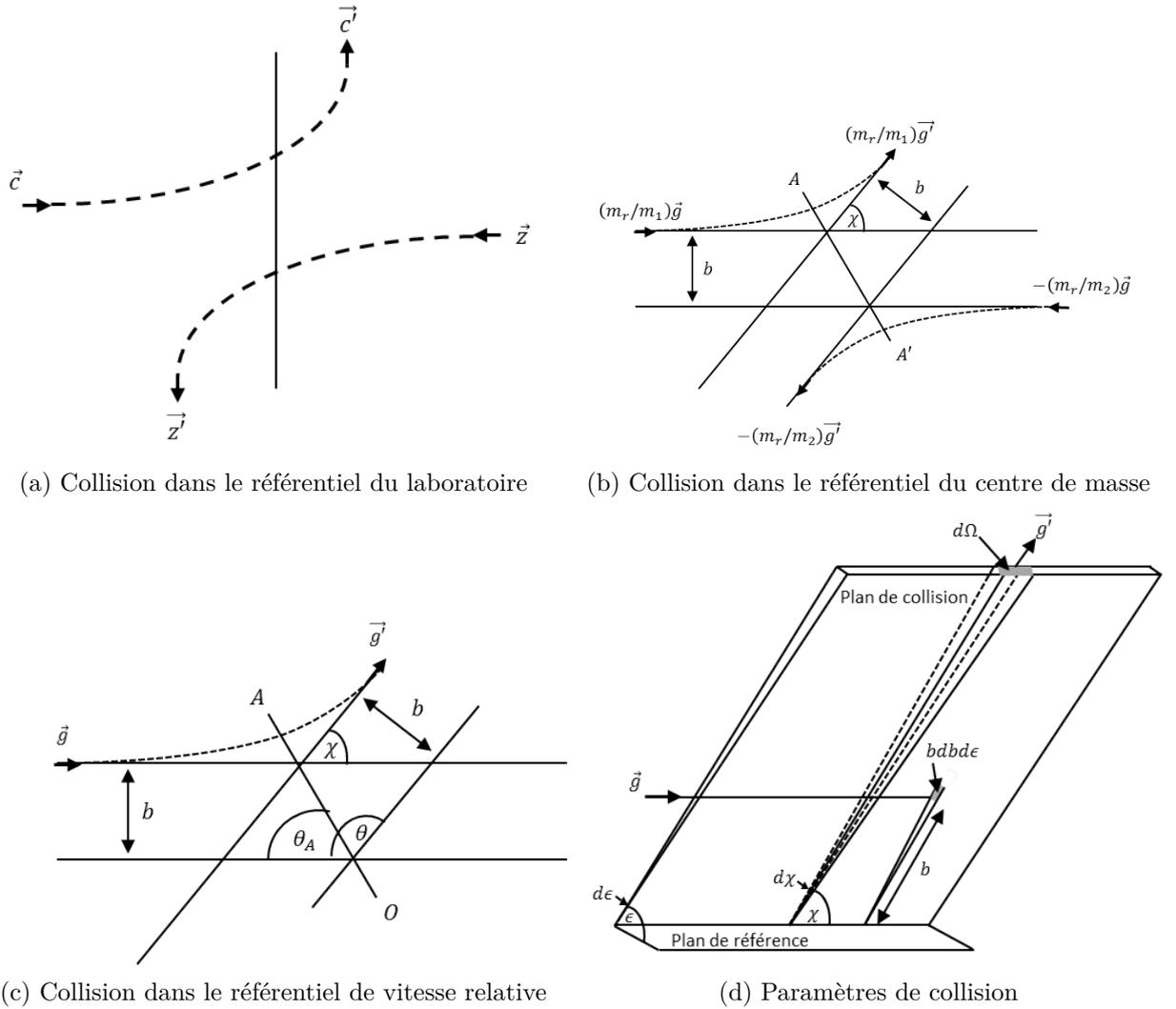


FIGURE 2.1 – Représentation d’une collision binaire dans différents référentiels (reproduit d’après [1]).

Finalement, on peut introduire la section efficace totale  $\sigma_T$  par l’équation :

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega = 2\pi \int_0^{4\pi} \sigma \sin \chi d\chi. \quad (2.23)$$

On notera par ailleurs que la quantité  $g \sigma d\Omega$  s’interprète comme le volume balayé en espace par unité de temps par chaque collision.

Pour le cas particulier du modèle HS, la Figure 2.2 permet de décrire une collision binaire pour une sphère dure. En remarquant que  $\chi = \pi - 2\theta_A$ , on peut établir la relation suivante :

$$\frac{b}{d} = \sin \theta_A = \cos(\chi/2). \quad (2.24)$$

L’équation (2.22) donne alors :

$$\sigma = \frac{d^2}{4}. \quad (2.25)$$

Cette équation montre que  $\sigma$  est indépendant de l’angle de diffusion  $\chi$  ce qui signifie que la diffusion d’une sphère dure est isotrope dans le référentiel du centre de masse. Finalement, la section efficace totale s’écrit :

$$\sigma_T = \pi d^2, \quad (2.26)$$

et correspond simplement à la surface de la sphère d'influence d'une sphère dure. Si les deux particules en collision possèdent des diamètres différents, il suffit de remplacer  $d$  par le diamètre moyen  $d_{12} = 1/2(d_1 + d_2)$ .

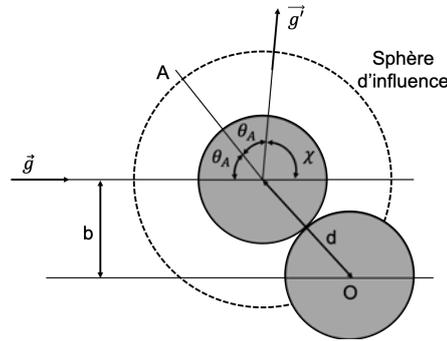


FIGURE 2.2 – Schéma de collision binaire et sphère d'influence d'une sphère dure de diamètre  $d$ .

## 2 Vers l'équation de Boltzmann

Dans la section précédente, les bases de la théorie cinétique ont été vues. Dans cette section, la théorie mathématique sous-jacente permettant d'aboutir à l'équation de Boltzmann et les différentes formes sous lesquelles cette équation peut s'écrire sont aussi présentées. Enfin, l'analyse de Chapman-Enskog, qui permet d'obtenir les équations de Navier-Stokes à partir de l'équation de Boltzmann, est abordée.

### 2.1 Distribution de vitesse

Compte tenu de la densité de particules dans des conditions normales de pression et de température au niveau de la mer, il est impossible de décrire l'évolution d'un système gazeux de manière déterministe. L'alternative proposée par la théorie cinétique est une approche statistique faisant appel à des fonctions de distribution de vitesse [43]. Considérons un échantillon de gaz homogène de l'espace physique contenant  $N$  molécules identiques. Une molécule possède une vitesse  $\vec{c}$  de composantes  $(u, v, w)$  dans les directions de l'espace cartésien. De la même manière que le triplet  $(x, y, z)$  définit un espace physique,  $(u, v, w)$  définit un espace de vitesse et chaque molécule peut être représentée dans cet espace par le point défini par son vecteur vitesse. On définit alors la fonction de distribution de vitesse  $f(\vec{c})$  par la relation :

$$dN = N f(\vec{c}) d\vec{c} = N f(\vec{c}) du dv dw, \quad (2.27)$$

où  $dN$  est le nombre de particules dans l'échantillon de composantes de vitesse dans l'élément  $[u; u + du] \times [v; v + dv] \times [w; w + dw]$  et le volume  $du dv dw$  désigne le volume élémentaire de l'espace de vitesse  $d\vec{c}$ . Par convention, on remplace souvent  $f(\vec{c})$  par  $f$ .

Comme de plus,  $N$  et  $dN$  se réfèrent aux particules du même volume d'espace physique, on peut écrire :

$$\frac{dN}{N} = f(\vec{c}) d\vec{c}, \quad (2.28)$$

la fraction de molécules dans l'élément d'espace de vitesse  $d\vec{c}$ . Chaque molécule peut être représentée par un point dans cet espace de vitesse, l'intégration de cette dernière relation donne donc :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f du dv dw = \int_{-\infty}^{+\infty} f d\vec{c} = N/N = 1. \quad (2.29)$$

La fonction de distribution est donc une fonction normée.

Les moyennes macroscopiques définies dans la section 1.1 peuvent être considérées comme des moyennes de particules constitutives d'un échantillon de gaz homogène décrit par la fonction de distribution de vitesse de l'espace de vitesse. Le lien entre une propriété macroscopique  $Q$  et cette fonction de distribution se fait par la relation suivante :

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{N} \int_N Q dN. \quad (2.30)$$

D'après (2.27), on peut alors écrire :

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} Q f(\vec{c}) N d\vec{c}, \quad (2.31)$$

ce qui devient finalement :

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q f d\vec{c}. \quad (2.32)$$

Avec cette écriture, on appelle  $\langle Q \rangle$  un moment de la fonction de distribution de vitesse, et la vitesse moyenne est donnée par la relation :

$$\langle \vec{c} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{c} f d\vec{c}. \quad (2.33)$$

Lorsque  $Q$  est une puissance entière de la vitesse, on parle de moment d'ordre  $i$  :

$$Q = (\vec{c})^i, \quad i \in \mathbb{N}. \quad (2.34)$$

Plus généralement, les propriétés macroscopiques sont des fonctions de la position et du temps et il peut être souhaitable d'exprimer explicitement cette dépendance dans la fonction de distribution de vitesse. Comme indiqué par Bird [43], en considérant la position  $\vec{r}$  tel que  $d\vec{r}$  définisse un volume élémentaire de l'espace physique, alors  $d\vec{c} d\vec{r}$  désigne un volume élémentaire de l'espace des phases qui est la combinaison de l'espace physique et l'espace de vitesse. Dans cet espace, la fonction de distribution s'écrit  $\mathcal{F}(\vec{r}, \vec{c}, t)$  et est donnée par l'expression :

$$dN = \mathcal{F}(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} d\vec{r}, \quad (2.35)$$

où  $dN$  représente désormais le nombre de molécules dans l'élément  $d\vec{c} d\vec{r}$  de l'espace des phases. Contrairement à  $f$ ,  $\mathcal{F}$  définit le nombre de molécules plutôt que la fraction moléculaire dans l'espace des phases. Cette fonction de distribution n'est pas normée et son intégration sur l'espace des phases entier donne le nombre  $N$  de molécules contenues dans le système considéré.

En appliquant la fonction  $f$  à l'espace physique élémentaire  $d\vec{r}$ , le nombre  $N$  dans l'équation (2.27) représente le nombre de molécules dans  $d\vec{r}$  tandis que  $dN$  représente le nombre de molécules dans l'élément  $d\vec{c} d\vec{r}$  de l'espace des phases. On peut donc écrire la relation suivante :

$$dN = N f(\vec{c}) d\vec{c} = \mathcal{F}(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} d\vec{r}, \quad (2.36)$$

et comme la densité numérique  $n$  dans l'élément de l'espace des phases vaut  $N/d\vec{r}$ , on a :

$$n f(\vec{c}) = \mathcal{F}(\vec{r}, \vec{c}, t). \quad (2.37)$$

Ainsi, lorsque  $f$  est employée dans un contexte qui dépend aussi de  $\vec{r}$  et  $t$ , on a :

$$n f \equiv \mathcal{F}. \quad (2.38)$$

On tire ici profit de cette identité et seule  $f$  sera employée dans les sections suivantes.

## 2.2 Equation de Boltzmann et théorème-H

Les équations (2.36) et (2.37) montrent que le nombre de particules  $dN$  dans un élément de l'espace des phases vaut :

$$dN = n f(\vec{c}) d\vec{c} d\vec{r}. \quad (2.39)$$

Par conséquent, la variation temporelle du nombre de particules dans cet élément vaut :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (n f(\vec{c}) d\vec{c} d\vec{r}). \quad (2.40)$$

On dénombre ensuite trois phénomènes à l'origine de la variation du nombre de particules dans un élément de l'espace des phases [43, 1].

(i) La **convection à travers  $d\vec{r}$  due au mouvement des particules de vitesse  $\vec{c}$**  :

$$\left( \frac{\partial N}{\partial t} \right)_1 = -\vec{c} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} = -\vec{c} \frac{\partial n f}{\partial \vec{r}} d\vec{c} d\vec{r}. \quad (2.41)$$

(ii) La **convection à travers  $d\vec{c}$  due aux forces extérieures à l'origine d'une accélération  $\vec{a}$  des particules** :

$$\left( \frac{\partial N}{\partial t} \right)_2 = -\vec{a} \frac{\partial N}{\partial \vec{c}} = -\vec{a} \frac{\partial n f}{\partial \vec{c}} d\vec{c} d\vec{r}. \quad (2.42)$$

(iii) Les **collisions intermoléculaires** qui dispersent les particules de vitesse  $\vec{c}$  hors de l'élément  $d\vec{c} d\vec{r}$ .

Le nombre de particules dispersées hors de l'élément  $d\vec{c} d\vec{r}$  s'obtient à partir de l'analyse suivante [43, 1]. Pour obtenir une expression représentative des particules déviées hors de l'élément, il faut considérer à la fois les vitesses pré et post-collision des particules impliquées dans les collisions. En particulier, on s'intéresse aux collisions d'une particule de vitesse  $\vec{c}$  avec une particule de vitesse  $\vec{z}$  de sorte que leurs vitesses post-collision respectives valent  $\vec{c}'$  et  $\vec{z}'$ . On appelle cela une collision de classe  $(\vec{c}, \vec{z}) \rightarrow (\vec{c}', \vec{z}')$  et l'on cherche à calculer le taux de diffusion des molécules de vitesse  $\vec{c}$  hors de l'élément  $d\vec{c} d\vec{r}$  suite à une collision de cette classe. On prend une particule de vitesse  $\vec{c}$  comme particule test qui se déplace à la vitesse  $g$  dans le champ stationnaire de particules de vitesse  $\vec{z}$ . Comme on l'a vu dans la sous-section 1.2, le volume balayé en espace physique par la section efficace de cette classe de collision vaut  $g \sigma d\Omega$  et le nombre de particules de vitesse  $\vec{z}$  par unité de volume dans l'espace physique vaut :

$$n f(\vec{z}) d\vec{z}. \quad (2.43)$$

Ainsi, le nombre de collisions de cette classe subies par la particule test par unité de temps vaut :

$$n f(\vec{z}) g \sigma d\Omega d\vec{z}. \quad (2.44)$$

Le nombre de particules de vitesse  $\vec{c}$  dans l'élément d'espace des phases  $d\vec{r} d\vec{c}$  est :

$$n f(\vec{c}) d\vec{r} d\vec{c}. \quad (2.45)$$

Ainsi, le nombre total de collisions par unité de temps vaut :

$$n^2 f(\vec{c}) f(\vec{z}) g \sigma d\Omega d\vec{z} d\vec{c} d\vec{r}. \quad (2.46)$$

De façon similaire, on peut exprimer le nombre de collisions inverses de classe  $(\vec{c}', \vec{z}') \rightarrow (\vec{c}, \vec{z})$  par unité de temps :

$$n^2 f(\vec{c}') f(\vec{z}') g' (\sigma d\Omega)' d\vec{z}' d\vec{c}' d\vec{r}. \quad (2.47)$$

Par symétrie entre les collisions directes et inverses, la Jacobienne de la transformation entre les états pré et post-collision est unitaire. On en déduit la relation :

$$|\sigma d\Omega d\vec{c} d\vec{z}| = |(\sigma d\Omega)' d\vec{c}' d\vec{z}'|. \quad (2.48)$$

Comme de plus,  $g = g'$ , le terme (2.47) devient :

$$n^2 f(\vec{c}') f(\vec{z}') g \sigma d\Omega d\vec{z} d\vec{c} d\vec{r}. \quad (2.49)$$

L'intégration du bilan de flux de particules sur la totalité de l'angle solide  $d\Omega$  et sur l'ensemble des  $N$  particules de l'espace de vitesse  $d\vec{z}$  donne :

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_3 = \iiint_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} n^2 [f(\vec{c}') f(\vec{z}') - f(\vec{c}) f(\vec{z})] g \sigma d\Omega d\vec{z} d\vec{c} d\vec{r}. \quad (2.50)$$

Pour alléger les notations, l'intégrale triple sur les dimensions de l'espace de vitesse est simplement représentée par une intégrale simple. La combinaison des équations (2.40), (2.41), (2.42) et (2.50) permet d'écrire l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial n f}{\partial t} + \vec{c} \frac{\partial n f}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \frac{\partial n f}{\partial \vec{c}} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} n^2 [f(\vec{c}') f(\vec{z}') - f(\vec{c}) f(\vec{z})] g \sigma d\Omega d\vec{z}. \quad (2.51)$$

Par ailleurs, on dit qu'un gaz est à l'équilibre lorsque la fonction de distribution de vitesse est invariante en temps et en espace. Cette propriété est compatible avec le membre de droite de l'équation (2.51) si :

$$f(\vec{c}') f(\vec{z}') = f(\vec{c}) f(\vec{z}). \quad (2.52)$$

C'est le principe de *detailed balance* qui stipule qu'à l'équilibre, une collision de classe  $(\vec{c}, \vec{z}) \rightarrow (\vec{c}', \vec{z}')$  est compensée par une collision inverse de classe  $(\vec{c}', \vec{z}') \rightarrow (\vec{c}, \vec{z})$ . Cette relation est en fait nécessaire comme nous le montrons ci-dessous.

En introduisant la fonction  $H$  de Boltzmann :

$$H = \langle \ln(f) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{c}) \ln(f(\vec{c})) d\vec{c}, \quad (2.53)$$

les calculs de Boyd [1] montrent que :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{n}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} \ln \left[ \frac{f(\vec{c}) f(\vec{z})}{f(\vec{c}') f(\vec{z}')} \right] [f(\vec{c}') f(\vec{z}') - f(\vec{c}) f(\vec{z})] g \sigma d\Omega d\vec{z} d\vec{c}. \quad (2.54)$$

Il en vient donc  $\frac{\partial H}{\partial t} \leq 0$  ( $H$  est décroissante) et à l'équilibre  $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$  implique :

$$\ln \left[ \frac{f(\vec{c}) f(\vec{z})}{f(\vec{c}') f(\vec{z}')} \right] = 0. \quad (2.55)$$

Ce résultat constitue le théorème H. La décroissance de  $H$  a pour interprétation que les effets des collisions tendent à amener le système vers un état d'équilibre. Une autre conséquence de ce théorème est l'égalité suivante à l'équilibre :

$$\ln(f(\vec{c})) + \ln(f(\vec{z})) = \ln(f(\vec{c}')) + \ln(f(\vec{z}')). \quad (2.56)$$

D'après [66], toute fonction de la vitesse vérifiant la relation (2.56) peut s'écrire comme une combinaison linéaire de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique (aussi appelés invariants collisionnels). Pour  $\vec{c} = (c_1, c_2, c_3)$ , on obtient donc la relation :

$$\ln(f(\vec{c})) = a_1 m + m(a_2 c_1 + a_3 c_2 + a_4 c_3) + a_5 \frac{m}{2} (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2), \quad (2.57)$$

où  $(a_i)_{i=1,5}$  sont des constantes réelles. L'exploitation de la symétrie de  $f$  et l'utilisation des moments d'ordre 0 et 2 permettent de lever les inconnues jusqu'à l'obtention de l'expression de la fonction de distribution de vitesse à l'équilibre appelée maxwellienne. Dans le cas général d'un gaz en mouvement à la vitesse moyenne  $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)$ , la maxwellienne s'écrit :

$$f(\vec{c}) = \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{m}{2k T} \left( (c_1 - u_1)^2 + (c_2 - u_2)^2 + (c_3 - u_3)^2 \right) \right], \quad (2.58)$$

dont l'unité  $(m.s^{-1})^{-3}$  est bien en accord avec le fait que  $f(\vec{c}) dc_1 dc_2 dc_3$  est une probabilité (*i.e.* sans dimension). Il convient ici de souligner que  $\vec{c}$  est un vecteur vitesse et cette distribution représente la densité de probabilité de trouver une particule de vitesse  $\vec{c} = (c_1, c_2, c_3)$  dans  $[\vec{c}, \vec{c} + d\vec{c}]$ . La densité de probabilité de la norme de vitesse  $c = \|\vec{c}\|$  est obtenue par passage en coordonnées sphériques de l'équation (2.58) pour un gaz au repos :

$$f(c, \phi, \theta) dc d\phi d\theta = \left(\frac{m}{2\pi k T}\right)^{3/2} c^2 \sin(\phi) \exp\left(-\frac{mc^2}{2k T}\right) dc d\phi d\theta. \quad (2.59)$$

En intégrant sur  $\phi$  et  $\theta$ , on obtient la densité de probabilité de  $c$  :

$$G(c) dc = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k T}\right)^{3/2} c^2 \exp\left(-\frac{mc^2}{2k T}\right) dc. \quad (2.60)$$

A partir de cette distribution on peut calculer la vitesse la plus probable  $c_{\text{mp}}$  en norme, en résolvant  $G'(c) = 0$  :

$$c_{\text{mp}} = \sqrt{\frac{2k T}{m}}. \quad (2.61)$$

On peut également calculer la vitesse moyenne  $\langle c \rangle$  :

$$\langle c \rangle = \int_0^\infty c G(c) dc = \sqrt{\frac{8k T}{\pi m}}, \quad (2.62)$$

et la vitesse carrée moyenne  $\langle c^2 \rangle$  :

$$\langle c^2 \rangle = \int_0^\infty c^2 G(c) dc = \sqrt{\frac{3k T}{m}}. \quad (2.63)$$

En suivant les calculs de Boyd [1], le modèle HS et la maxwellienne de vitesse permettent de calculer analytiquement la fréquence de collision  $\nu_{\text{coll}}$  des particules du gaz :

$$\nu_{\text{coll}} = \sqrt{\frac{8k T}{\pi}} n \sigma_T \sqrt{\frac{2}{m}}. \quad (2.64)$$

En divisant la vitesse moyenne  $\langle c \rangle$  donnée par l'équation (2.62) par la fréquence de collision  $\nu_{\text{coll}}$ , on obtient le libre parcours moyen  $\lambda$  :

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma_T}. \quad (2.65)$$

En utilisant l'expression du modèle HS pour exprimer  $\sigma_T$ , on trouve finalement :

$$\lambda^{\text{HS}} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n d^2}. \quad (2.66)$$

En utilisant le diamètre d'une espèce donnée (cf. Annexe A de [43]), cette dernière expression fournit un moyen très simple d'estimer le nombre de Knudsen d'un écoulement.

Si l'on revient à l'équation de Boltzmann (2.51), on peut prendre les moments de cette équation et introduire l'équation de changement suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \langle Q \rangle) + \frac{\partial}{\partial r}(n \langle v Q \rangle) = [\dot{Q}], \quad (2.67)$$

où  $Q$  est une propriété particulière et  $[\dot{Q}]$  la variation de propriété due aux collisions intermoléculaires. Cette dernière formulation permettant de relier l'équation de Boltzmann aux équations de Navier-Stokes, est l'objet du paragraphe suivant.

### 2.3 Analyse de Chapman-Enskog et conséquences

Bien que la théorie cinétique de Boltzmann ait été introduite en 1872, il a fallu attendre les années 1916-1917 pour que l'analyse de Chapman-Enskog [67, 68] permette de faire le lien entre l'équation de Boltzmann et les équations de Navier-Stokes et de fixer un domaine de validité à ces équations. En reprenant les calculs de Boyd et Schwartzentruber [1] pour un gaz monoatomique qui ne subit pas de force extérieure, l'équation de changement (2.67) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(n \langle Q \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_j}(n \langle v_j Q \rangle) = [\dot{Q}], \quad (2.68)$$

où  $Q = Q(v_i)$  est indépendant de  $x_j$  et  $t$ . En utilisant la notation  $v'_i = v_i - \langle v_i \rangle$  et en reprenant l'équation (2.68) pour  $Q$ , celui-ci prenant successivement les valeurs des invariants collisionnels  $m$ ,  $m\vec{v}_i$  et  $\frac{1}{2}mv_i^2$ , on obtient le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \langle v_j \rangle) = 0, \quad (2.69)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \langle v_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \langle v_i \rangle \langle v_j \rangle) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \langle v'_i v'_j \rangle), \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho \langle \vec{v} \rangle^2 + \frac{1}{2} \rho \langle v'^2 \rangle \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \langle v_j \rangle \left( \frac{1}{2} \rho \langle \vec{v} \rangle^2 + \frac{1}{2} \rho \langle v'^2 \rangle \right) \right] \\ = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{1}{2} \rho \langle v'_j v'^2 \rangle + \rho \langle v'_j v'_k \rangle \langle v_k \rangle \right), \end{aligned} \quad (2.71)$$

où les indices  $i, j$  et  $k$  prennent les valeurs  $x, y, z$ , en adoptant la convention d'Einstein sur les indices répétés. En outre, nous utilisons les notations complémentaires :

$$\begin{aligned} \langle \vec{v} \rangle^2 &= \langle v_x \rangle^2 + \langle v_y \rangle^2 + \langle v_z \rangle^2, \\ \langle v'^2 \rangle &= \langle v_x'^2 \rangle + \langle v_y'^2 \rangle + \langle v_z'^2 \rangle. \end{aligned}$$

Comme cela a été vu dans la section 1.1, à partir du tenseur de pression :

$$\bar{p}_{ij} = \rho \langle v'_i v'_j \rangle, \quad (2.72)$$

on peut définir la pression scalaire à partir de la partie isotrope du tenseur :

$$p = \frac{1}{3} \rho \left( \langle v_x'^2 \rangle + \langle v_y'^2 \rangle + \langle v_z'^2 \rangle \right), \quad (2.73)$$

et le tenseur de cisaillement visqueux à partir de la partie non-isotrope :

$$\bar{\tau}_{ij} = - \left( \rho \langle v'_i v'_j \rangle - \delta_{ij} p \right). \quad (2.74)$$

On définit finalement le vecteur flux de chaleur  $\vec{q}$  de composantes :

$$q_i = \frac{1}{2} \rho \langle v'_i (v_x'^2 + v_y'^2 + v_z'^2) \rangle. \quad (2.75)$$

A ce stade, on note que, par définition, l'énergie spécifique de translation (Section 1.1) s'écrit :

$$e_{\text{tr}} = \frac{1}{2} \langle v'^2 \rangle. \quad (2.76)$$

Finalement, en introduisant l'enthalpie spécifique  $h$  :

$$h = e_{\text{tr}} + \frac{p}{\rho}, \quad (2.77)$$

on peut réécrire le système (2.69)-(2.71) sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \langle v_j \rangle) = 0, \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \langle v_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \langle v_i \rangle \langle v_j \rangle) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho e_{\text{tr}} + \frac{1}{2} \rho \langle \vec{v} \rangle^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \langle v_j \rangle \left[ h + \frac{1}{2} \langle \vec{v} \rangle^2 \right] \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{jk} \langle v_k \rangle - q_j). \quad (2.80)$$

Ces équations ont la même forme que les équations de Navier-Stokes mais ne sont à ce stade, pas fermées. En effet,  $\bar{\tau}$  et  $\bar{q}$  ne s'expriment pas en fonction de  $\rho$ ,  $\vec{v}$  et  $e_{\text{tr}}$ . Après fermeture par l'analyse de Chapman-Enskog, on retrouve la formulation usuelle des équations de Navier-Stokes où les expressions du tenseur  $\bar{\tau}$  et du vecteur  $\bar{q}$  sont données par :

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left( \frac{\langle \partial v_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\langle \partial v_j \rangle}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \langle v_k \rangle}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (2.81)$$

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T_{\text{tr}}}{\partial x_i}, \quad (2.82)$$

où  $\mu$  et  $\kappa$  désignent respectivement le coefficient de viscosité et de conductivité thermique.

Comme indiqué dans le chapitre 1, l'analyse de Chapman-Enskog permet de fermer ces équations en déterminant le forme de la fonction de distribution qui réduit l'équation de Boltzmann aux équations de Navier-Stokes. En particulier, l'analyse résumée par Boyd [1] montre que cette distribution correspond à la fonction de distribution de vitesse à l'équilibre faiblement perturbée (perturbation d'ordre 1) et que cette perturbation est proportionnelle à des Knudsen de longueur de gradient  $Kn_{GLL-Q}$ . Par conséquent, la fermeture des équations de conservation est conditionnée par l'hypothèse d'une perturbation d'ordre 1 qui n'est plus valable lorsque ces termes ne sont pas suffisamment faibles. Cette condition est à l'origine du critère garantissant la précision des équations de Navier-Stokes :  $|Kn_{GLL-Q}| < 0.05$ . Une autre interprétation possible de l'analyse de Chapman-Enskog est de voir les expressions de  $\bar{\tau}$  et  $\bar{q}$  comme des termes d'ordre  $O(Kn)$  ce qui implique que l'équation de Navier-Stokes est une approximation de l'équation de Boltzmann à  $O(Kn^2)$  près (*i.e.* une approximation d'ordre 2). Lorsque le nombre de Knudsen n'est pas suffisamment faible, les limites des équations de Navier-Stokes sont donc évidentes.

Un autre aspect de l'analyse de Chapman-Enskog est qu'elle permet de relier les paramètres de collision aux propriétés de transport. En effet, l'analyse de Chapman-Enskog appliquée à l'équation de Boltzmann pour le cas d'un gaz simple monoatomique permet d'obtenir les expressions de la viscosité  $\mu$  et de la conductivité thermique  $\kappa$  suivantes [1] :

$$\mu = \frac{6}{8} \sqrt{\pi m k T_{\text{tr}}} \left[ \left( \frac{m}{4k T_{\text{tr}}} \right)^4 \int_0^\infty \int_0^{4\pi} g^7 \exp \left( -\frac{m g^2}{4k T_{\text{tr}}} \right) \sin^2(\chi) \sigma d\Omega dg \right]^{-1}, \quad (2.83)$$

$$\kappa = \frac{15}{4} \left( \frac{k}{m} \right) \mu. \quad (2.84)$$

## 2.4 Généralisation aux mélanges polyatomiques

L'ensemble des résultats présentés jusqu'ici se généralise pour le cas des mélanges polyatomiques et l'analyse de Chapman-Enskog permet de calculer les coefficients de transport binaires de chaque paire d'espèces  $(i, j)$  du mélange selon les relations ci-dessous [1] :

$$\mu_{ij} = \frac{5}{8} \frac{kT}{\Omega(2,2)}, \quad (2.85)$$

$$\mathcal{D}_{i,j} = \frac{3}{16} \frac{kT}{n m_r \Omega^{(1,1)}}, \quad (2.86)$$

où  $\mu_{i,j}$  et  $\mathcal{D}_{i,j}$  correspondent respectivement aux coefficients binaires de viscosité et de diffusion. L'intégrale de collision  $\Omega^{(l,s)}$  s'écrit :

$$\Omega^{(l,s)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m_r}} \int_0^{+\infty} e^{-a^2} a^{2s+3} Q^{(l)} da, \quad (2.87)$$

avec  $a^2 = \frac{1}{2} m_r g^2 / kT$  et  $m_r$  la masse réduite de la paire de particules. En tenant compte de la définition de la section efficace différentielle (équation 2.20), la section efficace de collision  $Q^{(l)}$  s'écrit :

$$Q^{(l)} = \int_0^{4\pi} (1 - \cos^l(\chi)) \sigma d\Omega = 2\pi \int_0^{+\infty} (1 - \cos^l(\chi)) b db. \quad (2.88)$$

Avec les équations (2.85)-(2.88) on peut introduire les sections efficaces de viscosité  $\sigma_\mu$  et de quantité de mouvement  $\sigma_M$  :

$$\sigma_\mu = Q^{(2)} = 2\pi \int_0^{+\infty} \sin^2(\chi) b db, \quad (2.89)$$

$$\sigma_M = Q^{(1)} = 2\pi \int_0^{+\infty} (1 - \cos(\chi)) \chi b db. \quad (2.90)$$

Les équations (2.85)-(2.86) deviennent alors :

$$\mu_{ij} = \frac{\frac{5}{8} \sqrt{2\pi m_r kT}}{\left(\frac{m_r}{2kT}\right)^4 \int_0^{+\infty} g^7 \sigma_\mu e^{-m_r g^2 / 2kT} dg}, \quad (2.91)$$

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{\frac{3}{16} \sqrt{2\pi m_r kT}}{\left(\frac{m_r}{2kT}\right)^3 n \int_0^{+\infty} g^5 \sigma_M e^{-m_r g^2 / 2kT} dg}. \quad (2.92)$$

On notera par ailleurs que dans le cas particulier d'un gaz simple monoatomique où  $T = T_{tr}$  et  $m_r = \frac{m}{2}$ , l'équation (2.91) se réduit à l'équation (2.83).

Finalement, les modèles d'interaction ou de collision fournissent une expression analytique de l'angle de diffusion  $\chi(g, b)$  dont dépendent les sections efficaces  $\sigma_\mu$  et  $\sigma_M$  et a fortiori les coefficients de transport  $\mu$  et  $\mathcal{D}$ . Ainsi, pour le modèle de la sphère dure HS, l'équation (2.24) permet d'exprimer directement l'angle de diffusion  $\chi$  comme suit :

$$\chi = 2 \cos^{-1}(b/d). \quad (2.93)$$

Comme il ne dépend pas de la vitesse relative  $g$ , les sections efficaces de viscosité (2.89) et de quantité de mouvement (2.90) s'écrivent :

$$\sigma_\mu^{HS} = \frac{2}{3} \sigma_T^{HS} = \frac{2}{3} \pi d^2, \quad (2.94)$$

$$\sigma_M^{HS} = \sigma_T^{HS} = \pi d^2. \quad (2.95)$$

En injectant le résultat (2.94) dans (2.91) le calcul donne :

$$\mu^{HS} = \frac{5}{16} \frac{1}{\pi d^2} \sqrt{2\pi m_r kT}, \quad (2.96)$$

et l'on note alors que la viscosité du modèle HS varie en  $\sqrt{T}$ . Comme indiqué au début du chapitre, cette relation entre la viscosité et la température n'est pas réaliste. Une analyse similaire peut être conduite avec des modèles d'interactions moléculaires plus complexes comme le modèle IPL ou les modèles de collision Variable Hard Sphere (VHS) et Variable Soft Sphere (VSS) présentés dans le chapitre 3. Toutefois, la simplicité du modèle HS facilite grandement les calculs analytiques ainsi que la mise en évidence du lien entre le choix du modèle moléculaire et les propriétés de transport du gaz simulé.

### 3 Réactions chimiques et transferts d'énergie

Dans la section précédente, plusieurs aspects fondamentaux de la théorie cinétique ont été abordés : l'équation de Boltzmann, la notion de distribution de vitesse et l'analyse de Chapman-Enskog permettant de tisser un lien mathématique rigoureux entre l'équation de Boltzmann et l'équation de Navier-Stokes. Toutefois, la théorie cinétique de Boltzmann étudie les interactions des particules en faisant abstraction de leur structure interne. Dans cette section, les aspects chimiques et énergétiques des particules à l'échelle microscopique sont discutés. Cette étude comprend à la fois les réactions de dissociation, recombinaison et d'échange qui peuvent avoir lieu au sein du gaz ainsi que la manière dont l'énergie d'un écoulement est stockée dans les modes internes des particules.

#### 3.1 Modes d'énergie internes et distributions de Boltzmann

La théorie quantique constitue le cadre physique dans lequel est étudiée la structure énergétique interne des particules. L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la physique quantique. Son expression ne sera pas donnée ici mais la résolution de cette équation se réduit à la résolution d'un problème aux valeurs propres qui met en évidence le résultat suivant : les solutions physiques de l'équation de Schrödinger sont des valeurs d'énergie discrètes ou *quantifiées* qui correspondent aux valeurs propres de l'opérateur de l'équation. Ce constat a pour conséquence que le niveau d'énergie (en Joule) des particules est tel qu'il ne peut prendre que certaines valeurs discrètes. On appelle état d'énergie l'ensemble des nombres quantiques nécessaires à la description du système, et l'on appelle dégénérescence le nombre d'états d'énergie distincts qui mène au même niveau d'énergie.

Le niveau d'énergie se définit comme la somme des contributions des différents modes d'énergie. On en dénombre 4 [1] :

- (i) L'énergie de translation  $\epsilon_{\text{tr}}$  est le mode d'énergie dû au mouvement de translation des particules. L'énergie de translation d'une particule de masse  $m_i$  dans un cube de longueur  $L$  est donnée par la formule :

$$\epsilon_{\text{tr}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_i L} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad (2.97)$$

où les nombres  $(n_1, n_2, n_3)$  sont les nombres quantiques de mouvement de translation dans les directions  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$  et  $\hbar$  est la constante de Planck réduite ( $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$  J.s). Comme cela a été vu dans la section précédente, la moyenne de l'énergie de translation  $\langle \epsilon_{\text{tr}} \rangle$  est liée à l'énergie cinétique spécifique  $e_{\text{tr}}$  par la relation :

$$\langle \epsilon_{\text{tr}} \rangle = m e_{\text{tr}} = \frac{3}{2} k T_{\text{tr}}. \quad (2.98)$$

Pour ce mode d'énergie, l'espacement quantique des niveaux d'énergie est très faible au point que le mode est considéré continu.

- (ii) Le mode d'énergie de rotation  $\epsilon_{\text{rot}}$  est le fruit du moment d'inertie interne des particules diatomiques de type  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$  ou  $\text{NO}$ . Sous l'hypothèse du rotor rigide<sup>3</sup>, l'énergie de rotation d'une particule diatomique s'écrit :

$$\epsilon_{\text{rot}} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{4\pi^2 I}, \quad (2.99)$$

où  $I$  est le moment d'inertie de la molécule et l'entier  $l$  est le nombre quantique de rotation. Pour la majorité des particules, à l'exception du dihydrogène  $\text{H}_2$ , l'espacement des niveaux quantifiés d'énergie de rotation est assez faible pour que sa nature quantique soit négligeable.

---

3. L'hypothèse du rotor rigide considère les particules diatomiques comme un système de deux atomes séparés d'une distance  $r$  fixe.

- (iii) L'énergie de vibration  $\epsilon_{\text{vib}}$  est un mode dû aux vibrations des deux atomes le long de la liaison chimique qui les relie. Sous l'hypothèse de l'oscillateur harmonique<sup>4</sup>, l'énergie de vibration d'une particule polyatomique s'écrit :

$$\epsilon_{\text{vib}} = 2\pi \left( l_{\text{vib}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \nu_o, \quad (2.100)$$

où  $l_{\text{vib}}$  est le nombre quantique de vibration et  $\nu_o$  la fréquence d'oscillation. L'espacement des niveaux d'énergie de vibration est en général assez large pour que sa nature quantifiée ne soit pas négligeable.

- (iv) L'énergie électronique  $\epsilon_{\text{el}}$  est le dernier mode d'énergie. Ce mode est déterminé par la position des électrons de la particule sur les différentes orbitales disponibles. En général l'état fondamental<sup>5</sup> de ce mode d'énergie est le plus stable et le transfert d'électron vers une orbite plus haute représente un état électronique excité. Pour des écoulements hypersoniques raréfiés, l'activation du mode d'énergie électronique correspond à des conditions extrêmes de rentrée interplanétaire où la vitesse de rentrée est supérieure à 10 km/s. Conformément aux limites de l'étude mentionnées à la fin du chapitre 1, ce mode n'a pas été considéré.

L'énergie totale d'une particule  $i$  notée  $\epsilon_i$  vaut donc :

$$\epsilon_i = \epsilon_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{rot}} + \epsilon_{\text{vib}} + \epsilon_{\text{el}}, \quad (2.101)$$

et l'énergie interne  $\epsilon_{\text{int}}$  :

$$\epsilon_{\text{int}} = \epsilon_{\text{rot}} + \epsilon_{\text{vib}} + \epsilon_{\text{el}}. \quad (2.102)$$

Selon les cas, certaines contributions sont négligeables par rapport à d'autres. En soufflerie basse densité par exemple où les conditions permettent difficilement d'atteindre 1000 K, seuls les modes de translation et de rotation sont actifs. La contribution du mode d'énergie de vibration ne devient significative que pour des températures supérieures à sa température d'activation  $\theta_v$ . A titre d'exemple, les températures d'activation du mode de vibration de l'azote  $\text{N}_2$ , du dioxygène  $\text{O}_2$  et du monoxyde d'azote  $\text{NO}$  valent respectivement 3400, 2270 et 2740 K. Pour la rotation, elles sont comprises entre 2 et 3 K.

Pour un gaz à l'équilibre, la distribution d'énergie interne parmi les différents modes est une distribution de Maxwell-Boltzmann [51] d'expression :

$$\frac{n_i}{N} = \frac{g_i}{Q_{\text{mode}}} \exp\left(-\frac{\epsilon_{i,\text{mode}}}{kT}\right), \quad (2.103)$$

où  $N$  est le nombre total de particules,  $n_i$  désigne le nombre de particules dans le  $i^{\text{ième}}$  état d'énergie interne,  $g_i$  est la dégénérescence du  $i^{\text{ième}}$  état d'énergie interne et  $Q_{\text{mode}}$  est la fonction de partition définie comme la somme sur les niveaux d'énergie pondérée par la dégénérescence des états :

$$Q_{\text{mode}} = \sum_i g_i \exp\left(-\frac{\epsilon_{i,\text{mode}}}{kT}\right). \quad (2.104)$$

En fait, la relation (2.103) s'interprète comme la probabilité de trouver une particule dans l'état d'énergie  $i$ .

Le théorème d'équipartition de l'énergie stipule que chaque degré de liberté  $\zeta_{\text{mode}}$  des modes d'énergie contribue à l'énergie totale à hauteur de  $\frac{1}{2} k T_{\text{mode}}$ , c'est-à-dire :

$$\langle \epsilon_{\text{mode}} \rangle = \frac{1}{2} \zeta_{\text{mode}} k T_{\text{mode}} = \frac{\sum_i g_i \epsilon_{i,\text{mode}} e^{(-\epsilon_{i,\text{mode}}/k T_{\text{mode}})}}{Q_{\text{mode}}}, \quad (2.105)$$

4. L'hypothèse de l'oscillateur harmonique considère l'interaction des deux atomes de masse réduite  $m_r$  comme le potentiel d'un oscillateur harmonique  $V(r) = \frac{k_o(r-r_e)^2}{2}$  où  $k_o = 4\pi m_r \nu_o^2$  est la constante de raideur et  $\nu_o$  la fréquence d'oscillation.

5. L'état fondamental d'un mode d'énergie est le niveau d'énergie quantifié le plus bas.

et la température globale  $T_{ov}$  vaut alors :

$$T_{ov} = \frac{\sum_{\text{mode}} \zeta_{\text{mode}} T_{\text{mode}}}{\sum_{\text{mode}} \zeta_{\text{mode}}}. \quad (2.106)$$

En pratique le nombre de degrés de liberté est connu et la relation (2.105) permet de calculer  $T_{\text{mode}}$  et la fonction de distribution d'énergie  $f$  des différents modes selon la relation d'Hinshelwood :

$$f(\epsilon_{\text{mode}}, T_{\text{mode}}) = \frac{1}{\Gamma(\zeta_{\text{mode}}/2) k T_{\text{mode}}} \left( \frac{\epsilon_{\text{mode}}}{k T_{\text{mode}}} \right)^{\zeta_{\text{mode}}/2-1} e^{-\epsilon_{\text{mode}}/k T_{\text{mode}}}, \quad (2.107)$$

où la fonction  $\Gamma$  est définie par :

$$\Gamma(t) = \int_0^{\infty} x^{t-1} e^{-x} dx. \quad (2.108)$$

On notera toutefois que la relation d'Hinshelwood n'est valable que pour les modes continus. De ce fait, lorsque la nature quantique des modes de vibration et électronique est prise en compte, il convient d'utiliser des distributions d'énergie différentes. En DSMC, les distributions d'énergie servent à déterminer l'énergie des particules lors de l'initialisation et de la redistribution résultant des collisions.

Lorsque le temps de relaxation de la distribution d'énergie est lent comparé au temps inter-collision, on parle de déséquilibre. Cette notion introduite dans le chapitre 1 est discutée de manière plus approfondie dans le paragraphe suivant.

### 3.2 Déséquilibre thermochimique et phénomènes de relaxation

Pour rappel, pour les écoulements hypersoniques, les origines du déséquilibre thermochimique proviennent principalement de quatre facteurs : la faiblesse du temps de résidence, l'importance du temps de relaxation, la raideur des gradients et l'importance du libre parcours moyen [36]. D'un point de vue thermique, ces conditions correspondent à des niveaux de température particulièrement élevés à l'origine de l'activation des modes d'énergie. D'un point de vue chimique, l'importance des températures entraîne l'activation des processus chimiques. Dans les deux cas, le niveau de raréfaction se traduit par l'augmentation des temps caractéristiques de relaxation et ralentit l'équilibrage des processus.

Les collisions subies par les particules se divisent en deux catégories selon les conséquences qu'elles ont sur les propriétés des particules :

- (i) **Les collisions élastiques** lors desquelles seul un changement de vitesse est induit.
- (ii) **Les collisions inélastiques** qui donnent lieu aux transferts d'énergie entre les différents modes et aux réactions chimiques potentielles.

On désigne par processus en temps fini les différents phénomènes qui peuvent résulter des collisions inélastiques entre deux particules et on associe à chaque processus un temps caractéristique ou de relaxation  $\tau$ . Ce nombre caractérise la durée nécessaire pour qu'un nombre suffisant de collisions ait lieu pour que le processus s'équilibre. Il existe deux types de processus en temps fini :

- (i) **Les échanges d'énergie** entre les modes d'énergie des molécules qui s'effectuent avec les temps de relaxation  $\tau_{tr}$  pour la translation,  $\tau_{rot}$  pour la rotation et  $\tau_{vib}$  pour la vibration.
- (ii) **Les réactions chimiques** qui ont lieu selon les temps de relaxation  $\tau_{ch}$ .

On peut alors exprimer le temps caractéristique d'un processus  $\tau_{pro}$  par la relation suivante :

$$\tau_{pro} = Z_{pro} \times \tau_{coll}, \quad (2.109)$$

où  $Z_{pro}$  est le nombre de collisions nécessaire à l'équilibrage dudit processus et  $\tau_{coll}$  est le temps inter-collision moyen. En général, on observe les relations d'ordre suivantes [1] :

$$Z_{tr} \simeq 1 < Z_{rot} \simeq 10 < Z_{vib} \simeq 1000 < Z_{ch}, \quad (2.110)$$

$$\tau_{\text{tr}} < \tau_{\text{rot}} < \tau_{\text{vib}} < \tau_{\text{ch}}. \quad (2.111)$$

La comparaison du temps de relaxation associé à un processus  $\tau_{\text{proc}}$  au temps caractéristique de l'écoulement  $\tau_f$ , permet d'évaluer un état de déséquilibre ( $\tau_{\text{proc}} \simeq \tau_f$ ), d'équilibre ( $\tau_{\text{proc}} \ll \tau_f$ ) ou figé ( $\tau_{\text{proc}} \gg \tau_f$ ).

### 3.2.1 Relaxation des modes d'énergie

La relaxation des modes d'énergie interne se produit via des interactions entre les différents modes. Pour une molécule diatomique, la modification des états d'énergie se fait via des transitions Vibration-Translation (V-T), Vibration-Vibration (V-V) ou Rotation-Translation (R-T) par exemple. En DSMC on considère généralement les particules comme des oscillateurs harmoniques simples et l'on privilégie l'utilisation de procédures d'échange d'énergie phénoménologiques qui ne prennent pas en compte les échanges V-V ni les niveaux quantiques de vibration anharmonique. Il convient toutefois de noter que l'attribution des valeurs d'énergie est propre à chaque particule ce qui permet de simuler efficacement et précisément des écoulements dont les distributions d'énergie sont déséquilibrées, c'est-à-dire qui ne suivent pas des distributions de type Maxwell-Boltzmann [51].

Les données expérimentales de relaxation sont essentiellement composées de températures de vibration et de rotation obtenues par des expériences en tubes à choc et se traduisent analytiquement par l'équation de Landau-Teller pour décrire la relaxation du mode de vibration et de Jeans pour le mode de rotation :

$$\frac{dE_{\text{vib}}}{dt} = \frac{E_{\text{vib}}^*(T) - E_{\text{vib}}(t)}{\tau_{\text{vib}}}, \quad (2.112)$$

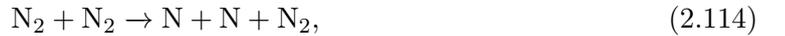
$$\frac{dE_{\text{rot}}}{dt} = \frac{E_{\text{rot}}^*(T) - E_{\text{rot}}(t)}{\tau_{\text{rot}}}, \quad (2.113)$$

où  $E_{\text{mode}}^*(T)$  et  $E_{\text{mode}}(t)$  sont respectivement l'énergie du mode à l'équilibre à température  $T$  et l'énergie du système pour le mode associé à l'instant  $t$  [5]. Comme on le verra dans le chapitre 3, la méthode Larsen-Borgnakke [69] est un algorithme simple permettant de simuler ce type de relaxation cinétique.

### 3.2.2 Relaxation chimique

En présence d'un déséquilibre chimique ( $\tau_{\text{chim}} \simeq \tau_f$ ), les processus chimiques en temps fini sont importants et induisent un changement de la composition chimique du gaz. Les réactions chimiques se produisent principalement pour des températures élevées et se divisent en trois catégories :

- (i) Les réactions de dissociation de type :



au cours desquelles la liaison entre les atomes d'une particule diatomique est brisée lors d'une collision avec une autre particule. Afin de briser une liaison, de la chaleur est absorbée ; la dissociation est donc une réaction endothermique.

- (ii) Les réactions d'échanges :



qui peuvent avoir lieu dans le sens direct (de gauche à droite) comme inverse (de droite à gauche). La convention est de considérer que le sens direct est celui de la réaction endothermique tandis que le sens inverse correspond à la réaction exothermique [70].

(iii) Les réactions de recombinaison à trois corps de type :



où  $M$  est le catalyseur de réaction. La création d'une liaison entre deux atomes est un phénomène exothermique qui nécessite plus d'énergie que pour la briser. C'est pourquoi les équations de recombinaison nécessitent l'implication d'un troisième corps.

Considérons maintenant une équation chimique de forme générale :



où l'on note  $k_f$  et  $k_b$  les constantes de réaction directe et inverse définies ci-après. En utilisant la densité numérique comme mesure de la concentration des espèces, l'évolution de la concentration de l'espèce  $A$  est donnée par la relation :

$$-\frac{dn_A}{dt} = \underbrace{k_f(T)n_A n_B}_{\text{sens direct}} - \underbrace{k_b(T)n_C n_D}_{\text{sens inverse}}. \quad (2.119)$$

Les constantes de réactions dépendent de la température seulement et s'expriment généralement à partir des relations empiriques d'Arrhenius d'équation :

$$k(T) = AT^\eta \exp\left(-\frac{\epsilon_a}{kT}\right), \quad (2.120)$$

avec  $A$  et  $\eta$  des constantes propres à la réaction considérée et  $\epsilon_a$  l'énergie d'activation (J). On notera que cette formulation macroscopique fait l'hypothèse d'un degré de déséquilibre thermique faible justifiant l'utilisation d'une unique température  $T$ .

D'après la théorie collisionnelle rappelée par Bird [43], la notion de section efficace totale  $\sigma_T$  ne peut pas s'étendre directement aux collisions chimiques. A la place, il convient d'introduire la section efficace de réaction  $\sigma_R$  telle que le ratio  $\sigma_R/\sigma_T$  s'interprète comme la probabilité qu'une collision donne lieu à une réaction chimique. On appelle ce ratio le *facteur stérique*. Ainsi, pour une collision entre deux particules d'espèces  $A$  et  $B$ , on peut supposer que la réaction (2.121) a lieu dans le sens direct uniquement si l'énergie de collision est supérieure à l'énergie d'activation associée.

Une illustration simple de cette théorie est donnée par le modèle HS sous l'hypothèse que la section efficace  $\sigma_R$  est positive lorsque l'énergie de translation de la collision est supérieure à  $\epsilon_a$ , et nulle sinon. Pour un gaz en conditions proches de l'équilibre thermique, la variation de concentration de l'espèce  $A$  peut alors s'exprimer par la relation [43] :

$$\frac{dn_A}{dt} = - \underbrace{\frac{\sigma_R n_A n_B}{1 + \delta_{AB}} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_r}}}_{(1)} \underbrace{\exp\left(-\frac{\epsilon_a}{kT}\right)}_{(2)}. \quad (2.121)$$

Le terme (1) correspond à la fréquence de collision binaire (nombre de collisions par unité de temps et par unité de volume) entre les particules d'espèces  $A$  et  $B$ . Le terme (2) désigne quant à lui la probabilité que l'énergie de translation de la paire soit supérieure à  $\epsilon_a$  et s'obtient par intégration d'une distribution d'énergie de forme donnée par l'équation (2.107) puis par simplification pour le cas d'une sphère dure.

Comme indiqué par Bird, l'équation (2.121) est bien cohérente avec la forme de l'équation (2.120) et la forme du terme de sens direct de l'équation (2.119). Comme on le verra dans le prochain chapitre, la généralisation de la théorie collisionnelle aux modèles de collision plus réalistes est à l'origine du modèle Total Collision Energy (TCE) pour la simulation des réactions chimiques par DSMC.

## 4 Résumé

En partant des bases de la théorie cinétique, la première partie de ce chapitre a montré le lien entre les propriétés moléculaires et les grandeurs macroscopiques de température et de pression d'un gaz. Ensuite, l'introduction de modèles d'interaction simples et en particulier du modèle HS a permis de simplifier les équations de dynamique moléculaire et d'exprimer analytiquement certains paramètres de collision intervenant dans l'analyse d'un système collisionnel binaire. Cette analyse a également servi à établir l'équation de Boltzmann utilisée pour décrire l'évolution d'un système particulière hors et à l'équilibre. Le théorème H qui en résulte apporte la preuve que les collisions intermoléculaires conduisent le système vers un état d'équilibre.

La fonction de distribution de vitesse et son utilisation pour décrire la répartition statistique des vitesses des particules d'un gaz ont également été abordées. Cette fonction constitue l'élément de base de l'équation de Boltzmann. L'analyse de Chapman-Enskog montre que l'équation de Boltzmann se réduit aux équations de Navier-Stokes en proche équilibre, c'est-à-dire lorsque la fonction de distribution de vitesse du gaz est une Maxwellienne faiblement perturbée (perturbation du premier ordre). Dans les régions de fort déséquilibre, la déviation par rapport à la Maxwellienne d'équilibre est trop importante et compromet la précision des équations de Navier-Stokes [51]. Un critère basé sur le Knudsen de longueur de gradient  $Kn_{GLL-Q}$  permet d'identifier de telles régions dans l'écoulement. L'analyse de Chapman-Enskog permet finalement d'établir l'expression des termes de transport en fonction des intégrales de collision. Des modèles moléculaires peuvent alors être utilisés pour calculer les section efficaces de collision dont les intégrales dépendent et ainsi relier les propriétés de transport aux paramètres d'interaction moléculaires.

Dans la dernière partie, la structure énergétique des particules et ses différents modes ont été décrits à l'aide de la mécanique quantique. La mécanique statistique constitue, quant à elle, le cadre de définition des notions de fonctions de partition et de distribution d'énergie nécessaires à la description de la structure énergétique d'un écoulement raréfié. Lorsque le temps caractéristique des transferts d'énergie ou des réactions chimiques devient comparable au temps caractéristique de l'écoulement, des phénomènes de déséquilibre apparaissent et les transferts d'énergie intermoléculaires doivent être pris en compte. Les processus collisionnels qui conduisent le système vers son état d'équilibre sont appelés processus de relaxation.

Le chapitre suivant montre comment la théorie cinétique des gaz est utilisée pour construire la méthode DSMC et comment cette méthode permet de calculer les propriétés macroscopiques d'un écoulement hypersonique raréfié en simulant les interactions des particules du gaz.



# Chapitre 3

## Modélisation DSMC des écoulements hypersoniques raréfiés

### Sommaire

<b>1</b>	<b>Principes fondamentaux et métriques usuelles</b>	<b>64</b>
<b>2</b>	<b>Collisions élastiques : modèles et phénomènes de transport</b>	<b>65</b>
2.1	Probabilité de collision	65
2.2	Potentiel interatomique IPL et modèle de collision HS	66
2.3	Modèle de collision VHS	67
2.4	Le modèle de collision VSS	68
<b>3</b>	<b>Collisions inélastiques : le modèle de Borgnakke-Larsen</b>	<b>69</b>
3.1	Le modèle Borgnakke-Larsen pour les transferts R-T	70
3.2	Le modèle Borgnakke-Larsen pour les transferts V-T	72
3.3	Remarques sur le modèle Borgnakke-Larsen	72
<b>4</b>	<b>Collisions inélastiques : procédure de sélection et modèles de relaxation thermique</b>	<b>73</b>
4.1	Procédure de sélection	73
4.2	Nombre de collisions et probabilité de collision inélastique	74
4.3	Modèles de relaxation thermique	74
<b>5</b>	<b>Modèles de relaxation chimique</b>	<b>75</b>
5.1	Modèles de relaxation chimique : Le modèle TCE	75
5.2	Modèles de relaxation chimique : Le modèle Q-K	77
5.3	Modèles en voie de développement	79
<b>6</b>	<b>Interactions gaz-surface</b>	<b>81</b>
6.1	Généralités	81
6.2	Coefficient d'accommodation et modèle de Maxwell	82
6.3	Modèle Cercignani, Lampis et Lord	83
6.4	Comparaison et influence des modèles	83
<b>7</b>	<b>Résumé</b>	<b>84</b>

**Introduction :** Ce chapitre propose un état de l'art des modèles utilisés par la méthode Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) pour la simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés. Son objectif est de donner un aperçu des modèles physiques principaux qu'elle utilise et de ses voies de développement. Ainsi, les hypothèses de base de la méthode, les critères numériques de cohérence physique et l'algorithme de la méthode sont d'abord introduits. Ensuite, les modèles de collision les plus utilisés et les raisons de leur popularité sont discutés. Dans la continuité du chapitre précédent, les liens entre les modèles de collision et les propriétés de transport sont établis. La méthode de Borgnakke-Larsen, les procédures employées pour la simulation des phénomènes de relaxation thermo-chimique et les nouveaux modèles à l'étude sont abordés dans les sections 3, 4 et 5 du chapitre. Pour finir, plusieurs modèles d'interactions gaz-surface sont présentés et leur influence sur le calcul des grandeurs aérodynamiques et aérothermodynamiques est discutée.

# 1 Principes fondamentaux et métriques usuelles

La méthode DSMC a été introduite en 1963 par G. Bird [4], professeur d'ingénierie aéronautique à l'université de Sydney. Initialement présentée comme une alternative aux méthodes de dynamique moléculaire classiques, la DSMC s'est rapidement imposée comme une méthode puissante de simulation de gaz en déséquilibre. Bien que la DSMC soit applicable à tout type d'écoulement dilué, les méthodes de Computational Fluid Dynamic (CFD) traditionnelles restent plus efficaces et moins coûteuses pour la simulation d'écoulements continus. Son application se limite donc le plus souvent aux écoulements raréfiés pour lesquels cette méthode combine précision, simplicité d'utilisation et stabilité numérique inconditionnelle [51].

La DSMC se construit selon 4 hypothèses fondamentales qui s'appliquent au cas des gaz dilués [1] :

- (i) Les collisions sont principalement binaires et considérées comme instantanées.
- (ii) Les particules se déplacent en ligne droite sans interaction sur des échelles de temps inférieures à  $\tau_{coll}$ .
- (iii) Les paramètres de collision et l'orientation initiale des molécules sont aléatoires.
- (iv) Un volume cubique  $\lambda \times \lambda \times \lambda$  contient une quantité très importante de particules dont seule une fraction doit être simulée pour décrire l'écoulement avec précision.

Les deux premières hypothèses se justifient simplement par l'espacement des particules dans le gaz. La troisième est observable par l'intermédiaire de simulations déterministes de dynamique moléculaire. Pour comprendre la dernière, il suffit de voir le gaz comme un ensemble de particules divisible en sous-ensembles de particules aux propriétés (vitesse, énergie, etc.) très proches. L'idée est donc simplement de définir autant de particules « numériques » que de ces sous-ensembles. Une façon de réduire le coût de calcul de la méthode est alors de minimiser le nombre de particules numériques par cellule tout en veillant à conserver la précision des résultats. Empiriquement il a été montré que la précision de la méthode DSMC varie en  $1/N_{p/c}$ , où  $N_{p/c}$  désigne le nombre de particules numériques par cellule [71]. Bien qu'il n'y ait pas de valeur minimale universelle, la littérature préconise généralement de garder un nombre de particules par cellule de l'ordre de la dizaine. Selon les auteurs et les conditions, ce nombre peut valoir 20 [71], 15 [72] ou 5 [73].

L'interaction entre les particules numériques est simulée de manière stochastique. A chaque pas de temps  $\Delta t$  et dans chaque maille, les particules sont appariées de manière aléatoire puis testées pour une collision. Pour garantir la sélection d'un partenaire pertinent, cette procédure requiert donc que la taille des cellules  $\Delta x$  soit inférieure au libre parcours moyen local de l'écoulement. Ensuite, les particules sont déplacées en ligne droite le long de leur vecteur vitesse. Afin d'assurer que les déplacements se fassent sur des distances physiquement réalistes, il faut donc que le pas de temps soit inférieur au temps inter-collision moyen [74]. En général, on veille à ce que la taille des cellules et le pas de temps soient respectivement égaux à une fraction du libre parcours moyen et à une fraction du temps inter-collision moyen [71]. Ces précautions permettent d'assurer que le transfert de propriété se fasse sur des durées au plus égales au temps inter-collision moyen et que le déplacement en ligne droite se fasse sur des distances au plus égales au libre parcours moyen.

Le nombre de particules numériques par cellule  $N_{p/c}$  et les rapports  $\Delta t/\tau_{coll}$ ,  $\Delta x/\lambda$  constituent les *métriques* ou critères de précision de base de la méthode DSMC. On notera également que même si, en pratique, les écoulements sont stationnaires et les propriétés sont moyennées sur plusieurs pas de temps, le choix d'un pas de temps  $\Delta t < \tau_{coll}$  rend possible la simulation d'écoulements instationnaires pour lesquels les propriétés sont échantillonnées à chaque pas de temps. Finalement, on peut représenter l'algorithme fonctionnel d'un code DSMC par le schéma présenté en Figure 3.1.

La DSMC est donc une méthode itérative qui conduit l'écoulement vers un état stationnaire. En général, l'implémentation peut légèrement varier d'un code à l'autre mais les étapes de la Figure 3.1 restent les mêmes. D'abord un flux de particules est imposé à l'entrée du domaine puis les particules sont déplacées en ligne droite. Au niveau des conditions aux limites, les particules qui sortent du

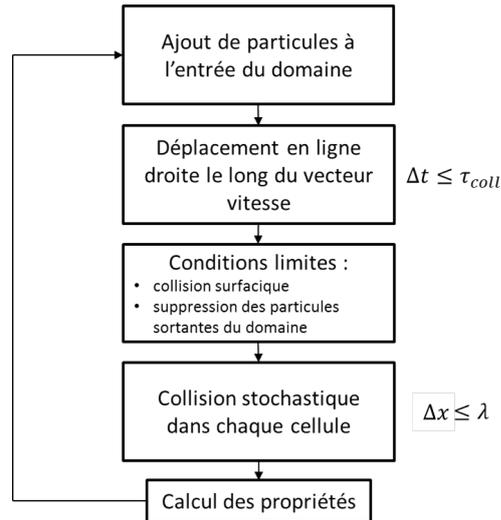


FIGURE 3.1 – Algorithme central de la méthode DSMC (adapté de [1]).

domaine sont supprimées tandis que les particules qui impactent la paroi sont réfléchies selon les lois d'interactions gaz-surface utilisées. Lors de l'étape de collision, les particules de chaque cellule sont appariées aléatoirement et testées pour une collision intermoléculaire. Les particules sélectionnées subissent soit une collision élastique où seul un changement de vitesse est induit, soit une collision inélastique avec transfert d'énergie et potentiellement une réaction chimique. Finalement, lorsqu'un état stationnaire est atteint, les propriétés macroscopiques d'intérêt sont moyennées dans chaque cellule sur plusieurs pas de temps.

## 2 Collisions élastiques : modèles et phénomènes de transport

Dans cette section on s'intéresse à la procédure stochastique de simulation des processus collisionnels de la DSMC. Elle permet notamment de répondre aux questions : comment sélectionne-t-on les particules pour une collision et avec quelle probabilité ? A cette occasion, la procédure No Time Counter (NTC) est d'abord présentée puis, sont introduits les modèles de collision avancés avec lesquels elle se combine. Plus de détails sont disponibles dans les ouvrages [43, 1] ou dans les manuscrits de thèse [75, 76].

### 2.1 Probabilité de collision

En DSMC, les propriétés locales de transport sont directement liées au nombre de collisions ayant lieu à chaque pas de temps dans chaque cellule considérée. Si, en proche équilibre, le taux de collisions est connu à partir des mesures de viscosité réelle par exemple, il est plus difficile de le quantifier pour des écoulements hors équilibre. Dans ce cas, le calcul du taux de collisions nécessite des informations issues de la théorie atomistique [1]. Pour les gaz dilués, la DSMC exploite le lien entre les potentiels interatomiques, les sections efficaces et les propriétés de transport en proche équilibre.

L'algorithme NTC introduit par Bird [43] est aujourd'hui encore la méthode la plus courante pour déterminer le nombre de collisions susceptible de se produire dans chaque cellule, à chaque pas de temps et avec quelle probabilité. Considérons un volume de gaz  $V$  contenant des particules mono-espèces interagissant selon le modèle Hard Sphere (HS). Alors la probabilité que deux particules de ce volume entrent en collision pendant une durée  $\Delta t$  est égale au volume balayé par leurs sections efficaces sur cette durée divisé par le volume considéré. Par intégration en temps et en espace du volume balayé  $g \sigma d\Omega$  (voir chapitre 2), cette probabilité vérifie donc :

$$P = \pi d^2 g \Delta t / V, \quad (3.1)$$

où  $g$  représente la vitesse relative du centre de masse des particules et  $d$  leur diamètre. Si ce volume contient  $N$  particules, cette probabilité s'applique donc aux  $N(N-1)/2$  potentielles paires. Compte tenu de la discussion en section 1, en DSMC, chaque particule numérique représente  $W_p$  particules réelles identiques. Dans une maille de volume  $V_c$  du domaine, cette probabilité s'applique donc aux  $N_{p/c}(N_{p/c}-1)/2$  particules numériques et (3.1) devient :

$$P = \pi d^2 W_p g \Delta t / V_c. \quad (3.2)$$

Dans le cas plus général où la section efficace n'est pas celle d'une sphère dure (*i.e.*  $\sigma = \sigma(d, g)$ ) comme pour les modèles Variable Hard Sphere (VHS) et Variable Soft Sphere (VSS), la probabilité (3.2) prend la forme :

$$P = \sigma(d, g) g W_p \Delta t / V_c. \quad (3.3)$$

Cette probabilité étant généralement faible, l'efficacité de l'algorithme peut alors être accrue en estimant la valeur de  $(\sigma(d, g)g)_{\max}$  telle que la probabilité maximale s'écrive :

$$P_{\max} = (\sigma(d, g)g)_{\max} W_p \Delta t / V_c. \quad (3.4)$$

La probabilité numérique est alors donnée par le ratio des deux probabilités :

$$P_{\text{DSMC}} = \frac{\sigma(d, g)g}{(\sigma(d, g)g)_{\max}}. \quad (3.5)$$

En raison des fluctuations de  $N_{p/c}$ , Bird préconise de tester un nombre  $N_{\text{coll}}$  de collisions potentielles à partir de l'équation :

$$N_{\text{coll}} = \frac{1}{2} N_{p/c} \langle N_{p/c} \rangle W_p (\sigma(d, g)g) \Delta t / V_c, \quad (3.6)$$

où  $\langle N_{p/c} \rangle$  est une moyenne en temps de la valeur instantanée  $N_{p/c}$ . La procédure NTC définie par les formules (3.5)-(3.6) se généralise ensuite très facilement au cas d'un gaz multi-espèces [43, 1].

Depuis l'apparition de l'algorithme NTC, d'autres procédures ont vu le jour. Parmi elles, on peut citer le schéma *nearest neighbour* [77] ou les algorithmes de type *simple Bernoulli trial* [78]. Par rapport à la procédure NTC, ces algorithmes permettent de relaxer le critère sur le nombre de particules par cellule mais, dans des conditions nominales d'utilisation, ces méthodes offrent toutes un niveau de précision équivalent.

## 2.2 Potentiel interatomique IPL et modèle de collision HS

On désigne ici par modèle moléculaire une approximation des interactions moléculaires à l'origine des propriétés de transport macroscopiques du gaz. Comme indiqué dans le chapitre 2, ces modèles se divisent en deux catégories : les modèles d'interaction et les modèles de collision. Ainsi, les modèles d'interaction fournissent une approximation mathématique du potentiel  $U(r)$  et de la force  $F(r)$  d'interaction intermoléculaire. Ces modèles simplifiés permettent d'exprimer analytiquement certains paramètres de collision tel que l'angle de diffusion  $\chi$  :

$$\chi(g, b) = \pi - 2b \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{b}{r}\right)^2 - \frac{U(r)}{1/2 m_r g^2}}}, \quad (3.7)$$

où  $g$  est la vitesse relative d'une collision binaire,  $r_m$  est la valeur qui maximise le dénominateur de l'intégrale,  $r$  est la distance séparant les particules,  $m_r$  leur masse réduite et  $b$  est la distance d'approche maximale non perturbée (voir chapitre 2). Pour les modèles Inverse Power Law (IPL) et HS par exemple, l'équation (3.7) se simplifie et permet de calculer les intégrales de collision puis les sections efficaces de viscosité  $\sigma_\mu$  et de quantité de mouvement  $\sigma_M$ . Le détail des calculs est disponible dans [1].

En DSMC, la simulation des processus collisionnels repose sur l'angle de diffusion  $\chi$  pour les calculs de vitesse post-collision et la section efficace totale  $\sigma_T$  pour le calcul du nombre et de

la probabilité de collision. Comme l'explique Bird [43], le potentiel IPL ne permet pas d'exprimer simplement la section efficace totale  $\sigma_T$ . En revanche, pour le potentiel HS qui est un cas particulier du potentiel IPL avec  $\eta \rightarrow \infty$ , la section efficace totale vaut simplement  $\sigma_T = \pi d^2$ . Comme on l'a vu plus tôt, pour ce modèle, la viscosité  $\mu$  est proportionnelle à  $\sqrt{T}$ ; ce qui est une mauvaise approximation. Pour garantir une loi de puissance satisfaisante, la mise en évidence par les potentiels intermoléculaires complexes d'une dépendance des intégrales de collision à la vitesse relative  $g$  a conduit à la construction des modèles de collision avancés comme alternative au modèle HS.

### 2.3 Modèle de collision VHS

Lorsque des données de viscosité et de diffusion sont disponibles, il est possible de paramétrer un modèle de collision pour qu'il s'ajuste au mieux à ces données. Par ce biais, des modèles plus évolués permettant de prendre en compte des dépendances plus ou moins complexes peuvent être développés.

Le modèle VHS est un modèle de collision initialement proposé par Bird [43]. Comme pour le modèle HS, l'angle de déviation  $\chi$  du modèle s'écrit :

$$\chi = 2 \cos^{-1} \left( \frac{b}{d} \right), \quad (3.8)$$

où  $b$  est la distance d'approche maximale non perturbée introduite dans le chapitre 2 et  $d$  est le diamètre de la section efficace. Contrairement au modèle HS, pour le modèle VHS, la section efficace d'une paire donnée est une sphère rigide de diamètre variable :

$$d = d_{\text{ref}} \left( \frac{g_{\text{ref}}}{g} \right)^\nu, \quad (3.9)$$

où  $d_{\text{ref}}$  et  $g_{\text{ref}}$  sont des valeurs de référence et  $\nu$  est l'exposant de la loi de puissance. La section efficace totale du modèle s'écrit alors :

$$\sigma_T^{\text{VHS}} = \pi d_{\text{ref}}^2 \left( \frac{g_{\text{ref}}}{g} \right)^{2\nu}, \quad (3.10)$$

et  $\nu = \omega - 1/2$  est choisi de façon à ce que la dépendance en température  $T$  de la viscosité  $\mu^{\text{VHS}}$  du modèle suive une loi de puissance :

$$\mu^{\text{VHS}} \propto T^\omega. \quad (3.11)$$

Pour les espèces les plus connues, le paramètre  $\omega$  est donné dans la littérature pour certaines conditions de pression et de température (*e.g.* en Annexe A de [43]). Comme expliqué dans [43, 1], en prenant pour vitesse relative de référence  $g_{\text{ref}}$ , la valeur moyenne des vitesses relatives des collisions se produisant dans un gaz à l'équilibre à la température de référence  $T_{\text{ref}}$ , définie par :

$$g_{\text{ref}}^{2\nu} = \left( \frac{2kT_{\text{ref}}}{m_r} \right)^\nu \frac{1}{\Gamma(2-\nu)}, \quad (3.12)$$

alors les paramètres du modèle se réduisent à  $(d, T)_{\text{ref}}$  et  $\nu$ . Comme on le verra plus tard, ces paramètres peuvent se déterminer à partir de données expérimentales ou numériques de viscosité ou de diffusion.

Le calcul des propriétés de collision à l'équilibre détaillé par Bird [43] permet d'exprimer le libre parcours moyen du modèle par la relation :

$$\lambda^{\text{VHS}} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d_{\text{ref}}^2 n} \left( \frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^{\omega-1/2}, \quad (3.13)$$

où  $n$  est la densité numérique du gaz. Comme pour le modèle HS,  $\sigma_T^{\text{VHS}}$  ne dépend pas de l'angle de déviation  $\chi$  et l'expression des sections efficaces de viscosité (équation 2.89) et de quantité de mouvement (équation 2.90) deviennent respectivement :

$$\sigma_\mu^{\text{VHS}} = \frac{2}{3} \sigma_T^{\text{VHS}}, \quad (3.14)$$

$$\sigma_M^{\text{VHS}} = \sigma_T^{\text{VHS}}. \quad (3.15)$$

Le coefficient de viscosité (équation 2.91) simulé par le modèle vaut finalement :

$$\mu^{\text{VHS}} = \mu_{\text{ref}}^{\text{VHS}} \left( \frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^\omega, \quad (3.16)$$

avec :

$$\mu_{\text{ref}}^{\text{VHS}} = \frac{15\sqrt{2\pi m_r k T_{\text{ref}}}}{2(5-2\omega)(7-2\omega)\pi d_{\text{ref}}^2}, \quad (3.17)$$

et :

$$\omega = \nu + 1/2. \quad (3.18)$$

Le coefficient de diffusion (équation 2.92) s'écrit quant à lui :

$$\mathcal{D}^{\text{VHS}} = \mathcal{D}_{\text{ref}}^{\text{VHS}} \left( \frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^\omega, \quad (3.19)$$

où :

$$\mathcal{D}_{\text{ref}}^{\text{VHS}} = \frac{3\sqrt{2\pi k T_{\text{ref}}/m_r}}{4(5-2\omega)n\pi d_{\text{ref}}^2}. \quad (3.20)$$

En pratique, pour une espèce donnée, le modèle de collision VHS se définit avec trois paramètres : le diamètre de référence d'une collision  $d_{\text{ref}}$ , le paramètre de puissance  $\omega$ , et la température de référence  $T_{\text{ref}}$ . Toutefois, il faut garder à l'esprit que si ce modèle permet d'obtenir des viscosités correctes à l'équilibre, il n'est basé sur aucune donnée hors équilibre et n'est donc pas strictement validé dans de telles conditions [1]. De plus, comme le montrent les équations (3.16)-(3.19), un inconvénient majeur de ce modèle est qu'il ne permet pas d'ajuster indépendamment la viscosité et la diffusion.

## 2.4 Le modèle de collision VSS

Le modèle VSS est un modèle de collision proposé par Koura et Matsumoto [79] comme une alternative au modèle VHS. Ce modèle utilise le même diamètre variable et par conséquent la même section efficace totale que le modèle VHS :

$$\sigma_T^{\text{VSS}} = \sigma_T^{\text{VHS}}. \quad (3.21)$$

Contrairement au modèle VHS qui suppose la déviation comme étant isotrope, le modèle VSS introduit le paramètre  $\alpha$  et définit l'angle de déviation  $\chi$  suivant la relation :

$$\chi = 2 \cos^{-1} \left[ \left( \frac{b}{d} \right)^{1/\alpha} \right]. \quad (3.22)$$

Comme  $\omega$ , le paramètre  $\alpha$  est supposé constant et sa valeur est basée sur des données de viscosité et de diffusion. En effet, ce modèle permet d'ajuster quasi-indépendamment les sections efficaces de viscosité et de quantité de mouvement. Des valeurs de  $\alpha$  et  $\omega$  pour l'air en conditions standards sont par exemple données dans l'Annexe A de [43]. Les sections efficaces des équations (2.89)-(2.90) s'écrivent :

$$\sigma_\mu^{\text{VSS}} = \frac{4\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)} \sigma_T^{\text{VHS}}, \quad (3.23)$$

$$\sigma_M^{\text{VSS}} = \frac{2}{(\alpha+1)} \sigma_T^{\text{VHS}}. \quad (3.24)$$

La relation (3.12) pour  $g_{\text{ref}}$  est toujours valable et les coefficients  $\mu^{\text{VSS}}$ ,  $D^{\text{VSS}}$  sont toujours donnés par les équations (3.16)-(3.19) avec cette fois :

$$\mu_{\text{ref}}^{\text{VSS}} = \frac{(\alpha+1)(\alpha+2)}{6\alpha} \mu_{\text{ref}}^{\text{VHS}}, \quad (3.25)$$

$$\mathcal{D}_{\text{ref}}^{\text{VSS}} = \frac{(\alpha + 1)}{2} \mathcal{D}_{\text{ref}}^{\text{VHS}}. \quad (3.26)$$

En pratique,  $\alpha \in ]1; 2[$ . Dans cet intervalle, la Figure 3.2 montre que la section efficace de viscosité  $\sigma_\mu$  dépend faiblement du coefficient  $\alpha$  contrairement à la section efficace de quantité de mouvement  $\sigma_M$ . D'après les équations (3.25)-(3.26), pour  $\alpha = 1$  on retrouve les expressions du modèle VHS.

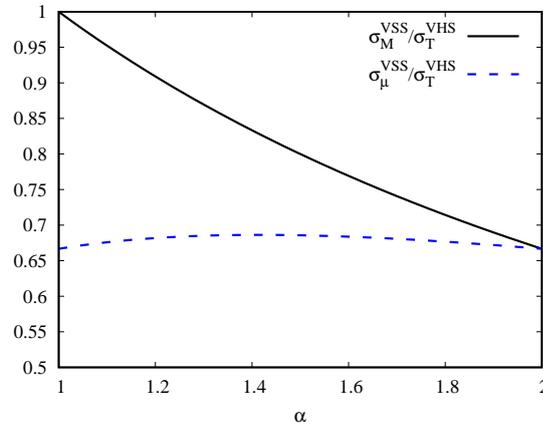


FIGURE 3.2 – Comparaison des sections efficaces de viscosité  $\sigma_\mu$  et de quantité de mouvement  $\sigma_M$  des modèles VHS et VSS en fonction de  $\alpha$  (reproduit d'après [1]).

Si en plus  $\omega = 1/2$ , on retrouve le modèle HS. Pour déterminer le modèle VSS d'une espèce il faut donc déterminer les trois mêmes paramètres que pour le modèle VHS auxquels s'ajoute  $\alpha$ .

D'après Boyd [1], bien que le modèle VSS soit plus flexible, on peut tout de même lui reprocher l'hypothèse  $\alpha$  constant alors qu'une dépendance en température n'est pas exclue. De même, les modèles VHS et VSS supposent le paramètre  $\omega$  constant ce qui restreint l'intervalle de température de validité du modèle. D'autres modèles plus évolués permettent d'inclure la partie attractive de la surface d'énergie potentielle grâce à l'utilisation d'un paramètre  $\omega$  non constant. C'est le cas des modèles generalized hard-sphere (GHS), generalized soft-sphere (GSS) et Lennard-Jones (LJ) présentés dans [1]. Toutefois ces modèles restent peu utilisés en pratique et Boyd précise que dans la majorité des applications de la DSMC, les modèles d'angle de diffusion et de forces d'attraction n'ont en fait qu'une influence minimale sur la précision des résultats. Si cette affirmation est vraie pour un régime très raréfié où les interactions sont dominées par les interactions gaz-surface, on verra qu'elle est toutefois à nuancer pour les propriétés surfaciques en régime proche équilibre (cf. Chapitre 6).

Lorsque qu'une paire de particules est sélectionnée pour une collision, avec la procédure NTC par exemple, il faut déterminer si cette collision donne lieu à un transfert d'énergie et, dans ce cas, comment simuler le transfert d'énergie et avec quelle probabilité. Ces considérations font l'objet des sections suivantes.

### 3 Collisions inélastiques : le modèle de Borgnakke-Larsen

On considère qu'un système est en déséquilibre thermique lorsque l'énergie ne respecte pas le principe d'équipartition et que les distributions d'énergie (Section 3.1 du chapitre 2) ne sont pas de type Boltzmann. Au cours des collisions successives, l'énergie des particules ainsi que les fonctions de distribution doivent toutefois relaxer vers un état d'équilibre qui satisfait l'équipartition d'énergie. Pour simuler de tels processus collisionnels inélastiques, il faut donc une méthode capable de redistribuer convenablement l'énergie d'une collision parmi les modes d'énergie disponibles, ce qui est le but du modèle Borgnakke-Larsen.

### 3.1 Le modèle Borgnakke-Larsen pour les transferts R-T

Le modèle proposé par Borgnakke et Larsen consiste à redistribuer l'énergie d'une collision inélastique  $\epsilon_{\text{coll}}$  (*i.e.* la somme des énergies des particules impliquées dans la collision) entre le mode de translation et les modes d'énergie internes par tirage à partir des fonctions de distribution à l'équilibre [43]. Ce modèle permet ainsi de faire tendre progressivement le système vers un état d'équilibre. Comme expliqué par Chabut [75], le modèle Borgnakke-Larsen fut développé à l'origine pour une approche continue des énergies internes considérées découplées les unes des autres. Ce découplage permet alors de considérer que la probabilité d'obtenir une combinaison particulière de deux états énergétiques de modes différents, est le produit des probabilités d'obtenir chacun de ces deux états, indépendamment l'un de l'autre. Par la suite, une version du modèle adaptée à une approche discrète des énergies internes fut proposée, tout en conservant l'hypothèse de découplage entre les modes internes [43].

On s'intéresse ici au modèle classique de Borgnakke-Larsen dans sa formulation générale et appliquée aux échanges rotation-translation. Pour ce faire, on considère un mélange gazeux et la collision de deux particules numérotées 1 et 2 pour lesquelles l'énergie interne se réduit au mode de rotation. On définit alors  $\Xi$  comme étant la somme des degrés de liberté moyens contribuant à la redistribution d'énergie :

$$\Xi = \left(\frac{5}{2} - \omega\right) + \frac{\zeta_{\text{rot},1}}{2} + \frac{\zeta_{\text{rot},2}}{2}, \quad (3.27)$$

où  $\zeta_{\text{rot},1}$  et  $\zeta_{\text{rot},2}$  sont les degrés de liberté du mode de rotation des particules 1 et 2, et le premier terme  $\left(\frac{5}{2} - \omega\right)$  correspond à la contribution du mode de translation pour le modèle VHS/VSS. Si l'on décompose  $\Xi$  en deux groupes d'énergie  $\Xi_A$  et  $\Xi_B$  associés aux énergies respectives  $\epsilon_A$  et  $\epsilon_B$ , la méthode Borgnakke-Larsen exprime la distribution d'énergie entre ces deux groupes par la relation :

$$f\left(\frac{\epsilon_A}{\epsilon_{\text{coll}}}\right) = f\left(\frac{\epsilon_B}{\epsilon_{\text{coll}}}\right) = \frac{\Gamma(\Xi_A + \Xi_B)}{\Gamma(\Xi_A)\Gamma(\Xi_B)} \left(\frac{\epsilon_A}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\Xi_A-1} \left(\frac{\epsilon_B}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\Xi_B-1}, \quad (3.28)$$

où la fonction  $\Gamma(\cdot)$  est définie par l'équation (2.108) du chapitre précédent. Les rapports  $\frac{\epsilon_{\text{rot},i}}{\epsilon_{\text{coll}}}$  et  $\frac{\epsilon_{tr}}{\epsilon_{\text{coll}}}$  peuvent ainsi être extraits de la distribution (3.28). En prenant par exemple :

$$\begin{cases} \epsilon_A = \epsilon_{\text{rot},1} \\ \Xi_A = \frac{\zeta_{\text{rot},1}}{2} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \epsilon_B = \epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_{\text{rot},1} \\ \Xi_B = \left(\frac{5}{2} - \omega\right) + \frac{\zeta_{\text{rot},2}}{2} \end{cases}, \quad (3.29)$$

la distribution (3.28) s'écrit :

$$f\left(\frac{\epsilon_{\text{rot},1}}{\epsilon_{\text{coll}}}\right) = \frac{\Gamma(\Xi_A + \Xi_B)}{\Gamma(\Xi_A)\Gamma(\Xi_B)} \left(\frac{\epsilon_{\text{rot},1}}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\Xi_A-1} \left(\frac{\epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_{\text{rot},1}}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\Xi_B-1}. \quad (3.30)$$

L'énergie de rotation post-collision de la particule 1 notée  $\epsilon'_{\text{rot},1}$  doit ensuite être tirée de cette distribution.

Dans le cas particulier où  $\Xi_A = 1$ , l'expression de la distribution (3.30) se simplifie sous la forme :

$$f\left(\frac{\epsilon_{\text{rot},1}}{\epsilon_{\text{coll}}}\right) = \Xi_B \left(1 - \frac{\epsilon_{\text{rot},1}}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\Xi_B-1}. \quad (3.31)$$

En supposant  $\epsilon_{\text{coll}}$  constante et en posant  $x = \epsilon'_{\text{rot},1}$ , la fonction de répartition  $F$  de la distribution  $f$  s'obtient alors par intégration entre 0 et  $x$  :

$$F(x) = \int_0^x f\left(\frac{x}{\epsilon_{\text{coll}}}\right) dx = \left(1 - \frac{x}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\Xi_B}. \quad (3.32)$$

Sachant que la fonction de répartition est inversible et uniformément distribuée sur  $[0, 1]$ , on introduit le nombre aléatoire  $R$  uniformément distribué sur ce même intervalle, et on peut écrire :

$$\epsilon'_{\text{rot},1} = \epsilon_{\text{coll}} \left(1 - R^{1/\Xi_B}\right). \quad (3.33)$$

De la même manière, on peut aisément calculer  $\epsilon'_{\text{rot},2}$ , l'énergie de rotation post-collision de la particule 2 puis l'énergie de translation post-collision s'obtient par soustraction  $\epsilon'_{\text{tr}} = \epsilon_{\text{coll}} - (\epsilon'_{\text{rot},1} + \epsilon'_{\text{rot},2})$ .

Pour les particules diatomiques de l'air,  $\zeta_{\text{rot},i} = 2$  et donc  $\Xi_A = 1$ . Toutefois, selon la procédure de sélection (*i.e.* le nombre et l'ordre des modes d'énergie mis à jour), il est possible de vouloir accéder directement au mode de rotation post-collision  $\epsilon'_{\text{rot}}$  puis de redistribuer cette énergie parmi les modes de chaque particule. Dans ce cas, il est possible que  $\Xi_A \neq 1$  et que la fonction de répartition (3.32) ne soit pas inversible. En posant  $\bar{\zeta} = \zeta_{\text{rot},1}/2 + \zeta_{\text{rot},2}/2$ , Bird [43] donne le ratio de probabilité d'une valeur particulière d'énergie de translation par l'expression :

$$\frac{P}{P_{\text{max}}} = \left[ \frac{\bar{\zeta} + 1/2 - \omega}{3/2 - \omega} \left( \frac{\epsilon_{\text{tr}}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right) \right]^{3/2 - \omega} \left[ \frac{\bar{\zeta} + 1/2 - \omega}{\bar{\zeta} - 1} \left( 1 - \frac{\epsilon_{\text{tr}}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right) \right]^{\bar{\zeta} - 1}. \quad (3.34)$$

Une valeur de l'énergie de translation post-collision  $\epsilon'_{\text{tr}}$  s'obtient alors par une procédure d'acceptation-rejet. Un premier nombre aléatoire  $R_1$  est tiré uniformément entre 0 et  $\epsilon_{\text{coll}}$ , puis un deuxième nombre aléatoire  $R_2$  uniformément distribué sur  $[0; 1]$  est comparé au ratio  $P/P_{\text{max}}$ . Si  $R_2 \leq P/P_{\text{max}}$  alors  $\epsilon'_{\text{tr}} = R_1$ . Sinon, une nouvelle valeur de  $R_1$  est tirée et le processus est réitéré jusqu'à ce qu'une valeur de  $\epsilon'_{\text{tr}}$  soit acceptée.

Lorsque  $\epsilon'_{\text{tr}}$  est connue, on peut déduire l'énergie de rotation post-collision  $\epsilon'_{\text{rot}} = \epsilon_{\text{coll}} - \epsilon'_{\text{tr}}$ . Cette énergie peut ensuite être redistribuée parmi les énergies  $\epsilon'_{\text{rot},1}$  et  $\epsilon'_{\text{rot},2}$ . Le ratio de probabilité d'une valeur particulière d'énergie post-collision  $\epsilon'_{\text{rot},1}$  s'écrit :

$$\frac{P}{P_{\text{max}}} = \frac{(\bar{\zeta} - 2)^{\bar{\zeta} - 2}}{(\zeta_{\text{rot},1}/2 - 1)^{\zeta_{\text{rot},1}/2 - 1} (\zeta_{\text{rot},2}/2 - 1)^{\zeta_{\text{rot},2}/2 - 1}} \left( \frac{\epsilon'_{\text{rot},1}}{\epsilon'_{\text{rot}}} \right)^{\zeta_{\text{rot},1}/2 - 1} \left( 1 - \frac{\epsilon'_{\text{rot},1}}{\epsilon'_{\text{rot}}} \right)^{\zeta_{\text{rot},2}/2 - 1}. \quad (3.35)$$

On peut donc calculer l'énergie  $\epsilon'_{\text{rot},1}$  avec une procédure d'acceptation-rejet puis l'énergie  $\epsilon'_{\text{rot},2}$  est simplement obtenue par soustraction.

Si l'on considère à nouveau l'ensemble des modes d'énergie interne, la méthode de distribution en série de l'énergie de Bird [43] présentée par Chabut [75] utilise une distribution spécifique pour calculer la redistribution d'énergie vers le mode interne  $i$  d'une particule  $j$  d'énergie  $\epsilon_{i,j}$ . Reprenons la distribution (3.28) sous la forme :

$$f \left( \frac{\epsilon_{i,j}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right) = \frac{\Gamma(\frac{5}{2} - \omega + \frac{\Sigma\zeta}{2} + \frac{\zeta_{i,j}}{2})}{\Gamma(\frac{5}{2} - \omega + \frac{\Sigma\zeta}{2})\Gamma(\frac{\zeta_{i,j}}{2})} \left( \frac{\epsilon_{i,j}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right)^{\zeta_{i,j}/2 - 1} \left( 1 - \frac{\epsilon_{i,j}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right)^{3/2 - \omega + \frac{\Sigma\zeta}{2}}, \quad (3.36)$$

où  $\Sigma\zeta$  représente les modes internes restants et vérifie  $\Xi = \left(\frac{5}{2} - \omega\right) + \frac{\Sigma\zeta}{2} + \frac{\zeta_{i,j}}{2}$ . Comme indiqué par Bird [43], la fonction de distribution cumulative associée à (3.36) est indépendante du terme  $\frac{\Sigma\zeta}{2}$ . Par conséquent, cette distribution peut être utilisée pour une redistribution ne faisant intervenir que le mode de translation et un mode d'énergie interne. Bird propose donc de redistribuer l'énergie en série c'est-à-dire en considérant successivement les échanges entre l'énergie de translation et chaque mode interne en utilisant la fonction de distribution :

$$f \left( \frac{\epsilon_{i,j}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right) = \frac{\Gamma(\frac{5}{2} - \omega + \frac{\zeta_{i,j}}{2})}{\Gamma(\frac{5}{2} - \omega)\Gamma(\frac{\zeta_{i,j}}{2})} \left( \frac{\epsilon_{i,j}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right)^{\zeta_{i,j}/2 - 1} \left( 1 - \frac{\epsilon_{i,j}}{\epsilon_{\text{coll}}} \right)^{3/2 - \omega}. \quad (3.37)$$

Pour ce type de redistribution, l'énergie de collision  $\epsilon_{\text{coll}}$  est l'énergie de collision réduite donnée par la somme entre l'énergie de translation  $\epsilon_{\text{tr}}$  et l'énergie  $\epsilon_{i,j}$  du mode interne de la molécule mis à jour. A chaque fois qu'un mode d'énergie interne d'une particule est modifié, l'énergie de collision est mise à jour selon la relation :

$$\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + (\epsilon_{i,j} - \epsilon'_{i,j}), \quad (3.38)$$

et le processus est réitéré pour chaque mode d'énergie interne. Cette version en série du modèle de Borgnakke-Larsen possède l'avantage d'être adaptée au traitement de l'énergie de vibration considérée comme un mode discret.

### 3.2 Le modèle Borgnakke-Larsen pour les transferts V-T

Dans le cadre des écoulements hypersoniques raréfiés, il est courant de modéliser le mode d'énergie de rotation par un spectre continu et de traiter les modes de vibration et électroniques comme des modes d'énergie discrets. D'après Bird [43], la méthode Borgnakke-Larsen peut s'appliquer au mode d'énergie de vibration, qu'il soit considéré comme continu ou discret. Dans le premier cas, une procédure similaire à celle présentée dans la section précédente est employée. Si le mode de vibration est considéré discret, la redistribution d'énergie entre les particules se fait en série et l'énergie de vibration  $\epsilon_{\text{vib},j}$  d'une particule  $j$  est donnée par le modèle de l'oscillateur harmonique :

$$\epsilon_{\text{vib},j} = ik\theta_v, \quad (3.39)$$

où  $i$  est le niveau quantique du mode d'énergie et  $\theta_v$  est la température caractéristique du mode de vibration<sup>1</sup>. La distribution d'énergie discrète de ce mode au niveau  $i$  vérifie la relation de proportionnalité :

$$f(\epsilon_{\text{vib}}) \propto \exp\left(-\frac{\epsilon_{\text{vib}}}{kT}\right) \delta(\epsilon_{\text{vib}} - ik\theta_v), \quad (3.40)$$

où la fonction dirac  $\delta$  est définie par :

$$\int_a^b f(x)\delta(x - x_0)dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{si } a < x_0 < b \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (3.41)$$

et sert à transformer l'intégration sur une distribution d'énergie continue en une somme sur les niveaux discrets. Finalement, le ratio de probabilité sous forme discrète donné par Bird [43] s'écrit :

$$\frac{P}{P_{\text{max}}} = \left(1 - \frac{i'k\theta_v}{\epsilon_{\text{coll}}}\right)^{\zeta_{\text{tr}}/2-1}, \quad (3.42)$$

où  $i'$  est le niveau d'énergie post-collision qui vérifie :

$$i'_{\text{max}} = \left\lfloor \frac{\epsilon_{\text{coll}}}{k\theta_v} \right\rfloor, \quad (3.43)$$

et  $\epsilon_{\text{coll}}$  est l'énergie de collision réduite  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{vib},j}$ . Finalement, un tirage aléatoire du niveau d'énergie post-collision est effectué de manière uniforme entre 0 et  $i'_{\text{max}}$  puis une procédure d'acceptation-rejet appliquée à la relation (3.42) permet de déterminer l'énergie de vibration post-collision de la particule.

### 3.3 Remarques sur le modèle Borgnakke-Larsen

Le modèle de Borgnakke-Larsen peut être vu comme un modèle phénoménologique qui tire le système vers un état d'équilibre au fil des collisions inélastiques successives. De plus, comme le modèle respecte le principe de micro-réversibilité, il maintient l'équilibre, une fois celui-ci atteint [75]. Toutefois, comme l'explique Chabut [75], le modèle de redistribution d'énergie Borgnakke-Larsen est souvent critiqué car il utilise des fonctions de distribution d'énergie à l'équilibre pour redistribuer l'énergie dans un gaz supposé hors équilibre. Si cette approche peut paraître surprenante à première vue, ces deux aspects ne sont en fait pas contradictoires car l'utilisation d'une fonction de distribution à l'équilibre n'implique pas la simulation d'un écoulement à l'équilibre. Pour bien comprendre cette assertion, il faut revenir aux calculs de Bird [43] qui conduisent à l'utilisation des fonctions de distribution présentées dans les sections 3.1 et 3.2. La température  $T$  utilisée par Bird est en fait la température de collision  $T_{\text{coll}}$  propre à chaque collision *i.e.* celle calculée à partir de l'énergie de collision  $\epsilon_{\text{coll}}$  :

$$T_{\text{coll}} = \frac{\epsilon_{\text{coll}}}{k\Xi}, \quad (3.44)$$

où  $\Xi$  est la somme des degrés de liberté moyens contribuant à la redistribution d'énergie. Par conséquent, l'échantillonnage de cette méthode n'est pas équivalent à un échantillonnage à partir d'une fonction de distribution à l'équilibre local. En d'autres termes, l'utilisation des fonctions de distribution d'énergie à l'équilibre ne fait pas d'hypothèse sur l'état d'équilibre du gaz.

1. La température  $\theta_v$  caractérise l'espacement des niveaux d'énergie de vibration  $\Delta\epsilon_{\text{vib}} = k\theta_v$ .

## 4 Collisions inélastiques : procédure de sélection et modèles de relaxation thermique

Comme cela a été discuté à la section 3.2 du chapitre 2, les données expérimentales des phénomènes de relaxation sont principalement composées de résultats en tubes à choc et se réduisent aux équations de Jeans et Landau-Teller :

$$\frac{dE_{\text{rot}}}{dt} = \frac{E_{\text{rot}}^*(T) - E_{\text{rot}}(t)}{\tau_{\text{rot}}}, \quad (3.45)$$

$$\frac{dE_{\text{vib}}}{dt} = \frac{E_{\text{vib}}^*(T) - E_{\text{vib}}(t)}{\tau_{\text{vib}}}. \quad (3.46)$$

La redistribution d'énergie doit donc se faire de façon à respecter les vitesses de relaxation expérimentales. Le modèle d'échange de Borgnakke-Larsen doit donc être complété par une procédure de sélection et un choix particulier des probabilités de collision inélastique décrits ci-dessous.

### 4.1 Procédure de sélection

Comme l'explique Boyd [1], lors d'une collision réelle entre deux particules, l'énergie des deux molécules est généralement altérée. La méthode DSMC étant stochastique, l'objectif est de modéliser précisément l'évolution des fonctions de distribution moléculaires mais pas chaque atome du système en détail. Par conséquent, il est parfaitement acceptable de modifier l'énergie d'une seule particule lors d'une collision. On appelle procédure de sélection l'algorithme qui ordonne et sélectionne les particules et les modes d'énergie modifiés lors d'une collision. Afin que le modèle physique simulé soit pertinent, la procédure de sélection est cruciale. Elle peut être réalisée de trois manières<sup>2</sup>.

- (i) **La sélection par paire** : une paire est testée pour une collision inélastique avec une certaine probabilité. Lorsqu'elle est sélectionnée, l'énergie de collision ( $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{rot},1} + \epsilon_{\text{rot},2}$ ) des deux particules est redistribuée par le modèle de Borgnakke-Larsen, entre les énergies post-collision de rotation ( $\epsilon'_{\text{rot}}$ ) et de translation ( $\epsilon'_{\text{tr}}$ ). L'énergie post-collision de rotation est ensuite redistribuée par le modèle Borgnakke-Larsen, entre les modes de rotation des deux particules. Une telle procédure emploie le modèle classique de Borgnakke-Larsen via les relations (3.34)-(3.35).
- (ii) **La sélection par particule avec double relaxation autorisée** : pour une paire de particules sélectionnée, chaque particule est testée individuellement. Si la première est sélectionnée, la procédure Borgnakke-Larsen est utilisée pour redistribuer l'énergie de collision ( $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{rot},1}$ ) entre les énergies post-collision de translation ( $\epsilon'_{\text{tr}}$ ) et de rotation de la particule ( $\epsilon'_{\text{rot},1}$ ). Ensuite, la deuxième particule est testée. Si elle est sélectionnée, la nouvelle énergie de collision ( $\epsilon'_{\text{coll}} = \epsilon'_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{rot},2}$ ) est redistribuée avec la procédure Borgnakke-Larsen entre l'énergie de translation post-collision finale ( $\epsilon_{\text{tr}}$ ) et l'énergie de rotation de la seconde particule ( $\epsilon'_{\text{rot},2}$ ). Cette procédure utilise la redistribution en série de la méthode Borgnakke-Larsen appliquée successivement à chaque mode de chaque particule de la paire.
- (iii) **La sélection par particule interdisant la double relaxation** : chaque particule est testée individuellement. L'énergie de collision de la particule  $i$  considérée ( $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{rot},i}$ ) est redistribuée par la procédure Borgnakke-Larsen entre l'énergie de translation de la paire ( $\epsilon'_{\text{tr}}$ ) et l'énergie de rotation de la particule ( $\epsilon'_{\text{rot},i}$ ). Lorsque la première particule est sélectionnée pour un transfert d'énergie, la deuxième n'est pas testée et le processus de relaxation de la paire prend fin. Cette procédure utilise également la redistribution en série de la méthode Borgnakke-Larsen mais elle est appliquée au plus une fois pour chaque collision.

2. On notera que pour simplifier les explications, on applique ces procédures au cas du transfert rotation-translation uniquement mais elles sont identiques dans le cas du transfert vibration-translation.

On peut noter que la première procédure couple les probabilités de relaxation ainsi que le processus de redistribution d'énergie, ce qui implique forcément un couplage du processus de relaxation. De manière moins directe, la deuxième procédure induit également un couplage du processus de relaxation lorsque les deux particules sont sélectionnées pour une collision inélastique. Même si un tel couplage semble physiquement réaliste, il convient de rappeler que la DSMC est une méthode phénoménologique construite pour reproduire des taux de relaxation voulus [1]. La procédure de sélection est donc fortement liée au choix des probabilités de collisions inélastiques.

## 4.2 Nombre de collisions et probabilité de collision inélastique

D'un point de vue microscopique, le retour à l'équilibre d'un système hors équilibre s'effectue par les collisions intermoléculaires. La vitesse de relaxation des modes internes d'énergie se traduit par la fraction des collisions inélastiques reproduisant macroscopiquement les temps de relaxation des équations de Jeans et Landau-Teller [75]. Comme indiqué dans [1], certaines procédures avancées de sélection permettent de respecter les vitesses de relaxation empiriques avec une procédure de sélection par particule interdisant la double relaxation et des probabilités de collision particulières. La dernière en date est celle de Zhang et Scwhartzentruber [80]. Le plus souvent, la probabilité d'une collision inélastique à l'origine d'un transfert d'énergie du mode de translation vers un mode interne vérifie simplement une relation du type [43, 76, 11] :

$$p_{\text{mode}} \propto \frac{1}{Z_{\text{mode}}}, \quad (3.47)$$

où pour rappel, le nombre de collisions  $Z_{\text{mode}}$  vaut  $\tau_{\text{mode}}/\tau_{\text{coll}}$  avec  $\tau_{\text{mode}}$  le temps de relaxation du mode d'énergie associé et  $\tau_{\text{coll}}$  le temps intercollision moyen. La vitesse de relaxation du processus est donc le résultat d'un nombre de collisions  $Z_{\text{mode}}$  dont la formulation définit le modèle de relaxation associé au mode d'énergie considéré.

## 4.3 Modèles de relaxation thermique

Jusqu'ici on s'est intéressé à la procédure de sélection et à l'expression des probabilités de collision assurant la consistance avec les taux de relaxation donnés par les équations de Jeans et Landau-Teller. On se pose maintenant la question de la nature du nombre de collisions  $Z_{\text{mode}}$ .

D'après Boyd [1], il existe deux approches pour calculer les probabilités de collision. La première approche est la plus simple ; elle propose de considérer  $Z_{\text{mode}}$  comme un nombre constant dans tout l'écoulement. A titre d'exemple, pour un écoulement d'air à 5 espèces, on considère généralement que  $Z_{\text{rot}} = 5$  et  $Z_{\text{vib}} = 200$  pour les espèces diatomiques. Lorsque la topologie de l'écoulement est suffisamment simple et que la plage de variation de température est suffisamment faible, cette approximation peut suffire.

L'expérience a cependant montré que le nombre de collisions dépend de la température du gaz [81, 82]. La deuxième approche propose donc de considérer  $Z_{\text{mode}}$  comme une fonction de la température, classiquement celle de la cellule considérée. Pour la rotation, le modèle de ce type le plus connu est le modèle de Parker [83] où  $Z_{\text{rot}}$  s'écrit :

$$Z_{\text{rot}}^{\text{Parker}}(T) = \frac{Z_{\text{rot}}^{\infty}}{1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{T^*}{T}\right)^{1/2} + \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi\right) \left(\frac{T^*}{T}\right)}. \quad (3.48)$$

Dans ce cas,  $T$  peut être la température de translation [1] ou la température de collision définie par l'équation (3.44) [43].  $T^*$  est la température caractéristique du potentiel intermoléculaire et  $Z_{\text{rot}}^{\infty}$  une valeur limitante.

De même pour la vibration, Millikan et White [84] ont montré que les données expérimentales peuvent être approchées par une relation de la forme :

$$p \tau_{\text{vib}} = C \exp(C_2 T^{-1/3}), \quad (3.49)$$

où  $C$  et  $C_2$  sont des constantes et  $p$  désigne la pression dans le gaz. En utilisant la loi des gaz parfaits, cette relation prend la forme du modèle de Millikan-White qui tient compte de la dépendance en température du nombre collisionnel de vibration  $Z_{\text{vib}}$  via l'expression :

$$Z_{\text{vib}}^{\text{MW}} = (C_1/T^\omega)\exp(C_2T^{-1/3}), \quad (3.50)$$

où  $T$  peut être la température de translation [1] ou la température de collision définie par l'équation (3.44) [75].  $C_1$ ,  $C_2$  et  $\omega$  sont des constantes propres aux espèces considérées. Pour plusieurs espèces, des valeurs de ces paramètres sont disponibles en Annexe A de [43].

Pour le mode de rotation, d'autres modèles de relaxation dépendants de l'énergie de collision sont décrits par Boyd [1]. Pour la vibration, une correction de la formule de Millikan-White pour le cas des températures élevées ( $T > 10\,000$  K) est également présentée dans [1]. Néanmoins, les modèles de Parker et de Millikan-White tels que définis par les équations (3.48) et (3.50) sont les plus utilisés. En général, on considère simplement que  $Z_{\text{rot}}$  est constant égal à 5.

Les modèles de relaxation influencent directement la vitesse de relaxation des modes auxquels ils se rapportent. Par conservation de l'énergie, une différence de modèle se traduit donc majoritairement par une modification de la répartition de l'énergie au sein des différents modes. Pour des applications de rentrée atmosphérique, cette modification de la répartition d'énergie se manifeste principalement par une modification du champ de température à travers le choc. En proche paroi, le champ de température est en revanche faiblement perturbé et l'influence du modèle de relaxation sur les propriétés surfaciques est donc relativement faible.

## 5 Modèles de relaxation chimique

Comme cela a été vu dans la section 3.2, les réactions chimiques susceptibles de se produire dans un écoulement hypersonique raréfié sont des réactions de dissociation, d'échange et de recombinaison à trois corps. Toutefois, dans les conditions de vol auxquelles on s'intéresse (*i.e.*  $U_\infty < 10$  km/s), les conditions de pression sur la portion raréfiée ne permettent pas la réalisation des processus de recombinaison. Ces types de réactions abordés dans [43, 1] ne sont donc pas traités ici. Dans cette section, les modèles de simulation des réactions chimiques les plus répandues, à savoir les modèles Total Collision Energy (TCE) [43] et Quantum Kinetic (Q-K) [85], sont présentés.

### 5.1 Modèles de relaxation chimique : Le modèle TCE

#### 5.1.1 Réactions de dissociation

En DSMC, les collisions d'énergie assez importante pour briser les liaisons chimiques des particules peuvent aboutir à des réactions de dissociation. Le modèle TCE propose de définir la probabilité d'une réaction chimique comme une fonction de l'énergie de collision  $\epsilon_{\text{coll}}$  et de l'énergie d'activation  $\epsilon_a$  de la réaction considérée :

$$P_{\text{react}} = \begin{cases} 0 & \text{si } \epsilon_{\text{coll}} < \epsilon_a \\ C_1(\epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_a)^{C_2}(1 - \epsilon_a/\epsilon_{\text{coll}})^{C_3} & \text{si } \epsilon_{\text{coll}} > \epsilon_a \end{cases}, \quad (3.51)$$

où  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  sont des paramètres liés aux paramètres de collision et au taux de réaction  $k_f$ . Considérons deux espèces A et B susceptibles d'entrer en collision. D'après Boyd [1], à la limite de l'équilibre thermique on peut relier la probabilité de réaction  $P_{\text{react}}$  aux taux de réaction de la façon suivante. Considérons l'expression de la vitesse de réaction de l'espèce A due aux réactions avec des particules d'espèce B. En DSMC, cette vitesse vaut :

$$\frac{dn_A}{dt} = -n_A \nu_{A,B} \int_0^\infty P_{\text{react}}(\epsilon_{\text{coll}}) f(\epsilon_{\text{coll}}) d(\epsilon_{\text{coll}}), \quad (3.52)$$

où  $n_A$  est la densité numérique d'espèce A et  $\nu_{A,B}$  est la fréquence de collision qui pour un modèle VHS vaut :

$$\nu_{A,B} = \frac{n_B (d_{\text{ref}}^2)_{A,B}}{(1 + \delta_{A,B})} \sqrt{\frac{8\pi k (T_{\text{ref}})_{A,B}}{m_r}} \left( \frac{T}{(T_{\text{ref}})_{A,B}} \right)^{1-\omega_{A,B}}. \quad (3.53)$$

Enfin, la distribution d'énergie est donnée par la relation d'Hinshelwood :

$$f(\epsilon_{\text{coll}}) = \frac{1}{\Gamma(\zeta_T/2)} \frac{1}{kT} \left( \frac{\epsilon_{\text{coll}}}{kT} \right)^{\Xi-1} \exp\left(-\frac{\epsilon_{\text{coll}}}{kT}\right), \quad (3.54)$$

où  $\Xi$  est la somme des degrés de liberté moyens disponibles pour la collision. Comme l'énergie de collision vaut :

$$\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + \sum_i (\epsilon_{i,1} + \epsilon_{i,2}), \quad (3.55)$$

le nombre total de degrés de liberté disponible vaut quant à lui :

$$\Xi = \frac{\zeta_{\text{tr}}}{2} + \frac{1}{2} \sum_i (\zeta_{i,1} + \zeta_{i,2}). \quad (3.56)$$

Ainsi le paramètre  $C_3$  peut directement être relié aux degrés de liberté :

$$C_3 = \Xi - 1 = \frac{\zeta_{\text{tr}}}{2} + \bar{\zeta} - 1, \quad (3.57)$$

où  $\bar{\zeta}$  est la moyenne des degrés de liberté internes. En combinant ce dernier résultat et les équations (3.52)-(3.53) pour le modèle VHS ( $\zeta_{\text{tr}} = 5 - 2\omega$ ), on peut écrire :

$$\frac{dn_A}{dt} = -\frac{n_A n_B d_{\text{ref}}^2}{(1 + \delta_{A,B})} \sqrt{\frac{8\pi k T_{\text{ref}}}{m_r}} C_1 \frac{\Gamma(C_2 + \zeta_T/2)}{\Gamma(\Xi)} (k)^{C_2} \frac{T^{C_2+1-\omega}}{t_{\text{ref}}^{1-\omega}} \exp\left(-\frac{\epsilon_a}{kT}\right). \quad (3.58)$$

Comme à la limite de l'équilibre on a aussi :

$$\frac{dn_A}{dt} = -k_f(T) n_A n_B, \quad (3.59)$$

où pour rappel :

$$k_f(T) = AT^n \exp\left(-\frac{\epsilon_a}{kT}\right), \quad (3.60)$$

alors on peut identifier les paramètres restants :

$$C_2 = \eta - 1 + \omega, \quad (3.61)$$

$$C_1 = A \left[ \frac{d_{\text{ref}}^2}{(1 + \delta_{A,B})} \frac{\Gamma(C_2 + \zeta_T/2)}{\Gamma(\zeta_T/2)} \sqrt{\frac{8\pi k T_{\text{ref}}}{m_r}} \frac{k^{C_2}}{T_{\text{ref}}^{1-\omega}} \right]^{-1}. \quad (3.62)$$

Par conséquent, lorsque les paramètres  $A$ ,  $\eta$  et  $\epsilon_a$  du modèle d'Arrhenius sont connus à partir d'un modèle de cinétique quelconque, la probabilité de réaction du modèle TCE est entièrement déterminée. A la limite de l'équilibre thermique, la cohérence entre la dissociation simulée et la loi de réaction est assurée.

### 5.1.2 Procédure de redistribution d'énergie post-dissociation

Dans le cas d'une réaction de dissociation par exemple, l'énergie d'activation  $\epsilon_a$  est égale à l'énergie de dissociation  $\epsilon_d$ . La redistribution d'énergie entre l'énergie de collision  $\epsilon_{\text{coll}}$  et les modes d'énergie des particules expliquée par Boyd [1] se résume de la manière suivante. Soit une réaction de dissociation quelconque :



où  $AB$  est la molécule qui se dissocie par collision avec le catalyseur  $M$ . Le nombre total de degrés de liberté de translation pour cette réaction vaut :  $\zeta_{\text{tr-ABM}} + \zeta_{\text{tr-AB}}$ , où le premier terme correspond aux degrés de liberté du système  $AB + M$  et le deuxième au système  $A + B$ . Comme la réaction est endothermique, la procédure consiste à redistribuer l'énergie  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_a$  parmi les degrés

de liberté des produits. Si l'un des produits de la réaction est une molécule, on redistribue  $\epsilon_{\text{coll}}$  parmi les degrés de liberté  $\zeta_{\text{vib}}$  et les degrés de liberté des produits  $\zeta_{\text{prod}} = \zeta_{\text{rot}} + \zeta_{\text{tr-ABM}} + \zeta_{\text{tr-AB}}$ . L'énergie de collision devient  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_{\text{vib}}$  qui est alors redistribuée entre les degrés de liberté  $\zeta_{\text{rot}}$  d'une part et les degrés de liberté  $\zeta_{\text{tr-ABM}} + \zeta_{\text{tr-AB}}$  d'autre part. De la même manière, l'énergie de collision devient  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_{\text{rot}}$  que l'on peut redistribuer parmi les modes de translation  $\zeta_{\text{tr-ABM}}$  et  $\zeta_{\text{tr-AB}}$ . Cette étape permet de déterminer les propriétés post-collision de la particule M. Finalement, l'énergie  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}} - \epsilon_{\text{tr-ABM}}$  est l'énergie restante disponible pour les degrés de liberté des particules dissociées. Pour les deux dernières étapes, la redistribution de l'énergie parmi les degrés de liberté des modes de translation revient à utiliser l'énergie disponible pour calculer les vitesses post-collision du système associé. Les subtilités d'implémentation de ce genre d'algorithme sont présentées en détails en Annexe C de [1].

La procédure de redistribution d'énergie à l'issue d'une réaction de dissociation exposée ici s'applique de la même manière aux réactions d'échange à la différence près que pour les réactions d'échange inverses (*i.e.* exothermiques), c'est l'énergie de collision  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}} + \epsilon_f$  qui est redistribuée, avec  $\epsilon_f$  l'énergie d'activation de la réaction directe.

### 5.1.3 Réactions d'échange

Considérons maintenant les réactions d'échange de formulation générale :



Dans le sens direct, l'application du modèle TCE permet de définir la probabilité d'occurrence de cette réaction grâce à la loi d'Arrhenius correspondante. Cela se fait de la même manière que pour les réactions de dissociation, avec l'énergie d'activation égale à l'énergie d'activation de la réaction directe  $\epsilon_f$ .

Si l'on s'intéresse désormais au sens indirect, l'approche du modèle TCE consiste à exprimer  $k_b$  par une loi d'Arrhenius de paramètres  $A_b$ ,  $\eta_b$ ,  $\epsilon_b$  :

$$k_b(T) = A_b T^{\eta_b} \exp\left(-\frac{\epsilon_b}{kT}\right), \quad (3.65)$$

où  $\epsilon_b$  est l'énergie d'activation de la réaction inverse. Comme la réaction est exothermique, on considère que cette énergie est nulle et la probabilité de réaction inverse s'écrit alors :

$$P_{\text{inv}} = C_1 (\epsilon_{\text{coll}})^{C_2}, \quad (3.66)$$

où les paramètres  $C_1$  et  $C_2$  sont calculés à partir de  $A_b$ ,  $\eta_b$  et  $\epsilon_b$ .

Dans les deux sens, la redistribution d'énergie se fait de la même manière que celle présentée dans le paragraphe 5.1.2 à la différence près que dans le sens inverse (réaction exothermique), c'est l'énergie d'activation de la réaction directe qui est ajoutée à l'énergie de collision redistribuée.

Le modèle TCE est un modèle phénoménologique dont l'implémentation dans un code DSMC vise à reproduire fidèlement les taux de réaction à l'équilibre. Bird [43] précise que lors du calcul des probabilités de réaction, la contribution des modes internes à l'énergie de collision est un paramètre arbitraire et que les taux de réaction peuvent être approchés fidèlement pour différentes valeurs du nombre de degrés de liberté internes  $\zeta$ . Par conséquent, il est tout à fait possible de rencontrer des versions du modèle TCE qui diffèrent sensiblement d'un code à un autre.

## 5.2 Modèles de relaxation chimique : Le modèle Q-K

La modèle Q-K est un modèle proposé par Bird [85] en réponse au caractère phénoménologique du modèle TCE. En effet, l'expérience montre qu'un niveau de vibration élevé favorise les réactions de dissociation. Cet aspect n'étant pas pris en compte par le modèle TCE, l'objectif de ce modèle

est de lier la probabilité de réaction au niveau d'énergie de vibration des particules sans supposer que le gaz se trouve dans un état d'équilibre. On s'intéresse ici à la version améliorée du modèle introduite par Bird dans [86].

Pour les réactions de dissociation de type :



on commence par calculer l'énergie de collision :

$$\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{tr}} + \epsilon_{\text{vib}}. \quad (3.68)$$

Le niveau quantique de vibration maximal autorisé est donné par :

$$i_{\text{max}} = \lfloor \epsilon_{\text{coll}} / (k\theta_v) \rfloor, \quad (3.69)$$

où  $\theta_v$  est la température caractéristique de vibration du modèle de l'oscillateur harmonique. Alors la dissociation a lieu si :

$$i_{\text{max}} > \frac{\theta_d}{\theta_v}, \quad (3.70)$$

où  $\theta_d$  est la température caractéristique de dissociation. On peut alors calculer l'énergie de collision par soustraction de l'énergie d'activation  $\epsilon_a$ . Puis sa redistribution se fait de façon analogue à la procédure détaillée dans le paragraphe 5.1.2.

Pour une réaction d'échange (inverse ou directe) d'énergie d'activation  $\epsilon_a$ , on calcule  $\epsilon_{\text{coll}}$  selon la relation (3.68) puis l'on définit la probabilité de réaction :

$$P_{\text{react}} = \frac{(1 - \epsilon_a / \epsilon_{\text{coll}})^{3/2 - \omega}}{\sum_{i=0}^{i_{\text{max}}} (1 - ik\theta_v / \epsilon_{\text{coll}})^{3/2 - \omega}}. \quad (3.71)$$

Ensuite, l'énergie de collision est redistribuée de façon identique au cas d'une réaction de dissociation par soustraction ou addition de l'énergie d'activation selon le sens de réaction.

Dans [87], Bird compare les résultats obtenus avec les modèles Q-K et TCE sur un calcul 1D de rentrée atmosphérique d'un corps émoussé avec une vitesse de 7.5 km/s et à une altitude de 85 km. La comparaison des températures ( $T_{\text{tr}}$ ,  $T_{\text{rot}}$ ,  $T_{\text{vib}}$ ), de la densité numérique et des compositions chimiques ( $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{N}$  et  $\text{NO}$ ) montre des comportements très similaires pour les deux modèles. La comparaison de la pression et des coefficients de transfert de chaleur au point d'arrêt s'accordent à 1% près. Bird [87] conclut donc que les modèles TCE et Q-K fournissent des résultats de qualité similaire lorsque des données fiables sont disponibles pour les taux de réaction sur les intervalles de température considérés (dans son cas jusqu'à  $T_{\text{tr}} = 25\,000$  K). Par contre, lorsque l'on sort de ce cas de figure, les avantages du modèle Q-K sont censés surpasser de loin le modèle TCE.

### 5.2.1 Procédure générale de redistribution d'énergie post-réaction

Les différentes probabilités de réaction relatives au modèle TCE et Q-K ont été vues dans les paragraphes précédents. On se propose ici de donner la procédure générale de redistribution d'énergie faisant suite à une réaction chimique. Cette procédure expliquée par Boyd [1] met en application les étapes suivantes :

1. On commence par appliquer la procédure NTC pour former les paires de particules aléatoires de la cellule. Ces paires sont testées pour une collision avec la probabilité  $P_{\text{DSMC}}$  donnée par l'équation (3.5).
2. Pour une paire de particules d'espèces  $i$  et  $j$ , on détermine la liste des réactions possibles pour lesquelles ces espèces sont les premiers réactifs. Si cette liste contient plus d'une réaction alors on spécifie un ordre arbitraire dans lequel les réactions sont considérées.

3. Pour chaque réaction de la liste, la paire de particules est testée. Selon le modèle et le type de réaction, on calcule la probabilité  $P_{\text{react}}$  ou  $P_{\text{inv}}$  qui est utilisée dans une procédure d'acceptation-rejet. Si la réaction est acceptée on passe à l'étape 4; sinon on teste la paire pour la réaction suivante.  
Si la paire est rejetée pour l'ensemble des réactions de la liste, alors aucune réaction ne se produit et la paire est testée pour une collision inélastique impliquant un transfert d'énergie.
4. On calcule l'énergie de collision  $\epsilon_{\text{coll}}$  disponible pour la redistribution d'énergie.
  - 4a. Pour les réactions qui sont exothermiques (échange inverse),  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}}^{\text{reactifs}} + \epsilon_f$ , où  $\epsilon_f$  est l'énergie d'activation de la réaction directe.
  - 4b. Pour les réactions endothermiques (dissociation ou échange direct),  $\epsilon_{\text{coll}} = \epsilon_{\text{coll}}^{\text{reactifs}} - \epsilon_f$ , où  $\epsilon_f$  est l'activation d'énergie de la réaction directe.
5. L'énergie disponible est redistribuée parmi les modes d'énergie des produits en suivant la même procédure que celle présentée dans le paragraphe 5.1.2. Dans le cas où il y a deux molécules dans les produits, une façon de faire est de redistribuer d'abord l'énergie parmi les modes  $\epsilon_{\text{vib},1}$ ,  $\epsilon_{\text{rot},1}$  puis l'énergie restante parmi les modes  $\epsilon_{\text{vib},2}$ ,  $\epsilon_{\text{rot},2}$ . La dernière portion d'énergie disponible est ensuite distribuée dans les modes de translation des produits.
6. Les propriétés ont été mises à jour, le processus de réaction pour la paire sélectionnée s'arrête et une autre paire est sélectionnée.

### 5.3 Modèles en voie de développement

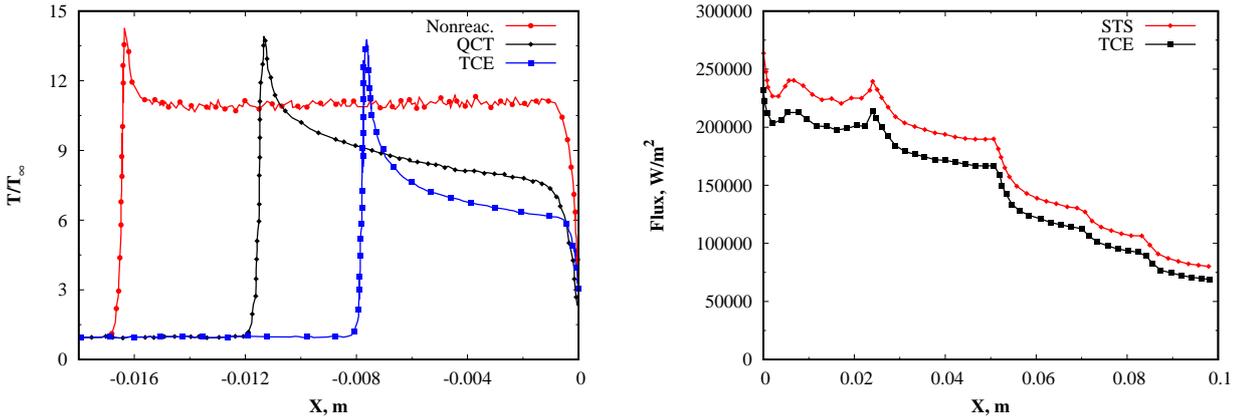
Comme l'explique Gallis [88], la validation des modèles de chimie en conditions de déséquilibre est une tâche très complexe du fait des incertitudes élevées sur ce type de données expérimentales. Le plus souvent, la validation se fait donc dans des conditions proches de l'équilibre thermique pour lesquelles des mesures relativement précises des vitesses de réaction sont disponibles. Depuis les années 80, le modèle bi-température de Park [89] est l'approche standard pour traiter le cas des écoulements en déséquilibre thermique avec les équations de Navier-Stokes. L'article de Gallis [88] porte donc sur la comparaison des vitesses de réactions obtenues par DSMC avec le modèle Q-K et les données expérimentales de Park en conditions proches et hors-équilibre. Dans l'ensemble, les résultats s'accordent bien et les différences restent de l'ordre de grandeur des incertitudes du modèle de Park. Quelques différences restent toutefois notables pour les taux de réaction hors équilibre pour des cas où la température de vibration est faible. Gallis [88] rappelle, par ailleurs, qu'en l'absence d'informations sur les états spécifiques, la validation complète des modèles de chimie en déséquilibre est impossible. C'est pourquoi le développement d'autres modèles de relaxation thermo-chimiques d'états spécifiques sont à l'étude.

Comme le souligne Schwartzentruber [90], outre le développement de modèles phénoménologiques avancés, un axe de développement de la méthode DSMC consiste en l'incorporation de modèles de collision *ab initio* (*i.e.* basés sur la chimie quantique) dans le but d'améliorer la compréhension des écoulements hypersoniques jusqu'aux niveaux fondamentaux. La **méthode Quasi Classical Trajectory (QCT)** par exemple, propose d'utiliser les résultats de la dynamique moléculaire pour calculer les surfaces d'énergie potentielle pour chaque réaction considérée et en déduire la probabilité de réaction correspondante. Cette méthode, introduite par Fujita [91], est employée par Ozawa [92] pour la simulation de réactions  $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$  et  $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$ . Dans le cadre d'une application à la modélisation d'un écoulement hypersonique ( $U_\infty = 5.1$  km/s) autour d'une sphère de 0.2 m de diamètre à 80 et 100 km d'altitude, les résultats montrent notamment des différences importantes dans le calcul de la température de vibration d'OH le long de la ligne d'arrêt (écart supérieur à 1000 K à 100 km d'altitude). Toutefois, l'impact sur les grandeurs pariétales n'est pas évalué.

Les **modèles d'état spécifique ou niveau par niveau (SST)** permettent de s'affranchir de l'aspect phénoménologique propre aux transitions énergétiques en spécifiant les probabilités de transition niveau par niveau quantiques. Kim et Boyd [93] présentent une analyse résolue de ce type

pour des collisions  $N + N_2$  en utilisant la méthode DSMC. Cette méthode est construite à partir d'une section efficace totale d'état spécifique (SST) et d'une base de données de sections efficaces de transitions rovibrationnelles niveau par niveau et de réactions chimiques. Ce modèle permet de redéfinir la section efficace totale  $\sigma_T$  pour prendre en compte l'état d'excitation rotationnel et vibrationnel des particules. Les détails de cette méthode sont présentés dans [93] et résumés dans [90]. Le modèle est ensuite comparé à deux combinaisons de modèles phénoménologiques. Ces combinaisons emploient un modèle de collision VSS, la procédure de Borgnakke-Larsen pour les transferts d'énergie et le modèle TCE pour la première tandis que la deuxième utilise le modèle Q-K. Les résultats montrent que la méthode SST mise en œuvre par Kim et Boyd décrit plus précisément les transferts Rotation-Translation (R-T), Vibration-Translation (V-T) et Rotation-Vibration (R-V) ainsi que l'état quasi-stationnaire des énergies de rotation et de vibration des réactions chimiques hors équilibre. Néanmoins, là non plus aucune évaluation sur les grandeurs pariétales n'est proposée.

Deux autres cas de comparaison entre le modèle TCE et des modèles avancés sont présentés dans [5]. Le premier cas, représenté sur la Figure 3.3a, correspond à la simulation d'un écoulement 2D de  $N_2$  sur un coin de  $62.5^\circ$  à  $M_\infty = 7.7$  pour un nombre de Knudsen  $Kn_\infty = 6.5 \times 10^{-4}$ . La température déterminée par trois modèles est tracée : en rouge, un cas non réactif, en bleu, un modèle TCE et en noir, un modèle niveau par niveau. La Figure 3.3b correspond à la distribution du flux de chaleur pariétal obtenu par simulation 2D axi-symétrique d'un point de vol (80 km, 5 km/s) de la rentrée du véhicule EXPERT avec un modèle niveau par niveau en rouge et un modèle TCE en noir.



(a) Température de translation le long de la ligne d'arrêt pour un modèle non réactif (rouge), TCE (bleu) et QCT (noir) (b) Distribution du flux de chaleur sur la surface du véhicule à 80 km d'altitude pour un modèle STS (rouge) et TCE (noir)

FIGURE 3.3 – Influence de différents modèles de réaction sur la température de translation le long de la ligne d'arrêt et la distribution de flux de chaleur pariétale (reproduits d'après [5]).

Bien que ces résultats montrent une différence significative entre les modèles phénoménologiques et les modèles d'état à état, ces derniers nécessitent une quantité de données très importante pour chaque type de collision. A titre d'exemple, pour l'azote, il existe 9390 états rotationnels et vibrationnels dans l'état électronique fondamental. La surface d'énergie potentielle construite par les scientifiques de la NASA pour la collision  $N + N_2$  fait intervenir 23 millions de sections efficaces de réaction différentes.

Les principaux défis résident donc dans la création de bases de données de trajectoire *ab initio*, de modèles réduits de modèles d'état à état et dans la génération de données expérimentales de haute qualité [90]. Récemment, la rentrée de la capsule Stardust a été étudiée par Mankodi *et al.* [6]. Dans leurs travaux, des points de vol situés à 68, 80 et 100 km ont été simulés par DSMC avec deux modèles de chimie. La comparaison des résultats obtenus avec le modèle TCE et ceux obtenus avec un modèle *ab initio* montre des différences comprises entre 75 et 17% pour le flux de

chaleur au point d'arrêt. Des exemples de résultats sont représentés en Figure 3.4. Bien que très prometteur, on notera toutefois que ce type de modèle avancé n'est pas encore disponible dans les codes DSMC les plus connus, comme **SPARTA** ou **dsmcFoam**.

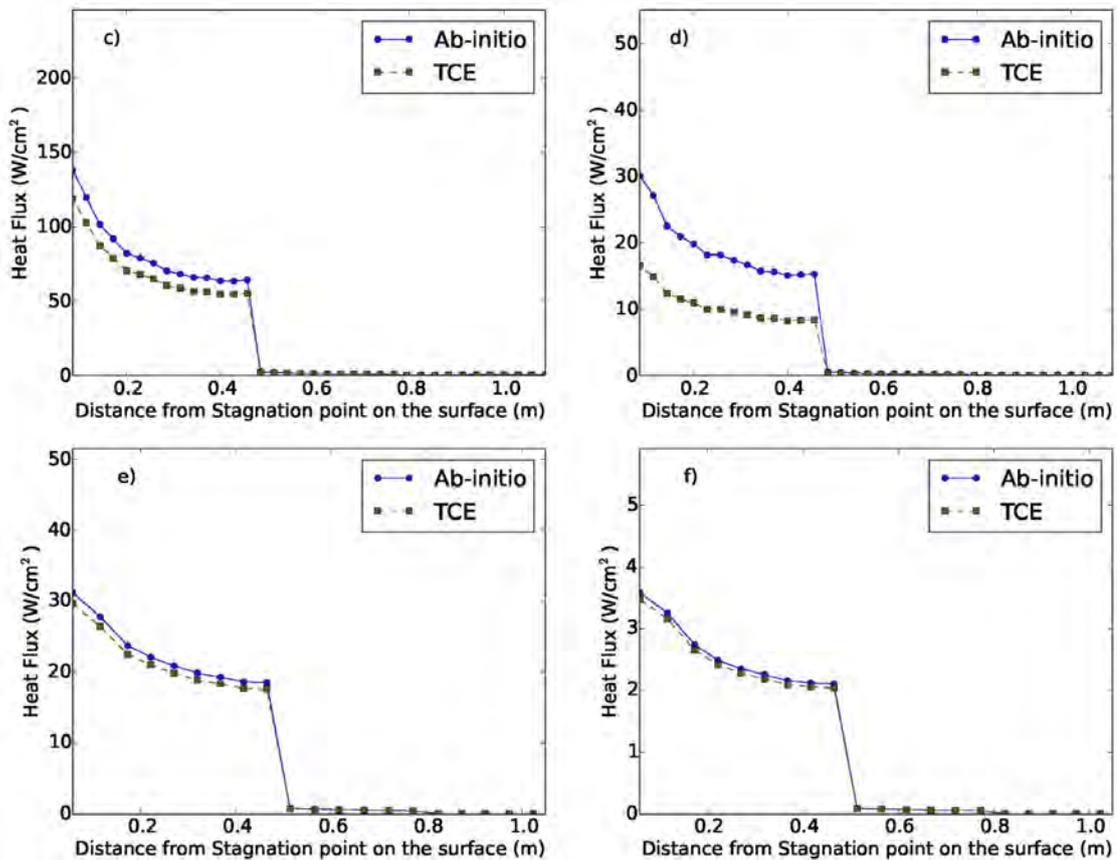


FIGURE 3.4 – Comparaison du flux de chaleur obtenu par DSMC à la surface de la capsule stardust à 80 (c)-(d) et 100 (e)-(f) km à des vitesses de 12.8 (c)-(e) et 6.4 (d)-(f) km/s (extrait de [6]).

## 6 Interactions gaz-surface

De manière générale, les phénomènes d'interactions gaz-surface désignent l'ensemble des mécanismes mis en jeu lorsque les particules de gaz impactent une paroi. Ces phénomènes comprennent donc aussi bien les réactions chimiques d'ablation, de catalycité ou de pyrolyse que les phénomènes d'altération des états d'énergie et de vitesse des particules. Comme indiqué à la fin du chapitre 1, dans notre cas on s'intéresse uniquement aux modèles d'interactions gaz-surface qui décrivent comment les particules sont réfléchies, sans prendre en compte les phénomènes chimiques.

### 6.1 Généralités

Lorsque le niveau de raréfaction est suffisamment élevé, les interactions inter-moléculaires s'ameunissent et les grandeurs pariétales deviennent fortement dépendantes des modèles d'interactions gaz-surface. Comme indiqué par Livadiotti *et al.* dans leur revue des modèles d'interactions gaz-surface dans le cadre d'une application aérodynamique orbitale [49], il existe deux familles de modèles d'interaction :

- (i) **Les modèles physiques** qui se basent sur des hypothèses propres aux potentiels d'interaction de surface, à la structure morphologique ou encore à la rigidité de surface pour décrire la façon dont la surface influence la réflexion d'un faisceau de particules incident.

- (ii) **Les modèles statistiques** qui se construisent à partir de la théorie des noyaux de diffusion pour relier la distribution de particules incidentes à la distribution de particules réfléchies.

Pour une application telle que la DSMC, les modèles statistiques sont privilégiés. Une description mathématique complète de la théorie des noyaux de réflexion et des conditions qu'ils doivent satisfaire est proposée dans les références [49, 94, 95] et sort du cadre de ce travail. Ici, la présentation des modèles d'interactions gaz-surface se restreint à la notion de coefficient d'accommodation et aux modèles les plus populaires en DSMC : les modèles de Maxwell et de Cercignani, Lampis et Lord (CLL).

## 6.2 Coefficient d'accommodation et modèle de Maxwell

Les paramètres d'interaction ou coefficients d'accommodation sont les paramètres utilisés dans les modèles d'interaction. Considérons une propriété moléculaire  $Q$ , alors on peut écrire le coefficient d'accommodation  $a_Q$  selon la relation :

$$a_Q = \frac{\phi_i^Q - \phi_r^Q}{\phi_i^Q - \phi_w^Q}, \quad (3.72)$$

où  $\phi_i^Q$  et  $\phi_r^Q$  désignent respectivement les flux incidents et réfléchis de la propriété  $Q$  et  $\phi_w^Q$  le flux de  $Q$  réfléchi avec accommodation complète (*i.e.* à l'équilibre thermique avec la paroi). L'expression de ces flux est donnée par les relations :

$$\phi_i^Q = \int (\vec{v} \cdot \vec{n})^- Q f(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (3.73)$$

$$\phi_r^Q = \int (\vec{v} \cdot \vec{n})^+ Q f(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (3.74)$$

$$\phi_w^Q = \int (\vec{v} \cdot \vec{n})^+ Q f_M(\vec{v}) d\vec{v}, \quad (3.75)$$

où  $f(\vec{v})$  est la fonction de distribution de vitesse telle que définie dans le chapitre 2 section 2 et  $f_M(\vec{v})$  est la Maxwellienne de paroi :

$$f_M(\vec{v}, \vec{u}_w, T_w) = \left( \frac{m}{2\pi k T_w} \right)^{3/2} \exp \left[ \frac{m|\vec{v} - \vec{u}_w|^2}{2k T_w} \right], \quad (3.76)$$

avec  $\vec{u}_w$  et  $T_w$  la vitesse et la température de paroi respectivement.

Le condition limite de Maxwell<sup>3</sup> consiste à exprimer la distribution  $f(\vec{v})$  des équations (3.73)-(3.75) par la relation :

$$f(\vec{v}) = w f_M(\vec{v}, \vec{u}_w, T_w) + (1 - w) f(\vec{R}_v), \quad w \in [0; 1], \quad (3.77)$$

où  $\vec{R}_v$  est le symétrique de  $\vec{v}$  par rapport à la surface. Ainsi, l'introduction de l'équation (3.77) dans l'équation (3.72) donne :

$$a_Q = w, \quad \forall Q; \quad (3.78)$$

ce qui explique pourquoi le coefficient  $w$  du modèle de Maxwell est communément confondu avec le coefficient d'accommodation  $a_Q$ .

D'après Padilla [35], une **réflexion est dite spéculaire** (Figure 3.5a) lorsque la molécule percute la structure moléculaire d'une surface solide de façon à ce que le rebond soit élastique (*i.e.* comme si la particule impactait une surface plane sans transfert d'énergie). Ce type de collision se produit lorsque la molécule de gaz entre en collision avec un pic de la structure moléculaire de la surface solide. Cette réflexion résulte en une inversion de la composante normale à la surface de la vitesse de la particule incidente et sans changement de la composante tangentielle. Une **réflexion**

3. Le premier modèle d'interactions gaz-surface développé par Maxwell fut publié en 1879.

est dite diffuse (Figure 3.5a) lorsque la particule incidente interagit avec la structure moléculaire de la surface de telle sorte que l'équilibre thermique soit atteint avec la surface. Les particules sont ainsi réfléchies avec des vitesses distribuées selon une loi normale  $f$  centrée sur la vitesse de paroi et d'écart-type défini par la température de paroi. Dans l'équation (3.77), le premier terme correspond à la fraction de particules réfléchie de façon diffuse et le deuxième à la fraction spéculaire. En d'autres termes, un coefficient  $w$  de 1 correspond à une réflexion totalement diffuse, tandis qu'un coefficient  $w$  nul correspond à une réflexion totalement spéculaire. Entre les deux, la réflexion est partiellement diffuse et le coefficient d'accommodation  $w$  donne la probabilité qu'une collision soit diffuse.

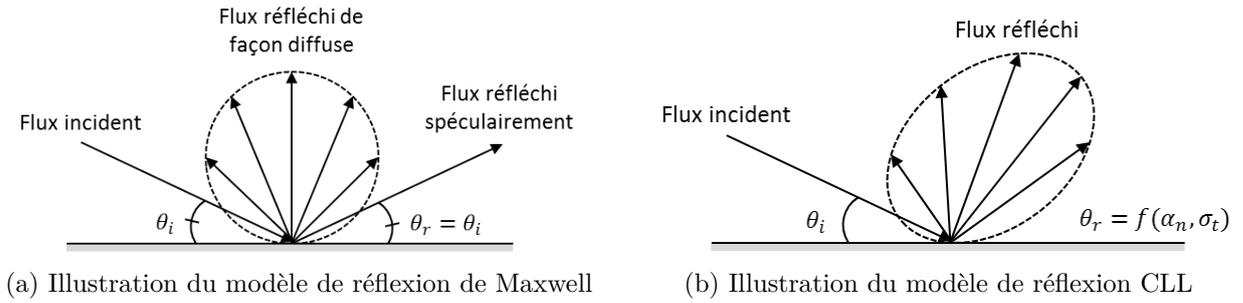


FIGURE 3.5 – Comparaison des modèles de réflexion (reproduit d'après [7]).

D'un point de vue énergétique, la notion de réflexion diffuse du modèle de Maxwell peut facilement être étendue au traitement de l'énergie interne. En effet, par définition d'une réflexion diffuse, la particule est réfléchie à l'équilibre thermique c'est-à-dire que l'ensemble de ses modes d'énergie interne se met à l'équilibre avec la paroi. De la même manière, la généralisation d'une réflexion spéculaire se traduit simplement par la conservation des modes d'énergie interne.

### 6.3 Modèle Cercignani, Lampis et Lord

Comme le modèle de Maxwell donnait des résultats en accord avec les expériences à basse vitesse, le développement de modèles d'interactions gaz-surface n'a reçu que peu d'attention jusqu'au lancement des premiers satellites et à l'apparition du phénomène de traînée moléculaire libre. Des faiblesses du modèle de Maxwell ont notamment été mises en évidence par des expériences utilisant des faisceaux moléculaires à haute vitesse [35]. En 1971, Cercignani et Lampis ont proposé un modèle faisant intervenir des coefficients d'accommodation pour la quantité de mouvement tangentielle  $\sigma_t = a_Q$  avec  $Q = m\vec{v}\cdot\vec{t}$ , et l'énergie cinétique normale  $\alpha_n = a_Q$  avec  $Q = \frac{1}{2}m(\vec{v}\cdot\vec{n})^2$ . Vingt ans plus tard, ce modèle est repris par Lord [96] donnant ainsi naissance au modèle CLL (Figure 3.5b).

La manipulation proposée par Lord consiste à considérer les coefficients d'accommodation dérivés  $\alpha_n = a_Q$  avec  $Q = \frac{1}{2}m(\vec{v}\cdot\vec{n})^2$  et  $\alpha_t = a_Q$  avec  $Q = \frac{1}{2}m(\vec{v}\cdot\vec{t})^2$ . Cette transformation permet alors d'échantillonner facilement les composantes de vitesse post-collision. L'algorithme de calcul des composantes de vitesse réfléchie de ce modèle implémenté dans le code *MONACO* de Boyd est donné dans [35] et reproduit dans le tableau 3.1.

D'un point de vue énergétique, le modèle de Cercignani-Lampis était initialement incapable de prendre en compte les modes d'énergie interne des particules polyatomiques. Les extensions de Lord [97, 98] ont permis de pallier ce manquement pour des modes continus d'énergie interne puis pour des modes discrets de vibration sous l'hypothèse de l'oscillateur harmonique. Dans cette version CLL, quatre coefficients d'accommodation  $\alpha_n$ ,  $\alpha_t$ ,  $\alpha_{\text{rot}}$ ,  $\alpha_{\text{vib}}$  contrôlent respectivement le flux réfléchi d'énergie cinétique normale, cinétique tangentielle, de rotation et de vibration.

### 6.4 Comparaison et influence des modèles

Dans le cadre de sa thèse, Padilla [95] s'est intéressé à la comparaison des modèles d'interactions gaz-surface de type Maxwell et CLL pour des écoulements hypersoniques raréfiés. Parmi ses

Comp. normale	Comp. tangentielle 1	Comp. tangentielle 2
$r_1 = \sqrt{-\alpha_n \ln(x_1)}$	$r_3 = \sqrt{-\alpha_t \ln(x_3)}$	$r_5 = \sqrt{-\alpha_t \ln(x_5)}$
$\phi_2 = 2\pi x_2$	$\phi_4 = 2\pi x_4$	$\phi_6 = 2\pi x_6$
$v_{n,m} =  v_{n,i}/v'_{mp,w}  \sqrt{1 - \alpha_n}$	$v_{t,m} =  v_{t,i}/v'_{mp,w}  \sqrt{1 - \alpha_t}$	
$v_{n,r} = v'_{mp,w} \sqrt{r_1^2 + v_{n,m}^2 + 2r_1 v_{n,m} \cos \phi_2}$	$v_{t_1,r} = v'_{mp,w} (v_{t,m} + r_3 \cos \phi_4)$	$v_{t_2,r} = v'_{mp,w} r_5 \cos \phi_6$

<sup>a</sup> Les  $x_i$  désignent des nombres aléatoires uniformément distribués entre 0 et 1,  $v'_{mp,w} = \sqrt{2kT_w/m}$  et  $\alpha_t = \sigma_t(2 - \sigma_t)$

TABLEAU 3.1 – Algorithme du modèle CLL (reproduit d'après [35]).

travaux, il s'est intéressé à la reproduction par DSMC d'une expérience en soufflerie basse densité. A cette occasion, plusieurs simulations d'un écoulement hypersonique raréfié froid sur une plaque plane ( $Kn \simeq 5 \times 10^{-3}$ ) ont été réalisées en faisant varier les paramètres des deux modèles de collision. Dans l'ensemble, les deux modèles parviennent à reproduire les champs de vitesse expérimentaux et fournissent des résultats similaires au niveau des grandeurs aérodynamiques pour des coefficients d'accommodation supérieurs à 50%. D'autre part, dans le calcul du flux de chaleur, l'énergie cinétique normale induit des différences notables entre les deux modèles pour des coefficients d'accommodation faibles. Bien que Padilla préconise une étude approfondie pour déterminer les paramètres garantissant l'adéquation entre le flux de chaleur calculé par les deux modèles et les résultats expérimentaux [35], les résultats actuels montrent tout de même une bonne cohérence pour des coefficients d'accommodation supérieurs à 75%.

Plus récemment, Zuppari *et al.* [99] se sont intéressés à la modélisation des grandeurs pariétales aérodynamiques et aérothermodynamiques d'un avion hypersonique à 120 km d'altitude ( $Kn \in [0.06; 0.15]$ ) dans différentes configurations de vol. Les résultats confirment la conclusion de Padilla quant à la similarité des résultats obtenus avec les deux modèles. En dépit de la simplicité du modèle de Maxwell, les résultats discutés ne permettent donc pas de le rejeter au profit du modèle CLL.

En pratique, le problème principal concernant les modèles d'interaction ne se situe pas au niveau du choix d'un modèle en particulier mais plutôt au niveau de son paramétrage. En effet, bien que l'étude des interactions gaz-surface soit un champ de recherche actif pour des applications d'aérodynamique satellite, ce n'est pas le cas pour les véhicules de rentrée. L'accommodation étant rarement quantifiée pour les matériaux de protection thermique, les paramètres se déduisent principalement d'analyse aérodynamique de trajectoires de satellites. Dans ce contexte, Moe [100] et plus récemment Crisp [101] se sont penchés sur le cas des interactions gaz-surface à des altitudes VLEO ( $h \leq 200$  km) et ont mis en évidence qu'en raison des phénomènes d'adsorption et de contamination, les coefficients d'accommodation se situent entre 0.8 et 1. Etant donnée la rugosité d'un système de protection thermique, les mêmes valeurs sont donc attendues.

## 7 Résumé

Ce chapitre a permis de dresser le portrait général de la méthode DSMC. En partant des hypothèses fondamentales sur lesquelles elle se construit, son algorithme principal et ses métriques de base ont été présentées. Ensuite, les différents éléments permettant de simuler les processus collisionnels ont été décrits successivement. A partir des paramètres de collision vus dans le chapitre 2, l'algorithme NTC a été présenté. Toujours dans un souci de souligner le lien entre les interactions moléculaires et les propriétés de transport, différents modèles de collision ont été analysés. Ainsi, le modèle le plus simple est le modèle HS basé sur un angle de déviation  $\chi$  supposé isotrope et une section efficace de collision  $\sigma_T$  indépendante de la vitesse relative de la paire collisionnelle. Malgré sa facilité d'implémentation et son efficacité, ce modèle induit une relation de proportionnalité physiquement incorrecte ( $\mu^{\text{HS}} \propto \sqrt{T}$ ). Le modèle VHS utilise le même angle  $\chi$  mais permet quant

à lui de restituer la loi de puissance adéquate ( $\mu^{\text{VHS}} \propto T^\omega$ ) grâce à une section efficace de collision de la forme  $\sigma_T = \sigma_T(d, g)$ . Enfin le modèle VSS emploie la même section efficace mais un angle de déviation  $\chi$  non-isotrope dépendant d'un paramètre supplémentaire  $\alpha$ . Pour la viscosité, il donne la même relation de proportionnalité ( $\mu^{\text{VSS}} \propto T^\omega$ ) mais permet, contrairement au modèle VHS, de reproduire simultanément des données de viscosité et de diffusion. D'autres modèles de collision plus complexes existent mais les efforts sont actuellement tournés vers l'acquisition de données de transport fiables sur des gammes de températures suffisamment larges pour ajuster les paramètres des modèles de collision les plus utilisés (*i.e.* les modèles VHS et VSS).

Pour simuler les phénomènes de relaxation thermo-chimiques, la méthode DSMC doit également modéliser les collisions inélastiques durant lesquelles des transferts d'énergie et des réactions chimiques peuvent se produire. Les mécanismes de transfert d'énergie à l'échelle moléculaire peuvent être simulés avec le modèle de Borgnakke-Larsen. Ce modèle repose sur un algorithme phénoménologique qui utilise des distributions d'énergie pour redistribuer l'énergie entre les modes d'énergie de translation et les modes internes des particules impliquées dans une collision. Afin de reproduire les taux de relaxation expérimentaux de Jeans et Landau-Teller, le modèle de Borgnakke-Larsen doit être utilisé avec des probabilités de transfert d'énergie particulières. Ces probabilités s'expriment généralement à partir des degrés de liberté et des nombres de collisions des modes contribuant aux transferts d'énergie. A ce titre, les différents modèles de relaxation proposent des probabilités et des nombres de collisions plus ou moins complexes afin de prendre en compte la dépendance en température ou en énergie du nombre de collisions. Bien que ces modèles permettent une modélisation plus ou moins précise des différentes températures actives, leur influence sur les propriétés surfaciques reste marginale.

Pour des écoulements hypersoniques raréfiés, une représentation fidèle de la composition chimique de l'écoulement est primordiale pour une restitution précise du flux de chaleur à la paroi. Pour simuler les réactions chimiques, la DSMC dispose de plusieurs modèles présentés dans ce chapitre. Ainsi, le modèle TCE de Bird est un modèle de chimie qui utilise les coefficients de la loi d'Arrhenius des réactions chimiques considérées pour calculer les probabilités de réaction. Afin de réduire l'aspect phénoménologique du modèle TCE, Bird a développé le modèle Q-K. Ce modèle tient notamment compte du lien entre l'état d'excitation du mode vibrationnel d'une molécule et sa probabilité de dissociation. Malgré sa nature physiquement plus aboutie, les deux modèles fournissent des résultats assez similaires dans les conditions de rentrée atmosphérique orbitale.

Pour la simulation des transferts d'énergie comme pour la simulation des réactions chimiques, les développements des modèles DSMC sont désormais orientés vers des modèles *ab initio* permettant de s'affranchir des aspects phénoménologiques des modèles actuels. Toutefois, la faible quantité de données expérimentales rend difficile leur validation, que ce soit au niveau de la détermination des taux de réactions hors équilibre ou des propriétés de l'écoulement.

Les interactions gaz-surface sont la dernière forme d'interaction abordée dans ce chapitre. Elles sont particulièrement importantes pour un degré de raréfaction élevé puisque les collisions gaz-surface sont alors majoritaires par rapport aux collisions intermoléculaires. Pour la simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés, les modèles les plus utilisés sont ceux de Maxwell et de Cercignani-Lampis et Lord (CLL). Bien que le modèle CLL soit plus complexe et précis à l'échelle particulaire, les résultats discutés dans ce chapitre laissent penser qu'un ajustement approprié de leurs paramètres permet de simuler, avec les deux modèles, des écoulements hypersoniques complexes avec la même qualité.

Dans les chapitres suivants, les modèles discutés ici sont mis en œuvre dans le cadre de la simulation d'écoulements non-réactifs (Chapitre 4) puis réactifs (Chapitres 5 et 6). La comparaison des résultats numériques aux données expérimentales disponibles permettra d'évaluer l'influence des différents modèles sur la topologie de l'écoulement et les grandeurs pariétales mais aussi de déterminer leur capacités à reproduire les données mesurées en vol.



---

**Deuxième partie**

**Simulation d'écoulements  
hypersoniques raréfiés par DSMC**



# Chapitre 4

## Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés non-réactifs

### Sommaire

<b>1</b>	<b>SPARTA : modèles et fonctionnalités</b>	<b>89</b>
<b>2</b>	<b>Etude de convergence relative aux métriques de la DSMC</b>	<b>90</b>
2.1	Analyse bibliographique d'études de convergence en DSMC	91
2.2	Etude d'un cylindre infini	92
<b>3</b>	<b>Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés non-réactifs</b>	<b>98</b>
3.1	Cas d'une plaque plane	98
3.2	Cas d'un sphère-cône de 70 degrés	100
<b>4</b>	<b>Résumé</b>	<b>106</b>

**Introduction :** Depuis le développement de la méthode Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) par Bird, plusieurs laboratoires, universités et entreprises ont développé leurs propres codes DSMC parmi lesquels on peut citer : **DS2V/3V** [102], **DAC** [103], **SMILE** [104], **MONACO** [105], **dsmcFoam** [11], **IEMC** [76], **HAP** [106], **PicLas** [107] et **SPARTA** [58]. Le code de calcul utilisé dans le cadre de cette thèse est le code DSMC **SPARTA**. Dans ce chapitre, les modèles présents dans **SPARTA** et les fonctionnalités du code sont d'abord brièvement décrits. Ensuite, les résultats de deux calculs de Lofthouse sont considérés pour une étude de convergence sur les grandeurs pariétales. Dans le reste du chapitre, deux cas expérimentaux d'écoulements hypersoniques raréfiés non-réactifs sont simulés avec **SPARTA** et comparés aux mesures obtenues dans des souffleries à basse densité et aux résultats d'autres codes DSMC.

### 1 SPARTA : modèles et fonctionnalités

**SPARTA** (Stochastic PARallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer) est un code DSMC développé en *C++* par le laboratoire Sandia. Il est open source<sup>1</sup>, massivement parallèle et capable de simuler des écoulements axi-symétriques, 2D et 3D. Il emploie une méthode de frontière immergée avec maillage cartésien et peut être combiné à une procédure de modification automatique pour ajuster la taille des mailles volumiques du domaine de calcul en fonction de critères spécifiques. A chaque niveau de raffinement, la procédure permet de diviser une maille en quatre (2D) ou huit (3D) mailles filles de taille égale selon un critère qui peut être basé sur la valeur du libre parcours moyen par rapport à la taille de maille ou sur le nombre de particules dans la cellule, par exemple. L'avantage de ce type de procédure est de pouvoir raffiner le maillage en cours de simulation afin de garantir le respect des métriques dans les zones de faible libre parcours moyen (voir section 1 du chapitre 3) ou au contraire de fusionner les mailles dans les zones moins denses. Cette procédure est illustrée dans [58] et dans le chapitre 6. L'équilibrage de charge dynamique permet de conserver une parallélisation optimale à mesure que certaines zones du domaine sont modifiées.

Le code **SPARTA** permet de choisir le modèle de collision parmi les modèles Hard Sphere (HS), Variable Hard Sphere (VHS) ou encore Variable Soft Sphere (VSS). De plus, une base de données des propriétés est disponible entre autres pour les espèces de l'air et de l'atmosphère martienne.

1. Disponible au lien <https://sparta.github.io/>.

**SPARTA** permet la simulation des modes d'énergie de rotation et de vibration pour les espèces polyatomiques. Le mode de rotation est considéré continu tandis que le mode de vibration peut être considéré continu ou discret. Pour la relaxation des modes, le nombre de collisions  $Z_{\text{mode}}$  peut être pris constant ou variable avec respectivement le modèle de Parker pour la rotation et de Millikan-White pour la vibration. Pour les espèces dont le nombre de degrés de liberté du mode de vibration est supérieur à 2 ( $\zeta_{\text{vib}} \in \{4, 6, 8\}$  par exemple), il est possible de définir plusieurs niveaux d'énergie avec pour chacun une température caractéristique, un nombre de collisions pour l'équilibrage et la dégénérescence du niveau. Les transferts d'énergie sont assurés grâce à la méthode Borgnakke-Larsen.

**SPARTA** dispose de plusieurs modèles de chimie. L'implémentation du modèle Total Collision Energy (TCE) est équivalente à celle de Bird dans les codes **DS2V/3V**. Ce modèle permet de simuler des réactions de dissociation, échange et recombinaison. La validation du modèle pour les réactions de dissociations et d'échanges directs a été réalisée par Reji [108]. Le modèle Quantum Kinetic (Q-K) a d'abord été implémenté dans sa forme originale [87], puis validé avant d'être modifié par Gallis [109, 88]. Cette version ne permet pas la simulation des réactions de recombinaison mais le code dispose d'un modèle hybride permettant de combiner les modèles TCE et Q-K en spécifiant pour chaque réaction le modèle à utiliser.

Les écoulements ionisés peuvent également être modélisés avec **SPARTA** grâce à l'approximation de diffusion ambipolaire et le modèle TCE permet de simuler les réactions d'ionisation. Le modèle électronique n'est pas implémenté. Comme indiqué dans le chapitre 1, ces aspects sortent du cadre de cette thèse et ne sont donc pas décrits ici.

En complément du modèle standard de Maxwell, les dernières versions de **SPARTA** incorporent une grande variété de modèles d'interactions gaz-surface. Pour les applications aérospatiales, on notera par exemple l'implémentation du modèle Cercignani, Lampis et Lord (CLL) avec un coefficient d'accommodation pour les énergies cinétiques normale et tangentielle ainsi que pour les deux modes d'énergie interne. Pour les interactions gaz-surface chimiques, il est également possible de définir des réactions de surface en spécifiant les réactions possibles et les paramètres correspondants (probabilité de réaction, de création ou de suppression d'espèces à la paroi). Un travail récent réalisé par Swaminathan-Gopalan *et al.* [110] présente une stratégie pour la modélisation des réactions de catalycité et décrit une procédure d'implémentation pour le code **SPARTA**. Toutefois, ce développement n'est pas encore inclus dans la version de **SPARTA** actuellement disponible.

Une présentation complète du code est disponible dans l'article de référence [58]. Cet article décrit notamment les dernières fonctionnalités du code comme la représentation par surface implicite pour la description de structures complexes à l'échelle microscopique. L'objectif de cette représentation est de permettre la modélisation de matériaux poreux à partir de données expérimentales type images et de simuler les phénomènes d'ablation par la méthode de *corner-point values*. Un autre aspect du code mis en avant dans cet article est sa grande modularité qui lui confère l'avantage d'être facilement modifiable par un utilisateur pour l'ajout de nouveaux modèles physiques de relaxation ou d'interactions gaz-surface par exemple. Les possibilités d'accélération du code avec la librairie **Kokkos** ainsi que différents benchmark de performance sont également présentés dans cet article et sur le site web de **SPARTA**. Dans la dernière partie de l'article, plusieurs cas de validation sont présentés et notamment l'étude d'interactions choc-choc pour un bi-cône  $25^\circ$ - $55^\circ$  avec comparaison à des mesures expérimentales du flux de chaleur.

## 2 Etude de convergence relative aux métriques de la DSMC

Compte tenu des métriques introduites dans la section 1 du chapitre 3, on s'intéresse ici aux critères de convergence des simulations DSMC pour des écoulements hypersoniques raréfiés. A ce titre, la section commence par un bref état de l'art des études de convergence identifiées dans la littérature puis notre étude de convergence réalisée avec le code **SPARTA** est présentée.

## 2.1 Analyse bibliographique d'études de convergence en DSMC

L'estimation de l'erreur pour un calcul DSMC est un problème particulièrement complexe pour plusieurs raisons. Tout d'abord, comme pour toute méthode numérique, une partie de l'erreur est due à la précision machine et une autre est due aux erreurs dites de décomposition liées à la discrétisation en espace et en temps. Pour la DSMC, cette erreur comprend aussi l'erreur de discrétisation due au nombre de particules par cellule. Contrairement à une méthode CFD, la DSMC possède également une part d'erreur résultant de sa nature stochastique et plus particulièrement aux fluctuations aléatoires et à l'incertitude statistique. Cette erreur provient de la procédure d'échantillonnage des propriétés qui peut démarrer trop tôt (mauvaise détection de l'état stationnaire) et être conduite sur une durée trop courte (arrêt d'échantillonnage prématuré) [111]. Pour les écoulements hypersoniques raréfiés, il existe plusieurs techniques facilitant la détection de l'état stationnaire. C'est pourquoi, dans le cadre de cette étude de convergence, on se concentre plus particulièrement sur l'erreur de décomposition et à son évaluation par comparaison à une solution de référence.

Aujourd'hui encore, il n'y a pas de réel consensus concernant les critères numériques propres à la finesse du maillage, au pas de temps ou au nombre de particules par cellule pour garantir le caractère convergé d'un calcul. Cela s'explique principalement par le fait que selon les conditions de raréfaction et les grandeurs d'intérêt, ces critères ne sont pas les mêmes. Pour illustrer cet aspect, on peut considérer deux études de convergence sur les métriques de la méthode DSMC. La première a été réalisée par Banyai *et al.* dans le cadre de la simulation des coefficients aérodynamiques de l'Intermediate eXperimental Vehicle (IXV) en conditions raréfiées [8]. Leurs travaux commencent par une étude de convergence préliminaire sur le coefficient de force axiale  $C_A$  de la capsule Apollo dont les résultats sont représentés sur la Figure 4.1. Le coefficient  $C_A$  est calculé en trois points de vol avec différents nombres de particules par cellule et pour différents niveaux de raffinement.

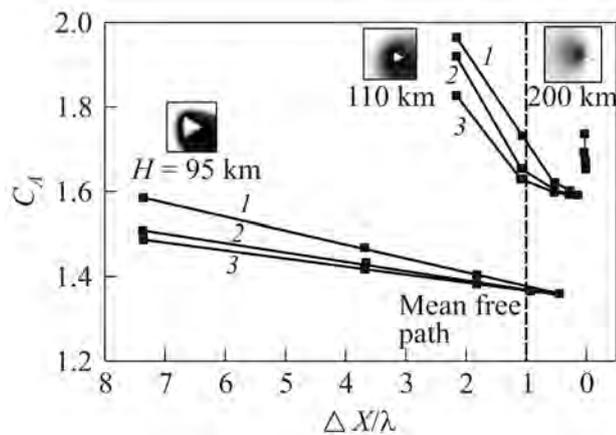


FIGURE 4.1 – Etude de sensibilité du coefficient de force axiale  $C_A$  au raffinement du maillage et au nombre de particules par cellule ( $1 \equiv 5$ ,  $2 \equiv 10$ ,  $3 \equiv 15$ ) à trois altitudes (extrait de [8]).

Les résultats de cette étude montrent que pour le coefficient considéré, la convergence dépend principalement du niveau de raffinement en espace et que le nombre de particules par cellule joue un rôle important surtout pour les maillages grossiers. Une autre conclusion est que la pente de convergence varie en fonction du niveau de raréfaction.

La seconde étude de convergence en maillage a été publiée par Ren *et al.* [9]. Cette fois, plusieurs critères sur la taille des mailles sont proposés pour déterminer un maillage assurant la convergence en espace. Ici, ce ne sont pas tant les critères qui nous intéressent puisqu'ils se rapportent à un maillage *body-fitted* et non pas cartésien avec frontières immergées comme pour **SPARTA**. C'est plutôt la comparaison des distributions du coefficient de pression  $C_p$  et du flux de chaleur  $C_h$  obtenus par simulation d'un écoulement hypersonique raréfié d'argon autour d'un cylindre infini ( $Kn \simeq 0.01$ ).

La Figure 4.2 montre que, contrairement à la pression, le flux de chaleur est fortement dépendant

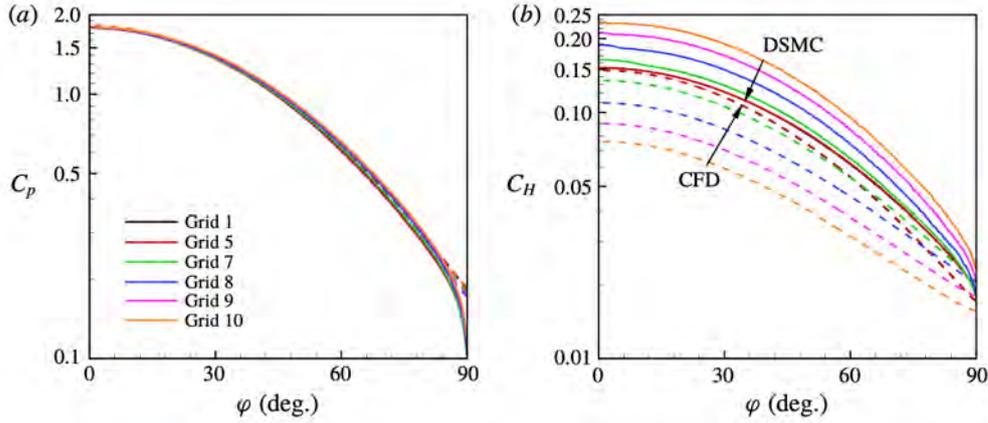


FIGURE 4.2 – Etude de sensibilité des distributions des coefficients de pression  $C_p$  (a) et de flux de chaleur  $C_h$  (b) en fonction du raffinement du maillage, pour un solveur DSMC et un solveur CFD (extrait de [9]).

du niveau de raffinement. Ce comportement s’explique par le fait que, lorsque le maillage est trop grossier, les particules plus éloignées de la paroi ont une probabilité plus grande de l’atteindre avec une quantité d’énergie plus importante, ce qui conduit à une surestimation du flux de chaleur. On notera par ailleurs que le comportement est inverse pour le calcul CFD qui sous-estime le flux de chaleur lorsque le maillage n’est pas suffisamment fin. Dans ce cas, un tel comportement s’explique par la diminution du gradient de température lorsque le maillage est trop grossier.

Malgré les éléments présentés ici, l’étude de convergence DSMC la plus populaire est celle de Sun *et al.* [73]. Cette étude, à la différence de celles discutées précédemment, porte sur la simulation d’un écoulement de Poiseuille 2D et 3D en régimes de glissement et de transition. La particularité de cette étude est que, pour un tel écoulement, le profil de vitesse dans l’écoulement est connu. Par contre, le type d’écoulement, bien que raréfié, ne présente pas de gradients de densité comparables à ceux d’un écoulement hypersonique autour d’un objet. Par conséquent, les valeurs préconisées par les auteurs :  $N_{p/c} \geq 5$ ,  $\Delta x \leq \lambda/3$  dans les zones de fort gradient et  $\Delta x \leq \lambda/2$  dans les autres régions, ne sont pas directement généralisables aux écoulements étudiés dans le cadre de cette thèse. Dans l’étude de convergence qui suit, on se propose donc de mettre à l’épreuve ces conclusions en considérant les grandeurs pariétales d’un cylindre infini soumis à un écoulement hypersonique d’argon.

## 2.2 Etude d’un cylindre infini

Les cas tests de Lofthouse [36] font partie des cas d’étude les plus connus du domaine de la DSMC. Ici, on s’intéresse à la reproduction de deux écoulements hypersoniques d’argon autour d’un cylindre dans les conditions indiquées dans le Tableau 4.1.

Cas	Gaz	$U_\infty$ (m/s)	$T_\infty$ (K)	$M_\infty$	$n_\infty$ ( $\cdot/m^3$ )	$Kn$	$T_w$ (K)
1	Ar	2624	200	10	$1.699 \times 10^{19}$	0.23	500
2	Ar	6585	200	25	$2.124 \times 10^{21}$	0.0018	1500

Le nombre de Knudsen est calculé à partir de  $\lambda_{\infty,Ar}^{VHS}$  et  $L_{ref} = d$ .

TABLEAU 4.1 – Conditions aux limites des deux cas considérés [36].

Ces deux cas sont simulés avec le code **SPARTA**. Le modèle VHS de Bird est utilisé avec les paramètres  $d_{ref} = 3.595 \times 10^{-10}$  m,  $T_{ref} = 1000$  K et  $\omega = 0.734$ . La paroi est supposée totalement diffuse avec une température constante donnée dans le Tableau 4.1.

La géométrie considérée est un cylindre infini de diamètre  $d = 30.48$  cm. Le nombre d'éléments surfaciques est ajusté de sorte à minimiser le bruit statistique, c'est-à-dire en vérifiant que la taille des mailles volumiques soit du même ordre ou plus faible que celle des mailles surfaciques. Pour chaque jeu de conditions, huit simulations sont réalisées avec des paramètres numériques spécifiques. Dans l'ensemble des cas, l'état stationnaire est contrôlé à partir des variations du nombre total de particules dans le domaine. Lorsque ce nombre atteint un plateau, on considère que l'état stationnaire est atteint et que l'échantillonnage peut être effectué [112]. La sensibilité au maillage (run 1 à 3), au pas de temps (run 4 et 5) et au nombre de particules par cellule (run 6 et 7) est évaluée et la convergence est observée sur les grandeurs pariétales suivantes :

$$\begin{aligned} C_p &= \frac{p - p_\infty}{\frac{1}{2}\rho_\infty U_\infty^2}, \\ C_h &= \frac{q}{\frac{1}{2}\rho_\infty U_\infty^3}, \\ C_f &= \frac{\tau}{\frac{1}{2}\rho_\infty U_\infty^2}. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Pour la première série de simulations associée au cas 1 ( $Kn = 0.23$ ), les paramètres numériques des différentes simulations sont renseignés dans le Tableau 4.2. Les paramètres du raffinement adaptatif  $n$  et  $s$  correspondent respectivement au niveau maximal de raffinement et au seuil de déclenchement de la procédure. Ainsi, pour un nombre de niveaux  $n$  une maille de taille  $\Delta x$  peut être subdivisée jusqu'à une taille  $\Delta x/2^{n-1}$ . Le seuil  $s$  indique, quant à lui, en-dessous de quel ratio local  $\lambda/\Delta x$  la procédure de raffinement se déclenche. La solution de référence correspond au run 0.

run	$\lambda_\infty/\Delta x$	<sup>a</sup> Raffinement ( $n, s$ )	<sup>b</sup> $N_{p/c}$	$\tau_{\text{coll}}/\Delta t$	Effet
0	5	(5, 5)	80	5	-
1	3	(5, 3)	80	5	maillage
2	1	(5, 1)	80	5	maillage
3	0.5	(5, 0.5)	80	5	maillage
4	5	(5, 5)	80	1	pas de temps
5	5	(5, 5)	80	0.5	pas de temps
6	5	(5, 5)	20	5	particules par cellule
7	5	(5, 5)	5	5	particules par cellule

<sup>a</sup>Le raffinement adaptatif est paramétré par un niveau  $n$  et un seuil  $s$ .

<sup>b</sup>Le nombre de particules par cellule est au moins égal à  $N_{p/c}$ .

TABLEAU 4.2 – Paramètres numériques des différentes simulations pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ).

Les résultats de l'étude de sensibilité au maillage sont représentées sur la Figure 4.3. La différence majeure entre les diverses solutions et celle de référence est observée avec le maillage le plus grossier ( $\Delta x = 2\lambda$ , run 3) et pour les grandeurs  $C_h$  et  $C_f$  seulement. Pour le coefficient de pression, les écarts sont très faibles.

Les résultats de l'étude de sensibilité au pas de temps sont représentés sur la Figure 4.4. Cette fois encore, on constate que pour le frottement et le flux de chaleur, le cas  $\Delta t = 2\tau_{\text{coll}}$  (run 5) est le seul à produire un niveau de sollicitation très légèrement supérieur à la solution de référence.

L'étude de sensibilité au nombre de particules par cellule est représenté en Figure 4.5. Cette fois, le paramètre numérique influence majoritairement l'amplitude du bruit statistique. La précision de la solution est légèrement altérée mais l'allure moyenne reste centrée sur la solution de référence.

Pour les conditions du cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ), les paramètres numériques de l'étude sont donnés dans le Tableau 4.3. Cette fois, le niveau de raréfaction est celui d'un écoulement proche du régime continu. Par conséquent, les temps de calcul (heures par CPU) deviennent importants et sont donc discutés dans l'analyse. Du fait du bruit statistique élevé pour les résultats de Lofthouse, la solution de référence correspond au run 0.

Pour l'étude de sensibilité au maillage dont les résultats sont donnés en Figure 4.6, cette fois encore, seul le maillage grossier  $\Delta x = 2\lambda$  (run 3) se distingue nettement de la solution de référence pour le frottement et le flux de chaleur. Pour le niveau de raffinement  $\Delta x = \lambda$  (run 2), l'écart relatif de flux de chaleur avec la solution la plus convergée est de 2% au point d'arrêt. De plus, les temps CPU valent respectivement 3681, 16 600, 1533 et 284 heures pour les run 0, 1, 2 et 3. L'augmentation de la charge de calcul est liée à l'augmentation du nombre de particules total nécessaire pour respecter le critère en  $N_{p/c}$  lorsque le maillage est raffiné.

run	$\lambda_\infty/\Delta x$	<sup>a</sup> Raffinement ( $n, s$ )	<sup>b</sup> $N_{p/c}$	$\tau_{\text{coll}}/\Delta t$	Effet
0	5	(5, 5)	15	1	-
1	3	(5, 3)	15	1	maillage
2	1	(5, 1)	15	1	maillage
3	0.5	(5, 0.5)	15	1	maillage
4	5	(5, 1.5)	15	2	pas de temps
5	5	(5, 1.5)	15	0.5	pas de temps
6	5	(5, 1.5)	8	1	particules par cellule
7	5	(5, 1.5)	4	1	particules par cellule

<sup>a</sup>Le raffinement adaptatif est paramétré par un niveau  $n$  et un seuil  $s$ .

<sup>b</sup>Le nombre de particules par cellule est au moins égal à  $N_{p/c}$ .

TABLEAU 4.3 – Paramètres numériques des différentes simulations pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ).

Les résultats de l'étude de sensibilité au pas de temps sont représentés sur la Figure 4.7. On constate cette fois encore une différence relative de l'ordre de 2% seulement pour le flux de chaleur au point d'arrêt obtenu avec la condition  $\Delta t = 2\tau_{\text{coll}}$  (run 5). Par rapport au run 0, le temps CPU du run 4 passe de 3681 à 5858 heures. L'augmentation du temps de calcul provient du fait qu'en diminuant le pas de temps, l'état stationnaire est atteint moins rapidement ce qui augmente grandement le coût de calcul.

Les résultats de l'étude de sensibilité au nombre de particules par cellule sont présentés sur la Figure 4.8. La différence la plus significative est observée pour le cas  $N_{p/c} = 4$  (run 7) avec un écart relatif de l'ordre de 5% pour le flux de chaleur au point d'arrêt tandis qu'avec  $N_{p/c} = 8$  (run 6), un niveau de précision équivalent au cas  $N_{p/c} = 15$  est obtenu. Pour les run 6 et 7, les temps CPU valent respectivement 2414 et 1726 heures. Là aussi, le coût de calcul varie en fonction du nombre de particules total et minimiser  $N_{p/c}$  permet de réduire considérablement le temps de calcul.

Cette étude de convergence nous a permis de tirer les conclusions suivantes. Tout d'abord, dans le cas des écoulements hypersoniques raréfiés autour d'objets, le maintien d'un nombre de particules par cellule homogène dans tout le domaine est très difficile à garantir. De même, pour les solveurs utilisant un maillage cartésien à frontières immergées, en conditions proches continu, le critère de raffinement de maillage basé sur le libre parcours moyen n'est généralement pas strictement vérifié notamment dans les dernières mailles en proche paroi. De plus, pour ce type de raffinement adaptatif, on observe que le nombre  $N_{p/c}$  chute d'environ un ordre de grandeur à chaque niveau de raffinement. Cela signifie donc qu'en pratique, les critères numériques ne sont pas scrupuleusement respectés et en particulier dans les mailles proches de la paroi, au niveau de la zone d'arrêt. Mais cela n'empêche pas d'obtenir une solution convergée.

Concernant les critères de convergence, ces résultats confirment bien qu'ils dépendent du niveau de raréfaction et de la variable étudiée. Les valeurs préconisées par Sun *et al.* [73] ne sont donc pas absolues et un niveau de précision satisfaisant peut être obtenu à moindre coût. C'est pourquoi, lorsqu'une solution de référence n'est pas disponible pour assurer la précision des résultats, une étude DSMC commence le plus souvent par une étude de convergence propre aux grandeurs et aux conditions considérées.

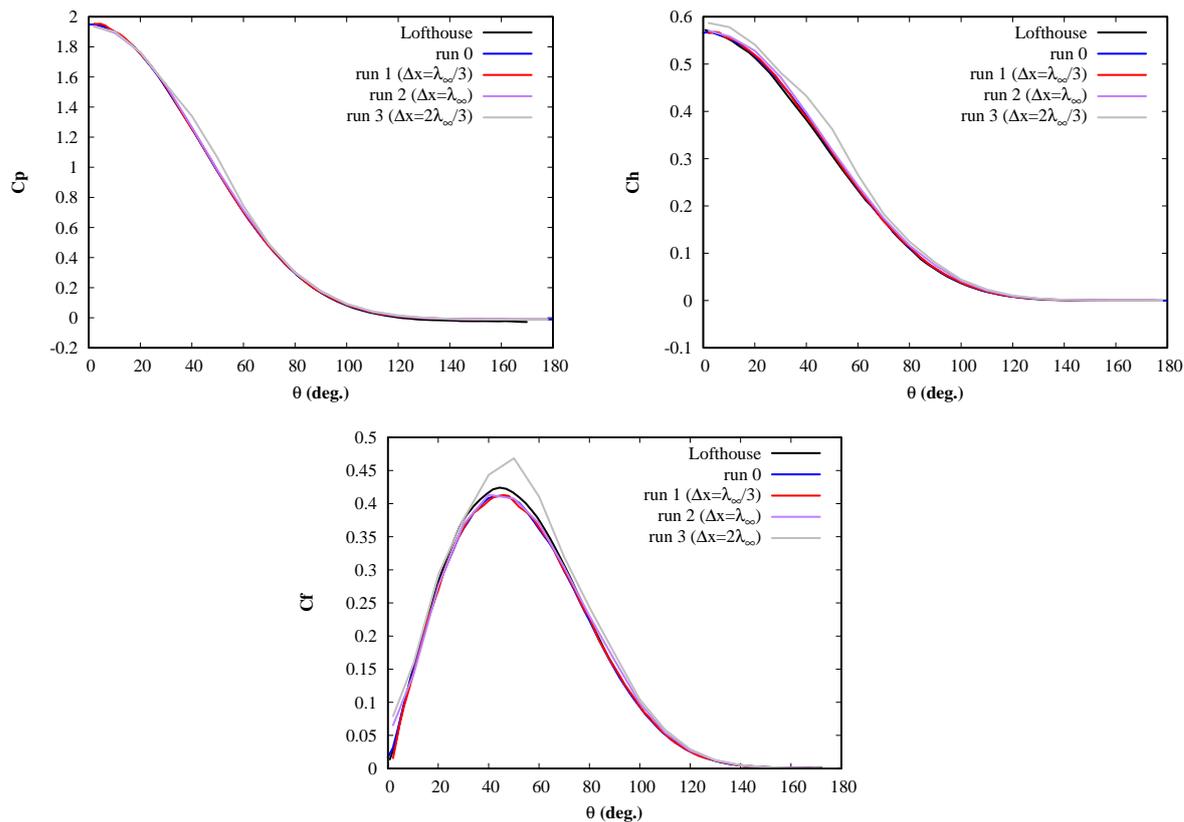


FIGURE 4.3 – Sensibilité des coefficients  $C_p$  (a),  $C_h$  (b),  $C_f$  (c) au raffinement du maillage pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ).

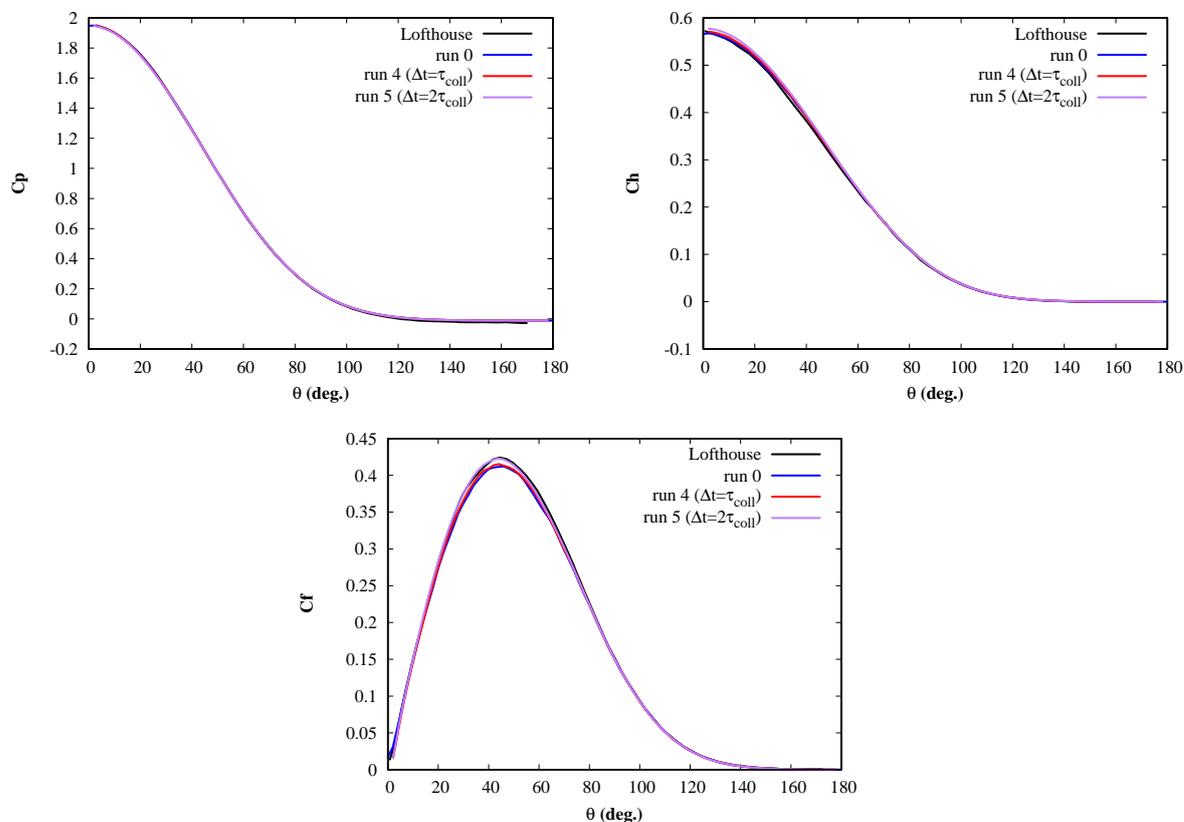


FIGURE 4.4 – Sensibilité des coefficients  $C_p$  (a),  $C_h$  (b),  $C_f$  (c) au pas de temps pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ).

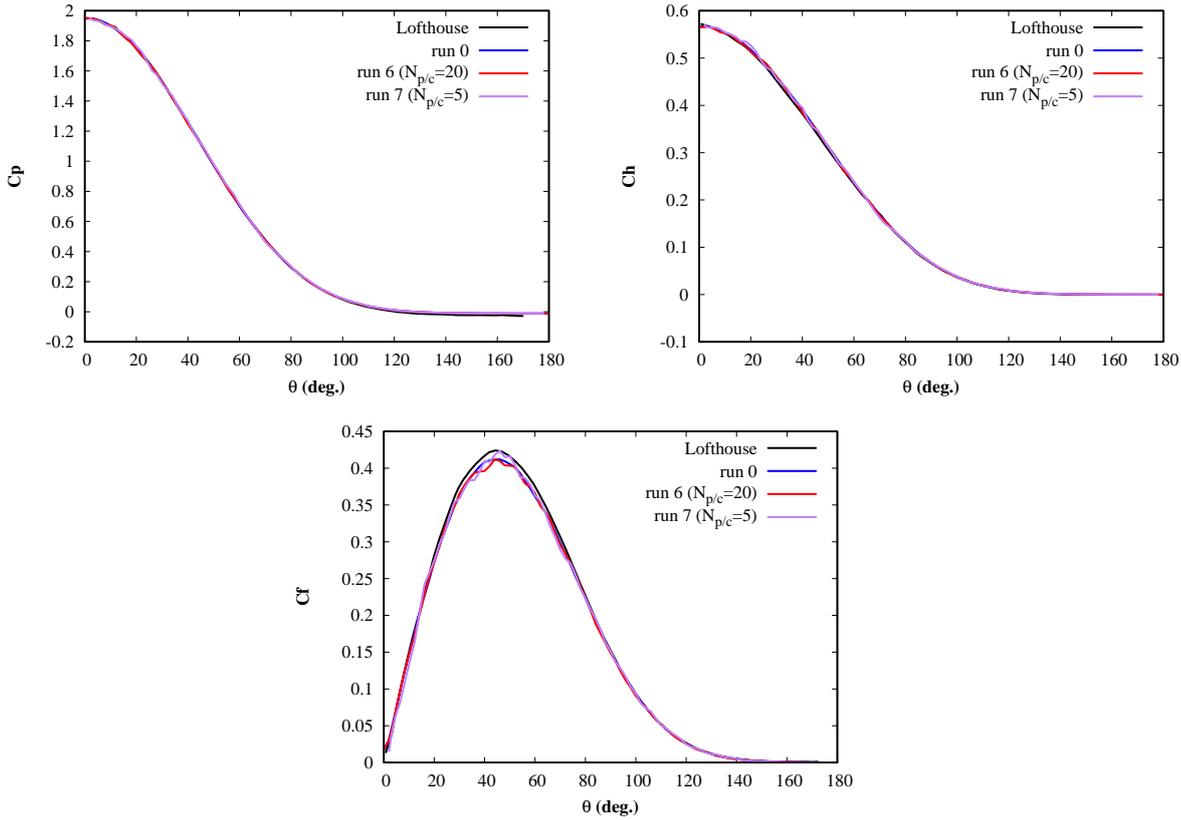


FIGURE 4.5 – Sensibilité des coefficients  $C_p$  (a),  $C_h$  (b),  $C_f$  (c) au nombre minimal de particules par cellule pour le cas 1 ( $Kn = 0.23$ ).

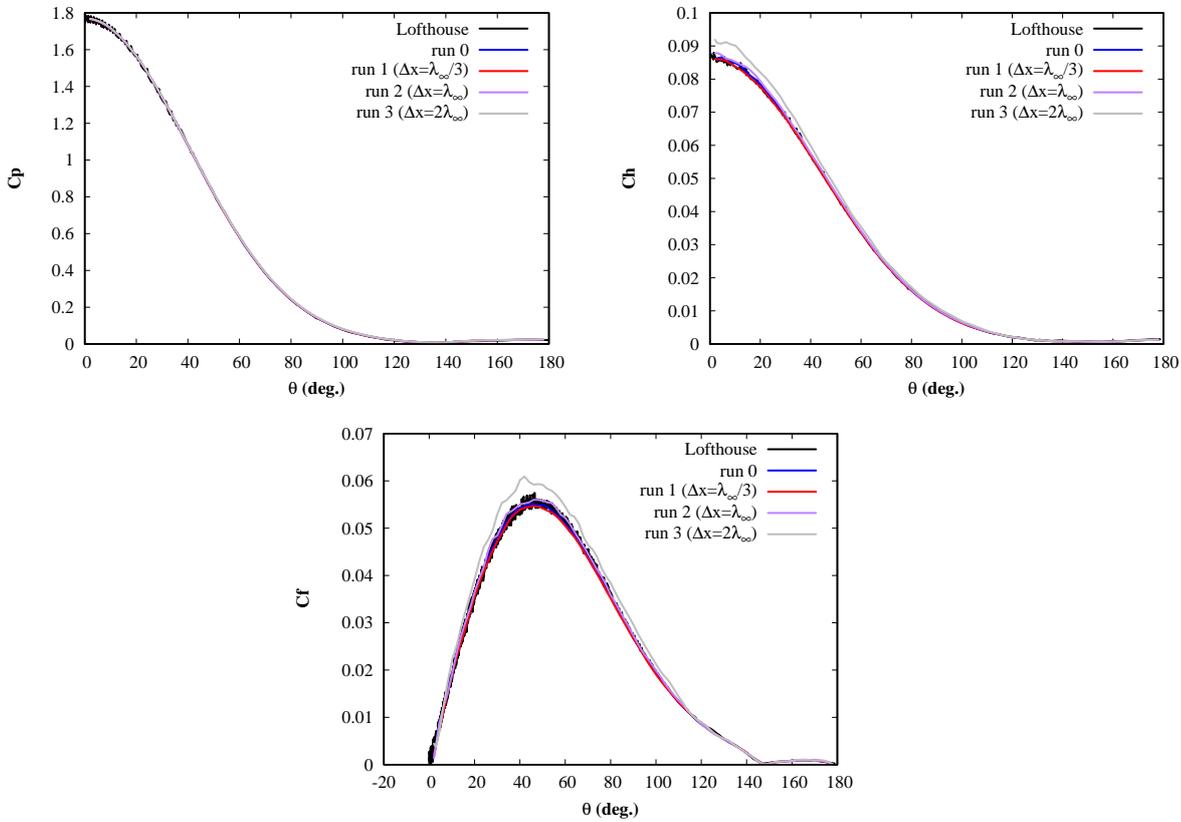


FIGURE 4.6 – Sensibilité des coefficients  $C_p$  (a),  $C_h$  (b),  $C_f$  (c) au raffinement du maillage pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ).

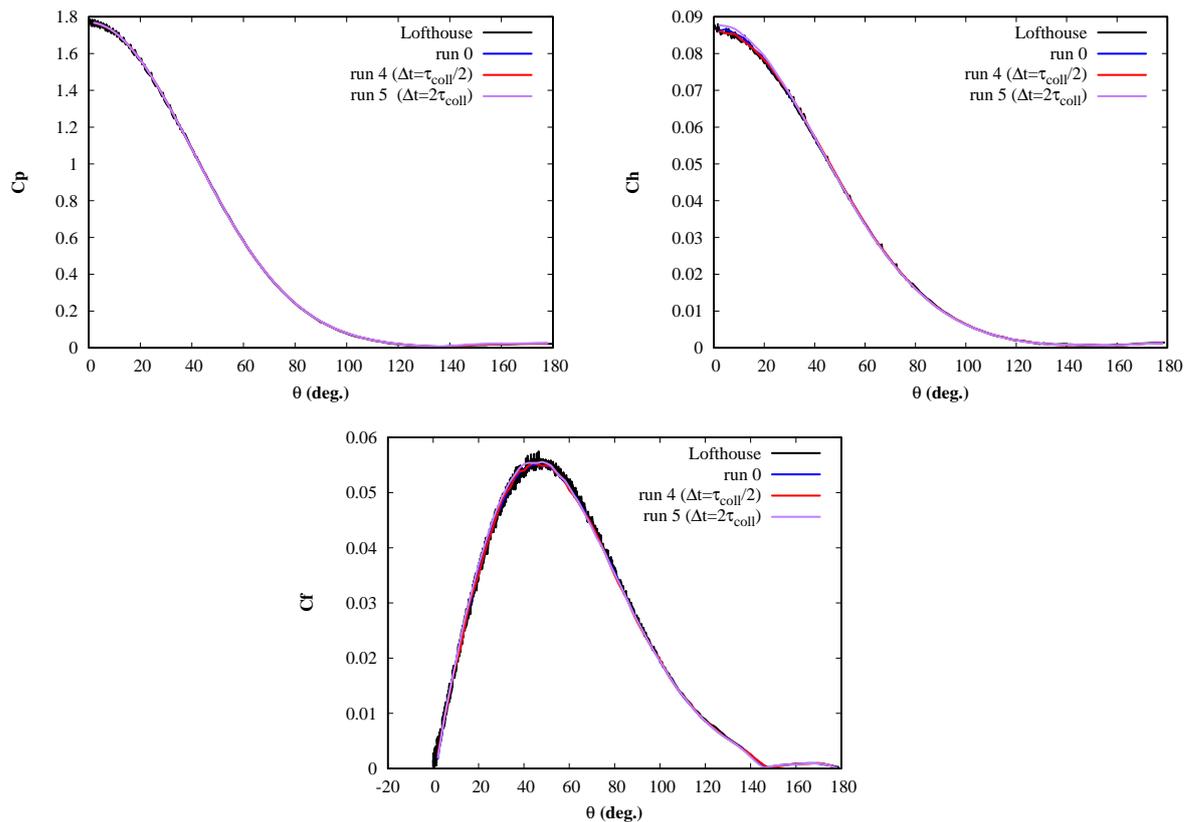


FIGURE 4.7 – Sensibilité des coefficients  $C_p$  (a),  $C_h$  (b),  $C_f$  (c) au pas de temps pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ).

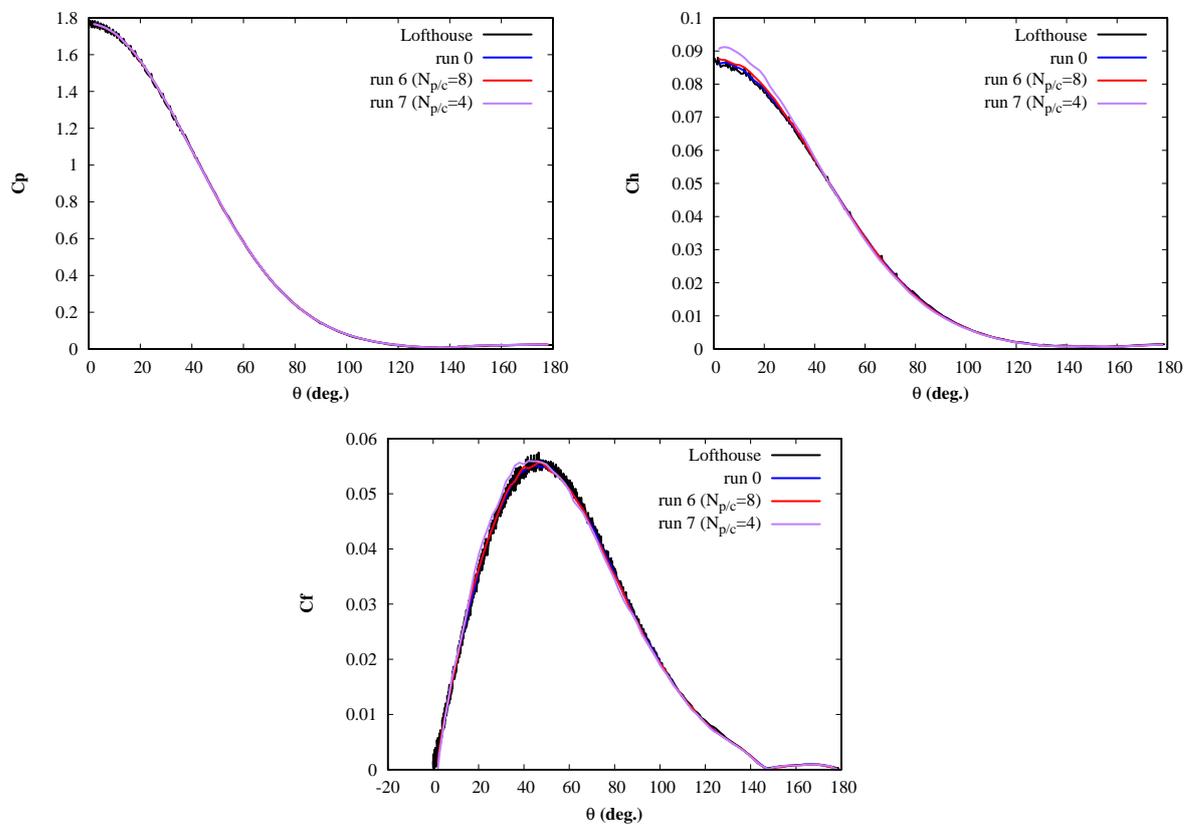


FIGURE 4.8 – Sensibilité des coefficients  $C_p$  (a),  $C_h$  (b),  $C_f$  (c) au nombre minimal de particules par cellule pour le cas 2 ( $Kn = 0.0018$ ).

### 3 Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés non-réactifs

En raison des difficultés à recréer des écoulements hypersoniques raréfiés hyper-enthalpiques (*i.e.* réactifs) dans des installations expérimentales, une grande partie de la validation de la méthode DSMC se fait en conditions froides, c'est-à-dire sans activation du mode de vibration ni des processus chimiques. Parmi les expériences réalisées en soufflerie basse densité, on peut citer les études d'interaction choc-choc sur des systèmes bi-coniques ou des cylindre creux [113, 114]. Ici, on s'intéresse à deux expériences réalisées avec une plaque plane et un sphère-cône de  $70^\circ$ .

#### 3.1 Cas d'une plaque plane

##### 3.1.1 Présentation du cas test

L'étude d'écoulements hypersoniques raréfiés autour d'une plaque plane est un cas très documenté dans la littérature aussi bien numériquement qu'expérimentalement. Deux types de plaques planes sont généralement étudiés : la plaque plane avec bord d'attaque incliné [106], [11] et la plaque plane tronquée avec bord droit [115], [11], [105]. On s'intéresse ici à la simulation du cas de la plaque plane avec bord d'attaque dit droit et à la comparaison avec les résultats numériques (obtenus avec **DAC** et **MONACO**) et expérimentaux présentés par Padilla [105].

La plaque considérée a une épaisseur de 5 mm, une longueur de 100 mm et est plongée dans un domaine 2D de dimensions  $[-60; 120] \times [-102.5; 102.5]$  en mm. Elle est soumise à un écoulement d'azote non réactif de vitesse  $U_\infty = 1503$  m/s, de température  $T_\infty = 13.32$  K et de densité numérique  $n_\infty = 3.716 \times 10^{20}$  m $^{-3}$ . Le modèle de collision utilisé est le modèle VHS de paramètres  $d_{\text{ref}} = 4.17 \times 10^{-10}$  m,  $\omega = 0.74$  et  $T_{\text{ref}} = 273$  K. Dans ces conditions, le nombre de Mach vaut  $M_\infty = 20$ , le libre parcours moyen vaut  $\lambda_\infty^{\text{VHS}} = 1.60 \times 10^{-3}$  m et le nombre de Knudsen  $Kn = 0.016$ . Le mélange est constitué intégralement de particules diatomiques  $\text{N}_2$ . Le nombre de degrés de liberté du mode de rotation vaut  $\zeta_{\text{rot}} = 2$  et le nombre de collision  $Z_{\text{rot}}$  est pris constant égal à 5 avec **SPARTA** et **DAC**. Ce nombre est pris variable avec le modèle de Parker de paramètres  $Z_\infty = 18.1$  et  $T_{\text{rot}}^* = 91.5$  K pour le calcul **MONACO**. La paroi est supposée totalement diffuse et sa température est maintenue constante  $T_w = 290$  K.

Le maillage et le pas de temps utilisés sont ceux préconisés par Padilla à savoir un maillage uniforme  $360 \times 410$  et un pas de temps  $\Delta t = 3.102 \times 10^{-7}$  s. Le poids numérique  $\text{fnum} = 4.645 \times 10^{12}$  conduit à un total de 3.2 millions de particules numériques dans le domaine au bout des 16000 itérations. Les propriétés sont moyennées sur les dernières 8000 itérations avec 4000 échantillons espacés de 2. Dans ces conditions, les métriques usuelles  $\lambda/\Delta_{x,y} > 1$ ,  $\min(\tau_{\text{coll}})/\Delta t > 1$  et  $N_p/\text{cell} > 10$  sont vérifiées presque partout dans le domaine. La convergence des propriétés est suffisante pour les objectifs de l'étude et ces conditions numériques sont donc jugées satisfaisantes [105].

##### 3.1.2 Analyse des résultats

Les champs de vitesse et de température de rotation obtenus avec les codes **SPARTA**, **DAC** et **MONACO** sont comparés sur les Figures 4.9a et 4.9b respectivement.

Les contours de norme de vitesse montrent la présence d'une couche limite hypersonique et d'un choc oblique diffus à quelques centimètres en amont du bord d'attaque.

L'analyse des résultats montre une asymétrie des champs de vitesse et de température obtenus avec **MONACO** contrairement au profil attendu et aux résultats de **DAC** et **SPARTA**. Cette anomalie est particulièrement visible sur le contour  $U = 1500$  m/s. Les raisons de cette asymétrie ne sont pas détaillées par l'auteur [105]. Les contours de température sont quant à eux très similaires et les faibles déviations s'expliquent probablement par la différence entre les modèles de relaxation du mode d'énergie de rotation utilisés. Plus généralement, les contours calculés avec **SPARTA** sont en excellent accord avec ceux calculés avec les deux autres codes et tout particulièrement avec **DAC**.

Les comparaisons entre les résultats numériques et les mesures expérimentales des distributions surfaciques de pression, de cisaillement et de flux de chaleur sont présentées respectivement sur les

Figures 4.10a, 4.10b et 4.10c. Elles montrent une bonne correspondance entre les trois codes. Les faibles différences entre **MONACO** et les deux autres codes peuvent être imputées à l'utilisation d'un modèle de relaxation variable pour le mode de rotation. Les faibles oscillations proviennent du bruit statistique qui résulte du choix des paramètres d'échantillonnage.

Pour la pression et le flux de chaleur, les codes sont confrontés aux résultats expérimentaux d'Allegre *et al.* [116]. D'après lui, la position des capteurs de pression est connue avec une précision de  $\pm 1$  mm et les valeurs sont mesurées avec une précision de  $\pm 0.1$  Pa. Pour les mesures du flux de chaleur, l'incertitude est estimée à  $\pm 10\%$ . Avec le modèle de Maxwell et un coefficient d'accommodation  $w = 1$ , les trois codes surestiment la pression et le flux de chaleur. On constate cependant que lorsque le coefficient est pris  $w = 0.8$ , les résultats **SPARTA** s'accordent avec les résultats expérimentaux. Ce constat est aussi vrai lorsque la plaque est mise en incidence avec un angle  $\alpha = 10^\circ$  [116]. La plaque étant en acier, un coefficient d'accommodation de 0.8 est cohérent avec les valeurs données dans la littérature pour un écoulement d'azote sur une plaque d'acier et pour des températures de l'ordre de 300 K [117, 118].

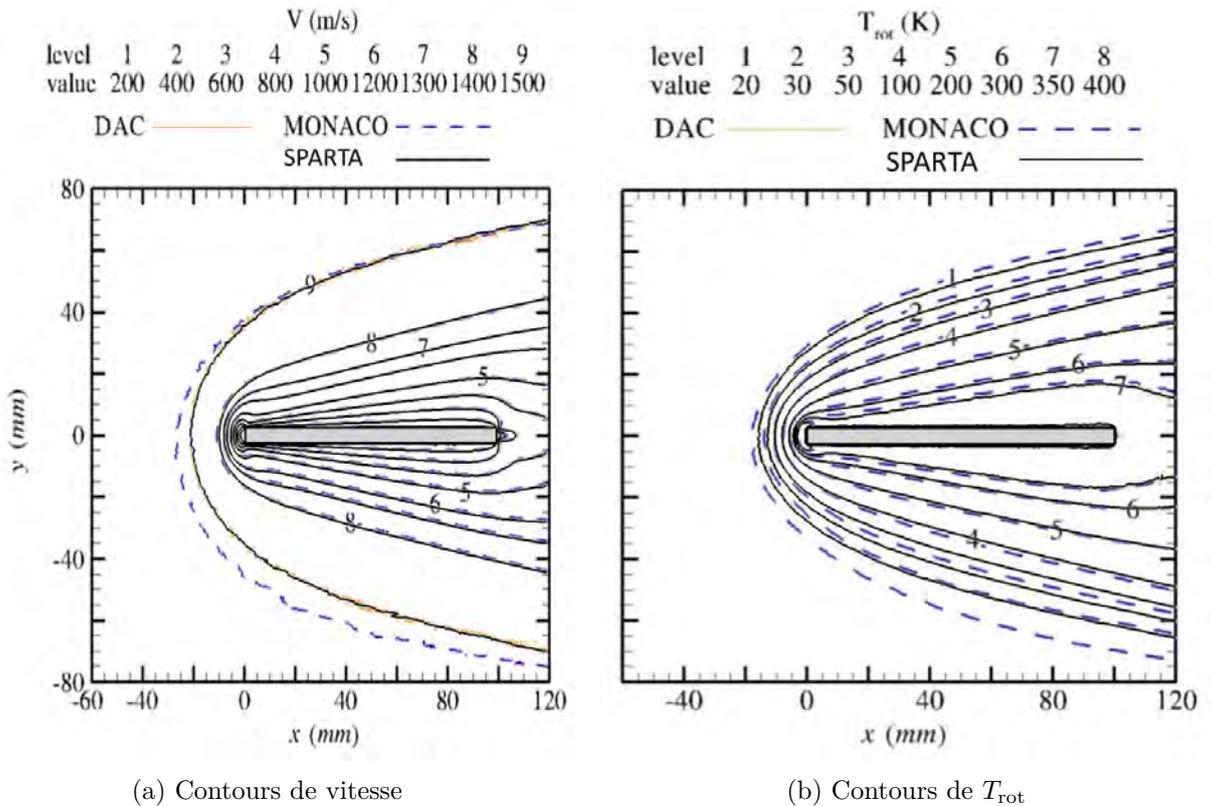


FIGURE 4.9 – Comparaison des contours de vitesse et de température de rotation (**SPARTA** en noir, **MONACO** en bleu et **DAC** en orange).

Bien que l'étude de la plaque plane soit principalement utilisée à des fins de validation fondamentale, on notera que ces expériences ont un champ d'application plus large. En effet, l'étude des modèles d'interactions gaz-surface de Padilla [35, 119] repose sur une expérience similaire réalisée par Cecil and McDaniel [120]. Dans ces travaux, les profils de couche limite et les distributions des grandeurs surfaciques ont été mesurés expérimentalement et comparés à des calculs DSMC réalisés avec les modèles de Maxwell et de Cercignani, Lampis et Lord. Comme évoqué dans la section 6 du chapitre 3, les résultats ont montré que les deux modèles conduisent à des résultats similaires au niveau des profils de couche limite et des grandeurs aérodynamiques pour des coefficients d'accommodation compris entre 50 et 100%. De plus, une accommodation de 90% a fourni le meilleur accord entre les mesures et les résultats DSMC pour le champ de vitesse. Toutefois, comme indiqué par Padilla, une étude approfondie est nécessaire pour conclure quant à la capacité des modèles à

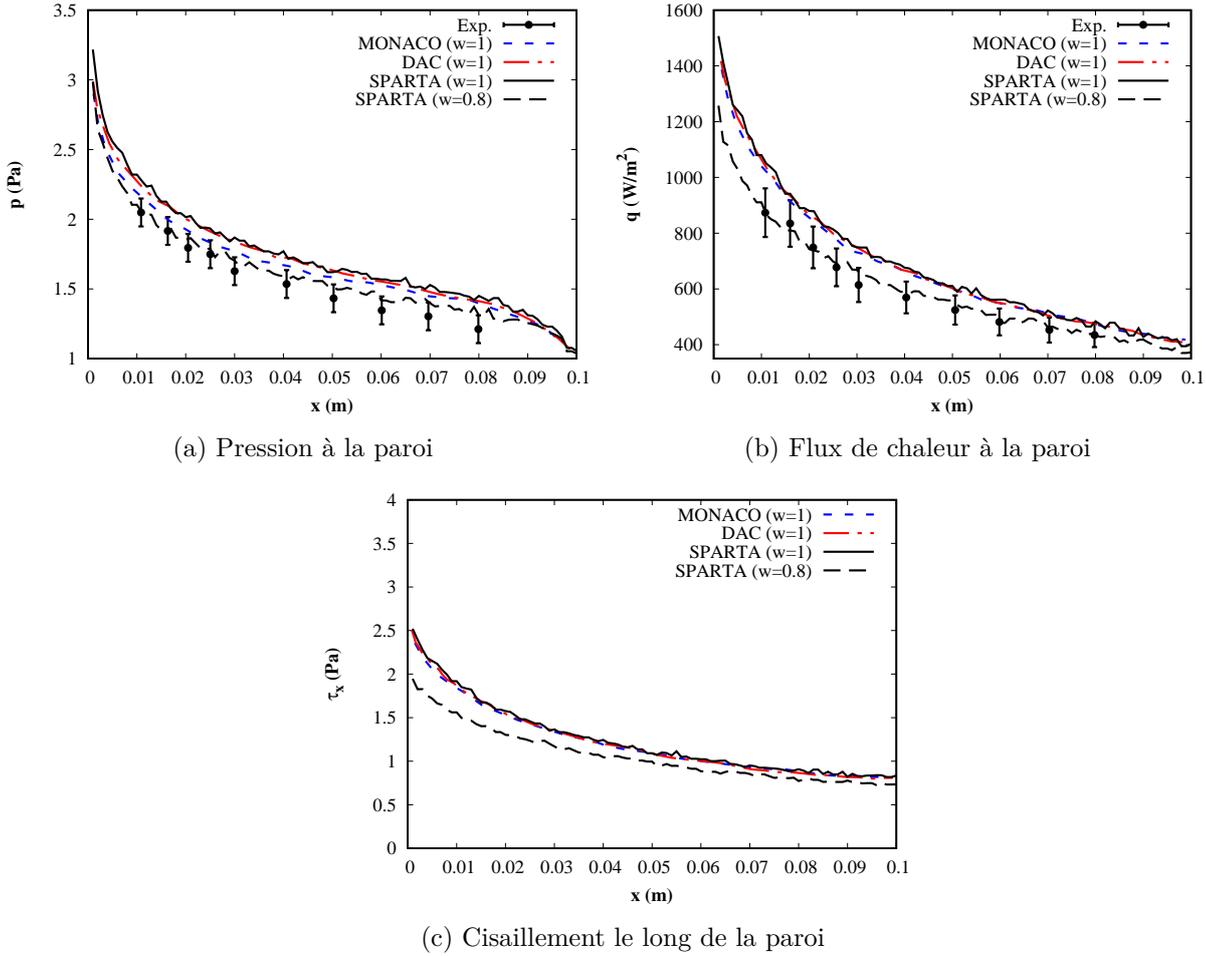


FIGURE 4.10 – Comparaison des propriétés de surfaces obtenues avec les codes **SPARTA**, **DAC** et **MONACO**.

reproduire les mesures de flux de chaleur.

## 3.2 Cas d'un sphère-cône de 70 degrés

### 3.2.1 Présentation du cas

Le groupe de travail AGARD et plus particulièrement Moss et Lengrand [121] ont passé en revue les études expérimentales et numériques menées dans le cadre de la mission Mars Pathfinder dont la géométrie correspond à un sphère-cône de 70°. Leur rapport rassemble les résultats d'expériences réalisées dans cinq installations : la soufflerie SR3 de Meudon, les souffleries V2G-V3G-HEG du DLR-Göttingen et la soufflerie LENS de l'université de Buffalo. Parmi toutes ces expériences, on s'intéresse ici aux expériences d'Allegre *et al.* conduites dans la soufflerie SR3 [122, 10, 123]. Les conditions expérimentales sont données dans le Tableau 4.4. Trois jeux de conditions ont été générés afin de produire différents niveaux de raréfaction autour de la maquette représentée sur la Figure 4.11.

Cas	$T_0$ (K)	$P_0$ (bar)	$M_\infty$	$Re_\infty/\text{cm}$	$\rho_\infty$ (kg/m <sup>3</sup> )	$U_\infty$ (m/s)	$T_\infty$ (K)	$\lambda_\infty$ (mm)	Gas
1	1100	3.5	20.2	284	$1.73 \times 10^{-5}$	1503	13.3	0.671	N <sub>2</sub>
2	1100	10	20	835	$5.19 \times 10^{-5}$	1502	13.6	0.226	N <sub>2</sub>
3	1300	120	20.5	7235	$46.62 \times 10^{-5}$	1634	15.3	0.027	N <sub>2</sub>

TABLEAU 4.4 – Conditions expérimentales pour les essais réalisés dans la soufflerie SR3.

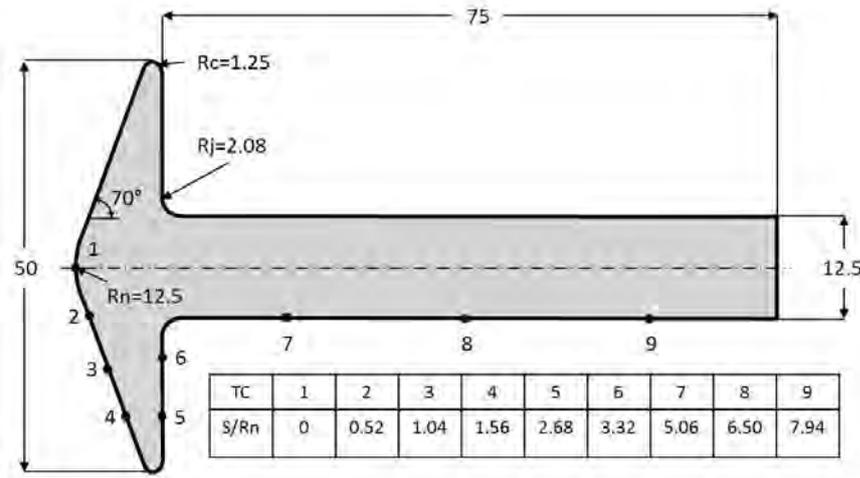


FIGURE 4.11 – Géométrie et instrumentation (Thermocouples) le long de l'abscisse curviligne  $S$  normalisée par le rayon de nez  $R_n$  (adapté de [10]). Dimensions en mm.

De façon analogue aux expériences de la plaque plane discutées précédemment, des mesures de masse volumique sont réalisées avec des faisceaux d'électrons pour une température de paroi maintenue autour de 290 K. Pour les mesures de forces aérodynamiques, une géométrie en aluminium est utilisée avec une température de paroi d'environ 350 K. Les transferts de chaleur sont quant à eux mesurés avec une technique de peau mince sur une géométrie en acier et une température pariétale maintenue à 300 K.

Nos résultats obtenus avec le code **SPARTA** pour les conditions du cas 1 (Tableau 4.11) sont comparés aux résultats expérimentaux et numériques présentés par Palharini [11] et obtenus avec les codes **dsmcFoam**, **DAC** et **MGDS**. En prenant pour longueur de référence le diamètre de la base du cône, le nombre de Knudsen correspondant au cas 1 vaut  $Kn = 0.013$ . Encore une fois, l'écoulement considéré ici n'est pas suffisamment énergétique pour que le mode d'énergie de vibration soit activé. D'autre part, les échanges d'énergie entre les modes de translation et de rotation sont contrôlés par l'algorithme de Borgnakke-Larsen [69]. Le modèle de collision VHS est utilisé avec un nombre de relaxation collisionnel constant  $Z_{rot} = 5$ . Enfin, deux séries de simulations ont été réalisées avec, pour chacune, un angle d'attaque variant entre 0 et 30°.

Pour la première série, les contours de masse volumique et les coefficients de transfert de chaleur sont calculés avec une température de paroi  $T_w = 290$  K. Le cas sans incidence est modélisé à partir d'une simulation 2D axi-symétrique dans un domaine de taille  $[x_{min}; x_{max}] \times [y_{min}; y_{max}] = [-25; 125] \times [0; 90]$  (en mm) avec un maillage cartésien  $750 \times 450$  conformément aux calculs **SPARTA** de Klothakis et Nikolos [124]. Pour les cas avec incidence, un domaine de dimensions  $[x_{min}; x_{max}] \times [y_{min}; y_{max}] \times [z_{min}; z_{max}] = [-20; 80] \times [-80; 80] \times [0; 80]$  (en mm) est utilisé avec une condition limite symétrique dans le plan  $(x, y)$ . Un maillage de fond cartésien uniforme  $250 \times 250 \times 100$  est utilisé et l'algorithme de raffinement adaptatif de **SPARTA** est employé pour assurer une taille de cellule au moins deux fois plus petite que le libre parcours moyen dans le domaine.

Pour la deuxième série de simulations, les forces aérodynamiques sont calculées avec une température de paroi de 350 K. Pour tous les calculs, le même domaine 3D de dimensions  $[x_{min}; x_{max}] \times [y_{min}; y_{max}] \times [z_{min}; z_{max}] = [-20; 125] \times [-80; 80] \times [0; 80]$  (en mm) est utilisé. Le maillage initial est un maillage cartésien  $360 \times 250 \times 100$  couplé avec l'algorithme de raffinement adaptatif. Les forces aérodynamiques sont ensuite calculées à partir des éléments surfaciques allant du centre de la sphère du sphère-cône jusqu'à une distance de 75 mm le long du dard conformément aux conditions expérimentales (Figure 4.11).

Quelle que soit la série de simulations, pour le cas axi-symétrique, le nombre de particules numériques est d'environ 800 millions tandis qu'il est pris équivalent à un milliard pour les simulations avec incidence afin d'assurer un nombre suffisant de particules par maille partout dans le domaine. Pour toutes les simulations, le pas de temps  $\Delta t = 1.3 \times 10^{-7}$  s suggéré par Klothakis et Nikolos

[124] est utilisé.

### 3.2.2 Analyse des résultats

Les contours des champs de masse volumique adimensionnée ( $\rho/\rho_\infty$ ), de température globale  $T_{ov}$  et de nombre de Mach sont représentés respectivement sur les Figures 4.12a, 4.12b et 4.12c. Pour rappel (cf. chapitre 2), la température globale est définie par la relation :

$$T_{ov} = \frac{\zeta_{tr}T_{tr} + \zeta_{rot}T_{rot}}{\zeta_{tr} + \zeta_{rot}}. \quad (4.2)$$

La superposition des contours des codes **SPARTA**, **DAC** et **dsmcFoam** montre un bon accord global entre les trois codes. Une plus faible déviation est observée pour les contours de masse volumique (contour  $\rho/\rho_\infty = 1.01$ ) et de nombre de Mach entre les codes **SPARTA** et **dsmcFoam** par rapport à **DAC**. Cette discordance peut s'expliquer par la différence entre le domaine, le type de maillage et le nombre de particules simulées.

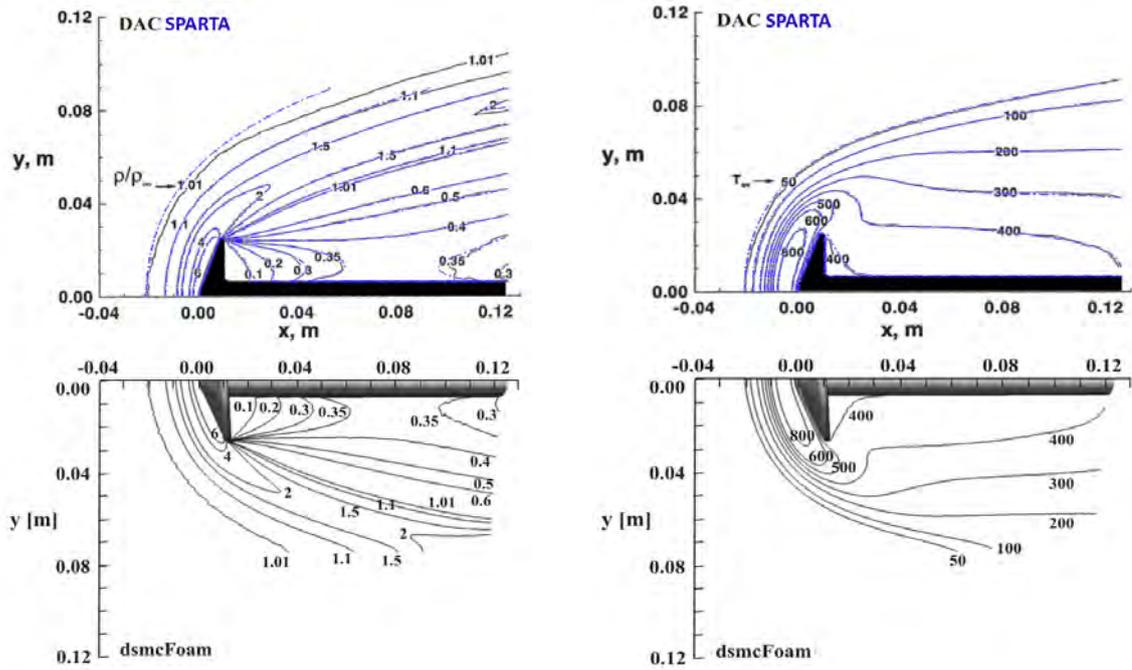
De plus, les contours illustrent les différents phénomènes physiques mis en jeu. Ainsi, on observe la présence d'un choc diffus en amont de la géométrie (Figure 4.12a) et le point d'attache de la ligne sonique au niveau de l'épaule (Figure 4.12c). A l'approche de l'épaule, la diminution de l'épaisseur de la couche limite induit une augmentation du niveau de la température en proche paroi (Figure 4.12b). Le pic de température a lieu un peu avant le point d'attache de la ligne sonique. Par ailleurs, le détachement de la couche limite au niveau de l'épaule (en raison de la rupture de pente) forme une zone de mélange. La couche limite s'épaissit et s'infléchit progressivement vers l'aval. Au niveau du mât se produit le recollement solide (Figure 4.12c) où l'écoulement reprend sa direction initiale tandis que la quantité de mouvement d'une partie de l'écoulement n'est pas suffisante pour passer la recompression. Au point de recollement, le fluide est donc repoussé et forme ainsi une zone de recirculation. La structure d'un tel écoulement est schématisée sur la Figure 4.13.

La comparaison des coefficients aérodynamiques de force axiale ( $C_A$ ), de force normale ( $C_N$ ) et du moment de tangage ( $C_m$ ) calculé au point de référence des moments situé au nez de la capsule sont respectivement représentés sur les Figures 4.14a, 4.14b et 4.14c.

D'après Allegre [123], l'incertitude sur les mesures aérodynamiques est inférieure à  $\pm 3\%$ . Globalement, un excellent accord est visible entre les résultats DSMC et les résultats expérimentaux pour le coefficient de force axiale ( $C_A$ ) avec des valeurs numériques comprises dans l'intervalle d'incertitude. Pour le coefficient de force normale ( $C_N$ ), un bon accord est constaté entre les résultats expérimentaux et numériques avec une différence maximale de 13% pour **SPARTA** et 8% pour **dsmcFoam** atteinte pour  $\alpha = 30^\circ$ . Dans les deux cas, la différence augmente avec l'angle d'attaque ce qui impacte le coefficient du moment de tangage dont les valeurs numériques s'écartent également à mesure que l'angle d'attaque croît.

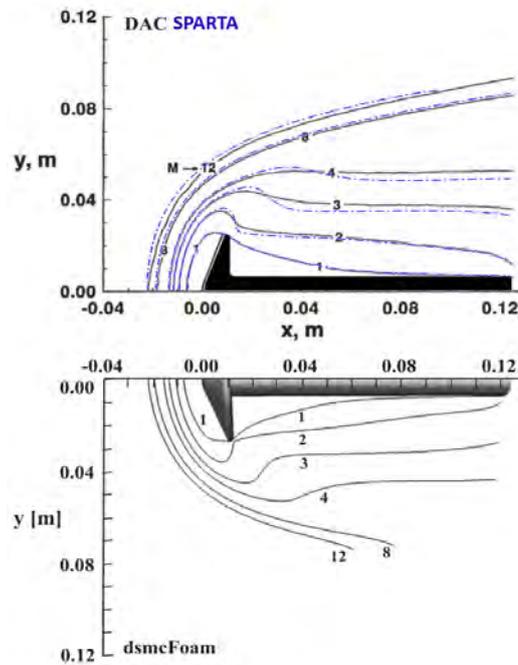
La Figure 4.15 montre la distribution du coefficient de transfert de chaleur ( $C_h$ ) ainsi que du coefficient de pression ( $C_p$ ) pour différents angles d'attaque. Ainsi, les Figures 4.15a, 4.15c, 4.15e et 4.15g illustrent l'évolution du coefficient de pression à mesure que l'incidence augmente. Le déplacement du point d'arrêt entraîne une chute des coefficients de pression et de flux de chaleur au niveau du nez qui s'accroît avec l'augmentation de l'angle  $\alpha$ . Bien que, pour le coefficient de pression, les tendances correspondent à l'aspect attendu, l'absence de résultats expérimentaux ne permet pas de conclure quant à la précision de ces courbes.

Une autre conséquence du déplacement du point d'arrêt avec l'augmentation de l'incidence est visible au niveau du flux de chaleur. En effet, comme illustré sur la Figure 4.13, en se déplaçant, le point d'arrêt se rapproche du point d'attache des lignes soniques près de l'épaule, ce qui entraîne une augmentation du pic de flux de chaleur dans cette région. Au niveau du bord de fuite, l'absence de capteurs ne permet pas de retrouver expérimentalement ce pic de flux de chaleur. Néanmoins, les différences entre les résultats DSMC et les résultats expérimentaux sont assez significatifs pour le capteur le plus proche du bord de fuite avec des différences allant de 6 à 24% selon l'angle d'attaque. Sur la face avant, les résultats DSMC sont en bon accord avec les résultats expérimentaux pour les angles de 0 et  $10^\circ$  puisque la différence est comprise dans l'intervalle



(a) Contours de masse volumique adimensionnée

(b) Contours de température globale



(c) Contours de nombre de Mach

FIGURE 4.12 – Comparaison des contours de masse volumique adimensionnée ( $\rho/\rho_\infty$ ), de température globale et de nombre de Mach obtenus avec les codes **SPARTA**, **DAC** et **dsmcFoam**.

d'incertitude de  $\pm 10\%$  [123]. Toutefois, pour les angles de 20 et 30°, des écarts relatifs de respectivement 20 et 30% sont constatés dans la même région. La raison exacte de ces différences n'est pas connue et pourrait être due aux simulations, aux expériences ou aux deux. D'autre part, en DSMC, assurer un nombre de particules numériques suffisant pour réduire le bruit statistique dans la zone de recirculation derrière le cône (Figure 4.13) nécessite de simuler un grand nombre de particules ce qui peut s'avérer extrêmement coûteux. De la même manière, d'un point de vue expérimental, l'instrumentation risque d'atteindre ses limites de sensibilité dans de telles conditions.

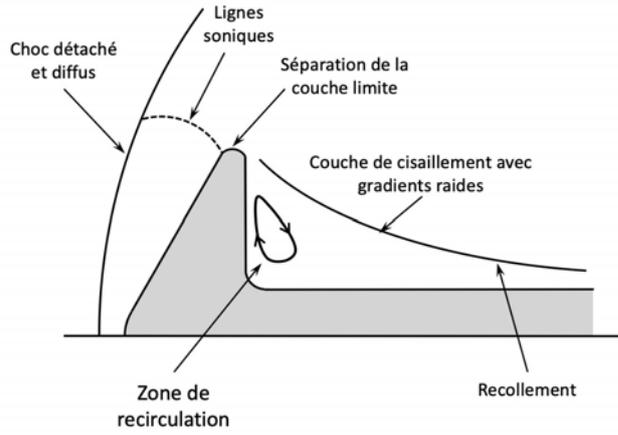


FIGURE 4.13 – Illustration de la structure de l'écoulement autour du sphère-cône (adapté de [11]).

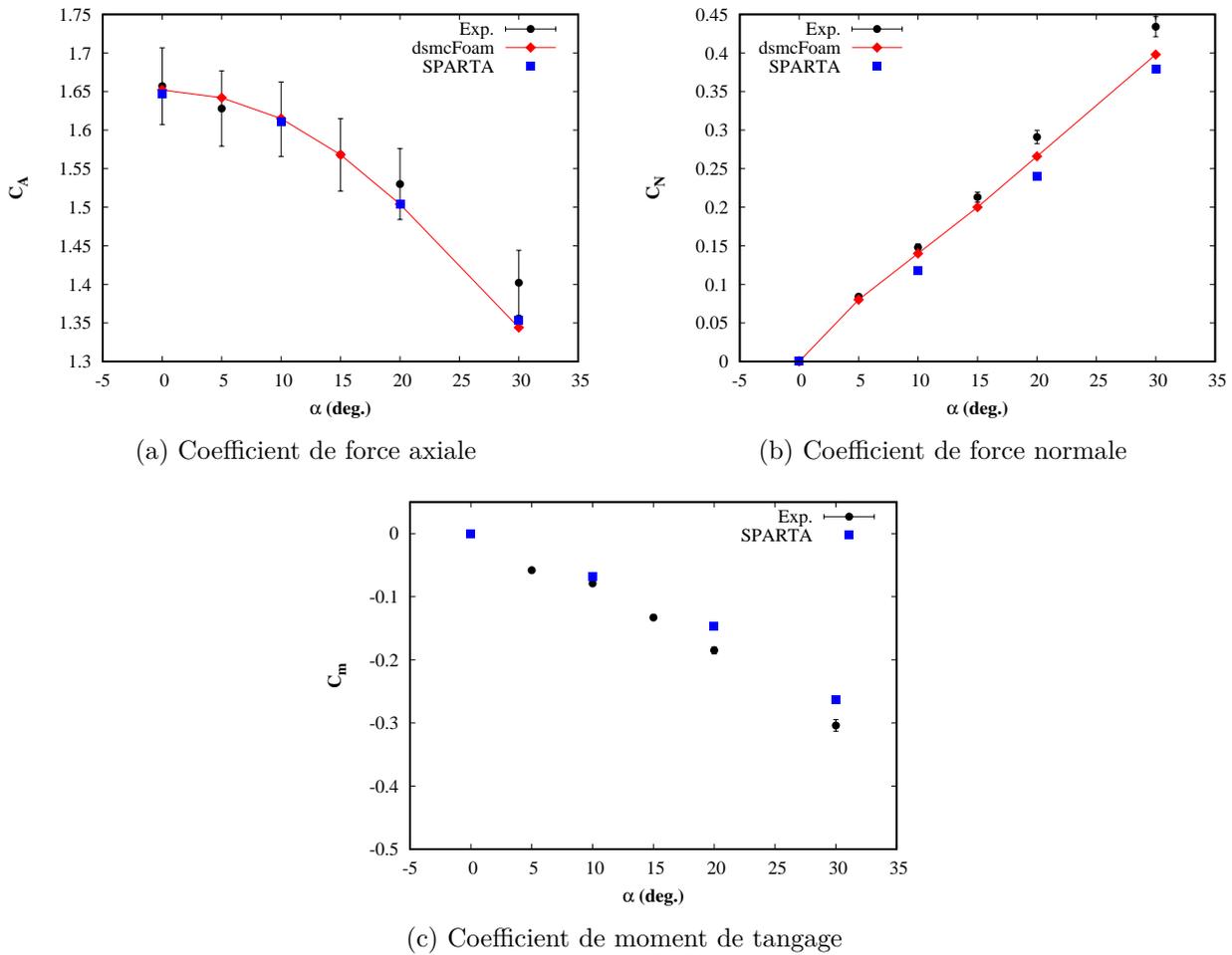
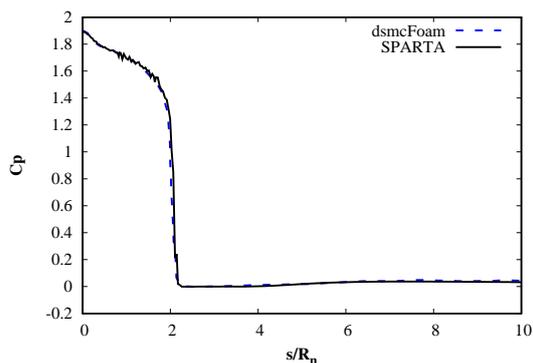
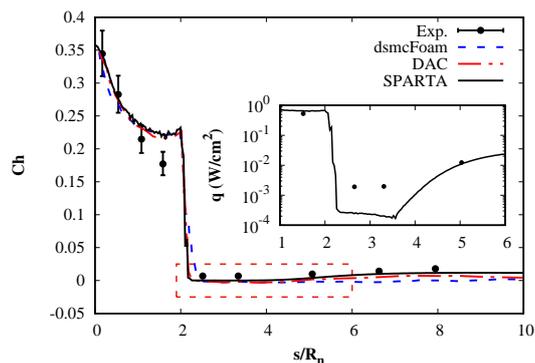


FIGURE 4.14 – Comparaison de mesures expérimentales et de résultats DSMC de coefficients aérodynamiques pour différents angles d'incidence.

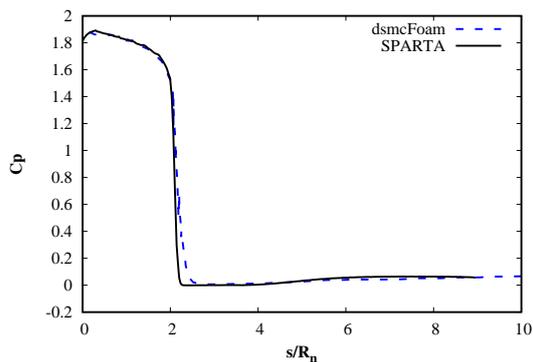
C'est pourquoi, dans cette zone, non seulement l'incertitude associée aux mesures expérimentales est plus importante qu'ailleurs mais c'est également le cas de l'incertitude liée aux résultats numériques. Enfin, les différences entre les résultats DSMC peuvent s'expliquer par des différences de raffinement et de nombre de particules. Toutefois, les résultats **SPARTA** montrent la capacité de ce code, et plus généralement de la DSMC, à retrouver les mesures expérimentales dans la zone de recollement lorsqu'un nombre suffisant de particules est simulé.



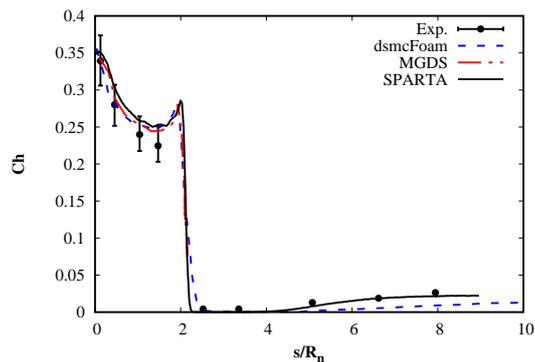
(a) Coefficient de pression pour  $\alpha = 0^\circ$



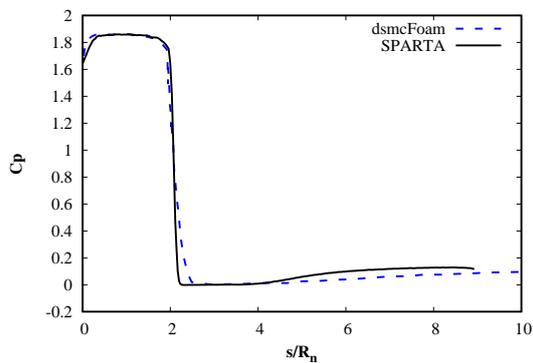
(b) Coefficient de flux de chaleur pour  $\alpha = 0^\circ$



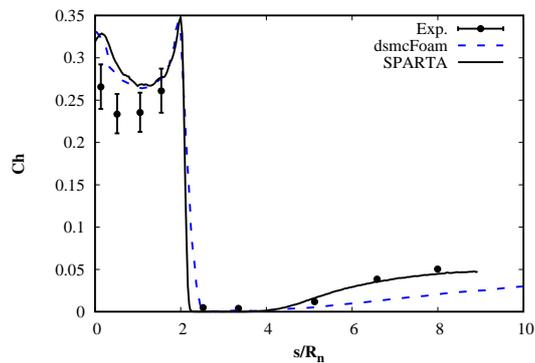
(c) Coefficient de pression pour  $\alpha = 10^\circ$



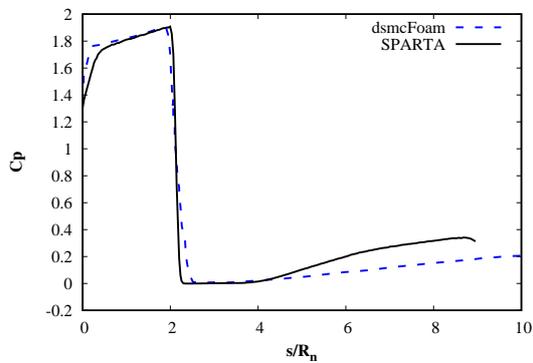
(d) Coefficient de flux de chaleur pour  $\alpha = 10^\circ$



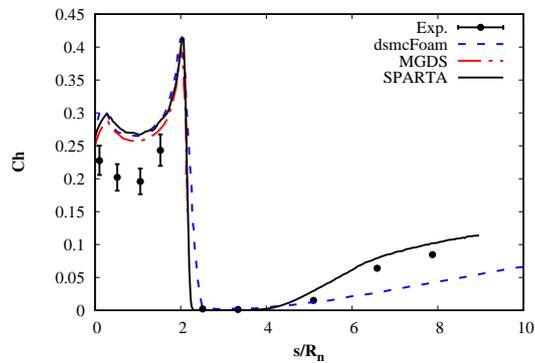
(e) Coefficient de pression pour  $\alpha = 20^\circ$



(f) Coefficient de flux de chaleur pour  $\alpha = 20^\circ$



(g) Coefficient de pression pour  $\alpha = 30^\circ$



(h) Coefficient de flux de chaleur pour  $\alpha = 30^\circ$

FIGURE 4.15 – Comparaison des grandeurs surfaciques (coefficients de pression et de flux de chaleur) obtenues avec les codes **SPARTA**, **MGDS** et **dsmcFoam** pour différents angles d'incidence.

## 4 Résumé

Ce chapitre a permis d'introduire le code DSMC **SPARTA** et d'en présenter les modèles et fonctionnalités. A cette occasion, sa modularité, sa mise à jour régulière et ses performances de calcul ont été soulignées.

Dans un second temps, une étude bibliographique de convergence de la méthode a été réalisée. En complément, une analyse de convergence a été faite par simulation de deux cas tests de référence issus des travaux de Lofthouse. Cette étude a permis de mettre en avant la relativité des critères propres au raffinement de maillage, au pas de temps et au nombre de particules par cellule. En effet, pour la simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés, on a pu voir que la sensibilité aux différents paramètres numériques dépendait fortement du niveau de raréfaction et des grandeurs étudiées.

Finalement dans la dernière partie du chapitre, deux expériences en soufflerie basse densité ont servi à évaluer la capacité de la méthode DSMC à simuler précisément les grandeurs pariétales aérodynamiques et aérothermodynamiques pour des écoulements non-réactifs. Pour le cas de la plaque plane ( $Kn = 0.016$ ), les résultats ont montré un très bon accord entre les mesures et des solutions DSMC pour la pression et le flux de chaleur. Pour le cas du sphère-cône de  $70^\circ$  ( $Kn = 0.013$ ) en incidence comprise entre  $0$  et  $30^\circ$ , les résultats ont mis en évidence des écarts relatifs de l'ordre de  $10\%$  pour les coefficients de forces axiale et normale. Pour le flux de chaleur, les écarts relatifs peuvent aller jusqu'à  $30\%$  dans certaines zones de la géométrie lorsque l'angle d'attaque est supérieur à  $10^\circ$ . Ces résultats indiquent que même en l'absence d'effets chimiques et vibrationnels, la simulation des grandeurs surfaciques peut s'avérer difficile. Le cas du sphère-cône est un cas d'étude en apparence simple qui témoigne des limites des modèles élémentaires de la méthode tels que les modèles d'interactions gaz-surface, de transfert d'énergie translation-rotation ou de collision.

Dans les sections suivantes, la DSMC est étudiée dans le cadre des écoulements de rentrée et sa précision est évaluée par comparaison à des mesures expérimentales obtenues en vol.

# Chapitre 5

## Simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés réactifs - de Mercury à OREX

### Sommaire

<b>1</b>	<b>Le programme Mercury</b> . . . . .	<b>108</b>
1.1	Présentation du programme et des vols d'essai Mercury-Atlas . . . . .	108
1.2	Mercury MA-5 et MA-8 : calcul du flux de chaleur d'arrière corps . . . . .	109
<b>2</b>	<b>Le programme Apollo</b> . . . . .	<b>112</b>
2.1	Présentation du programme et du module de commande . . . . .	112
2.2	Apollo 6 . . . . .	114
2.3	Apollo AS202 . . . . .	118
<b>3</b>	<b>La navette spatiale américaine</b> . . . . .	<b>127</b>
3.1	Structure et instrumentation de la navette . . . . .	127
3.2	Calculs DSMC et données de vol . . . . .	128
<b>4</b>	<b>L'Orbital Reentry Experiment - OREX</b> . . . . .	<b>130</b>
4.1	Structure et instrumentation de la capsule . . . . .	130
4.2	Calculs DSMC et données de vol . . . . .	131
<b>5</b>	<b>Résumé</b> . . . . .	<b>133</b>

**Introduction :** La recherche portant sur les écoulements hypersoniques rencontrés lors d'une rentrée atmosphérique est cruciale notamment pour assurer le succès des missions d'exploration ou des actions de défense. Ceci implique d'être capable de simuler correctement ce type d'écoulement, et d'obtenir une bonne estimation des grandeurs pariétales d'intérêt (pression, flux de chaleur), en utilisant des codes CFD/DSMC. A ce titre, l'obtention de données expérimentales est capitale pour l'étude de la physique des écoulements et pour la validation des modèles numériques permettant la simulation des écoulements autour d'engins. Dans cet objectif, un grand nombre de moyens d'essais ont été développés depuis la fin des années 50. Ces installations (souffleries à choc réfléchi, souffleries à détente, tubes à choc, souffleries « chaudes », etc.) peuvent être classées en trois catégories selon les régimes d'écoulements qu'elles sont capables de reproduire. Ces catégories dépendent de la valeur de l'enthalpie totale qui peut être faible, importante et très importante [125]. Chaque moyen d'essais présente des avantages et des inconvénients (temps d'essais, échelle de la maquette, incertitudes sur les conditions de l'écoulement amont généré, limitation des moyens de mesure utilisables, etc.). De plus, quel que soit le moyen d'essais considéré, il est souvent impossible de recréer les conditions exactes rencontrées en tout point de la trajectoire. Ceci est d'autant plus vrai dans la partie raréfié de la trajectoire de rentrée, puisque les moyens d'essais sol à basses densités ne permettent que de simuler un gaz froid, non représentatif des conditions réelles de déséquilibre thermochimique. Aussi, les mesures réalisées en vol sont essentielles pour valider les modèles DSMC. Ici, l'intérêt se porte sur quatre programmes ayant permis de rassembler des données exploitables pour ce régime d'écoulement. Ainsi, les vols d'essais Mercury et Apollo permettent d'exploiter des mesures de flux de chaleur d'arrière-corps pour des altitudes comprises entre 110 km et 85 km, tandis que les différentes missions de la navette spatiale américaine et la rentrée de la capsule Orbital Re-entry Experiment (OREX) permettent d'accéder à un certain nombre de données aérothermodynamiques enregistrées pour des altitudes supérieures à 90 km. Dans ce chapitre, les modèles DSMC disponibles dans le code **SPARTA** seront évalués par comparaison avec l'ensemble de ces données de vol.

# 1 Le programme Mercury

## 1.1 Présentation du programme et des vols d'essai Mercury-Atlas

Le projet Mercury lancé en 1958 a duré jusqu'en 1963 avec pour objectif d'envoyer un homme en orbite terrestre avant de le faire revenir sur Terre sain et sauf. A cette époque, la priorité était d'aboutir à une version du module capable de garantir le maintien de son intégrité et la survivabilité de son équipage, ce qui a donné lieu à quantité d'expériences au sol et à une campagne de vols d'essai.

Comme l'explique Wright [12], au début du programme, un prototype de capsule Mercury protégé par un bouclier thermique ablatif composé de fibres de verre et de résine phénolique fut lancé en 1959. Pour ce vol surnommé Big-Joe, la face avant du module était équipée de Thermo-Couples (TC) et capteurs de taux de récession tandis que la face arrière était instrumentée avec des TC et des capteurs de pression. Malheureusement, en raison des fortes oscillations d'angle d'attaque subies par l'objet, les données recueillies pour ce vol ne sont pas exploitables. Suite à cette première expérience, quatre modules Mercury-Atlas (MA), dont la géométrie est représentée sur la Figure 5.1, ont été lancés dans les conditions résumées dans le Tableau 5.1. Sur ces modules, le même bouclier thermique que Big-Joe fut utilisé en face avant. La partie conique du véhicule était protégée par une couche de 4 mm de Rene 41 et la portion cylindrique était recouverte d'une couche de 55 mm de béryllium. Enfin, en face arrière, les couches extérieures de protection thermique étaient séparées de la structure interne du module par un épais revêtement en fibre de verre [13].

En février 1961, le module MA-2 a effectué une rentrée avec une apogée à 185 km et une amplitude de 1257 km. Celle-ci sera suivie en novembre 1961 par la rentrée du vol MA-5, puis en mai 1962 par celle du vol MA-7. Finalement, en octobre 1961, le vol habité MA-8 a réalisé une mission avec six orbites avant d'effectuer une rentrée identique en vitesse et altitude à celle du vol MA-5 [13].

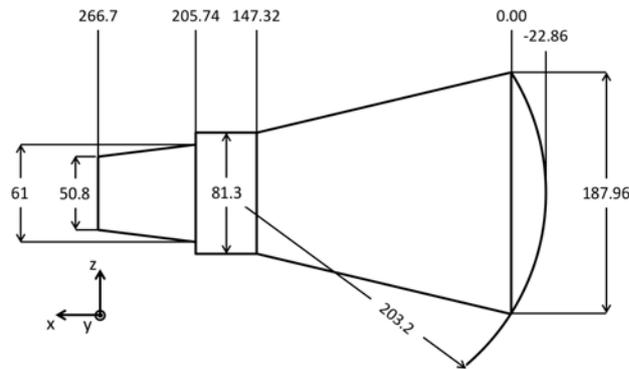


FIGURE 5.1 – Schéma de la capsule Mercury (adapté de [12]). Dimensions en cm.

Id. vol	Date d'entrée	Nombre de TC	$U_\infty$ (km/s)	$\alpha$ (deg.)	$\gamma$ (deg.)
MA-2	21 Feb. 1961	17	5.5	12.5	-
MA-5	29 Nov. 1961	9	7.4	0	-1
MA-7	24 May 1962	12	7.4	0	-1
MA-8	3 Oct. 1962	16	7.4	0	-1

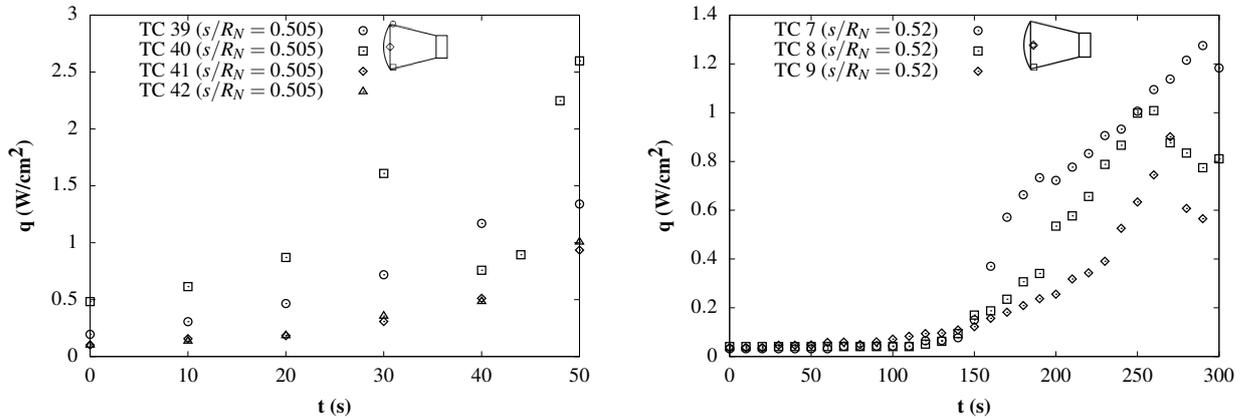
TABLEAU 5.1 – Informations sur les conditions initiales de rentrée et l'instrumentation des 4 capsules Mercury Atlas (MA) (adapté de [12], [13]).

Comme le montre le Tableau 5.1, les quatre modules ont effectué des vols suborbitaux avec des vitesses comprises entre 5.5 et 7.4 km/s. Pour chacun des vols, la trajectoire est donnée dans [13].

## 1.2 Mercury MA-5 et MA-8 : calcul du flux de chaleur d'arrière corps

L'arrière-corps des quatre capsules était équipé de TC en chromel/alumel situés à l'intérieur de la couche protectrice externe du véhicule. Les modules MA-2, MA-5, MA-7 et MA-8 étaient équipés de respectivement 17, 9, 12 et 16 TC. Les températures pariétales mesurées par chaque TC durant les rentrées ont été post-traitées afin de reconstruire l'historique des flux de chaleur surfaciques associés. La position précise des TC de chaque vol ainsi que la procédure de post-traitement des données de vol sont présentées par Murphy dans [13]. Dans le même document, l'analyse d'incertitude sur les valeurs reconstruites du flux de chaleur montre que si l'ensemble des sources d'incertitude devait agir dans le même sens, l'erreur maximale serait inférieure à 50% pour la période de vol la plus fiable. Pour le vol MA-5, cette période correspond à l'intervalle de temps entre 150 et 420 s.

Le rapport de Murphy donne l'évolution temporelle des températures et des flux de chaleur sous forme graphique et tabulée. Cette dernière forme permet d'extraire les données sur la portion de trajectoire qui nous intéresse, à savoir, celle qui correspond à la partie raréfiée. Pour chaque vol, les valeurs du flux de chaleur ont donc été extraites pour des altitudes comprises entre 120 et 80 km. Une partie de ces données est représentée sur les Figures 5.2 et 5.3 où  $t$  désigne le temps écoulé depuis le point d'entrée situé à environ 122 km (*i.e.*  $400 \times 10^3$  ft).



(a) Mesures de 4 capteurs lors du vol MA-2. Les TC 41 et 42 sont placés au même endroit.

(b) Mesures de 3 capteurs lors du vol MA-7. Les TC 7 et 9 sont les symétriques l'un de l'autre par rapport au plan  $(x,z)$ .

FIGURE 5.2 – Flux de chaleur en régime raréfié enregistrés lors des vols MA-2 et MA-7 (extrait de [13]).

Pour ces vols d'essai, aucun véhicule n'était équipé d'une Unité de Mesure Inertielle (UMI), c'est pourquoi aucun historique précis de l'incidence ou du dérapage n'est disponible. Toutefois, d'après Murphy, le vol MA-2 a effectué la majeure partie de sa rentrée avec un angle d'attaque élevé  $\alpha = 12.5^\circ$  selon une trajectoire balistique. Cette tendance est visible au niveau des flux de chaleur représentés sur la Figure 5.2a puisque les flux de chaleur enregistrés par le TC 40 sont plus élevés que ceux mesurés par le TC 39. Par contre, le fait que les valeurs mesurées par les TC 41 et 42 soient identiques suggère que la rentrée du module MA-2 s'est faite sans dérapage. Toujours d'après Murphy, à l'exception du vol MA-2, la rentrée des autres modules s'est effectuée essentiellement à incidence nulle tout au long de la trajectoire. Cependant, pour le vol MA-7, la Figure 5.2b ainsi que les données complémentaires présentées dans [13] montrent d'importantes différences entre les valeurs enregistrées par les TC situés à la même distance du nez du module. Ces résultats suggèrent que le véhicule a volé dans des conditions non nominales sur une partie importante de la trajectoire. Comme indiqué dans la section précédente, les vols MA-5 et MA-8 ont été réalisés suivant des trajectoires quasi-identiques. Dans le cas du vol MA-8 (Figure 5.3b), les valeurs mesurées par les trois TC 3, 7 et 8 situés dans le plan  $(x,z)$  sont identiques entre  $t = 0$  s et 134 s environ. Au-delà les données enregistrées par le TC 3 diffèrent des deux autres. Deux explications peuvent être avancées

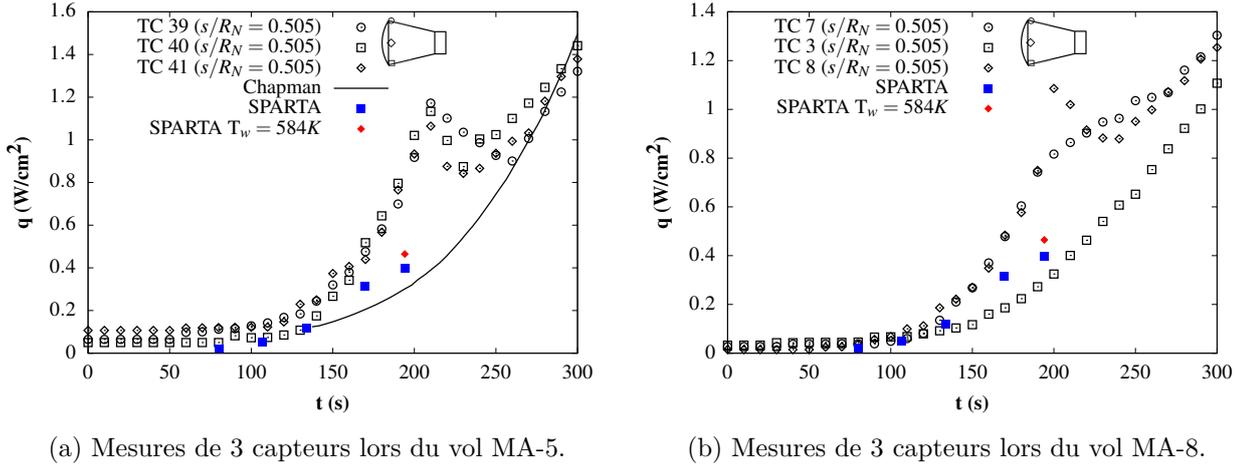


FIGURE 5.3 – Flux de chaleur en régime raréfié enregistrés lors des vols MA-5 et MA-8 (extrait de [13]). Comparaison avec les résultats DSMC obtenus avec **SPARTA**.

pour expliquer ces écarts. La première serait un dysfonctionnement du TC 3, apparu pendant la rentrée et non visible initialement du fait des faibles valeurs enregistrées. La seconde explication serait une soudaine mise en incidence et dérapage du module. Les valeurs prises seraient telles que le point d'arrêt se situerait à la même distance des TC 7 et 8 mais plus éloigné du TC 3. Ceci serait rendu possible grâce à la forme symétrique du module. Les valeurs enregistrées par les autres TC répartis sur tout l'arrière corps du véhicule laissent à penser que la première hypothèse avancée est la bonne. Enfin, dans le cas du vol MA-5 (Figure 5.3a), les TC 39, 40 et 41 enregistrent les mêmes valeurs de température tout au long de la rentrée, ce qui confirme le fait que le module est rentré sans incidence ni dérapage ou avec des valeurs très faibles de ces deux angles.

Ainsi, cinq simulations DSMC ont été réalisées pour les conditions d'atmosphère et les paramètres numériques respectivement donnés dans les Tableaux 5.2 et 5.3. Pour ces simulations, une procédure de raffinement adaptatif a été utilisée pour chaque point de vol et les mêmes modèles que ceux décrits en détails dans la section 2.2.1 ont été employés. Les résultats DSMC sont superposés aux données de vol sur les Figures 5.3 et 5.4. Sur la Figure 5.3a, la courbe de Chapman en noir extraite de [13] correspond au flux d'arrière-corps calculé à partir de la théorie de Chapman pour un écoulement laminaire détaché [126].

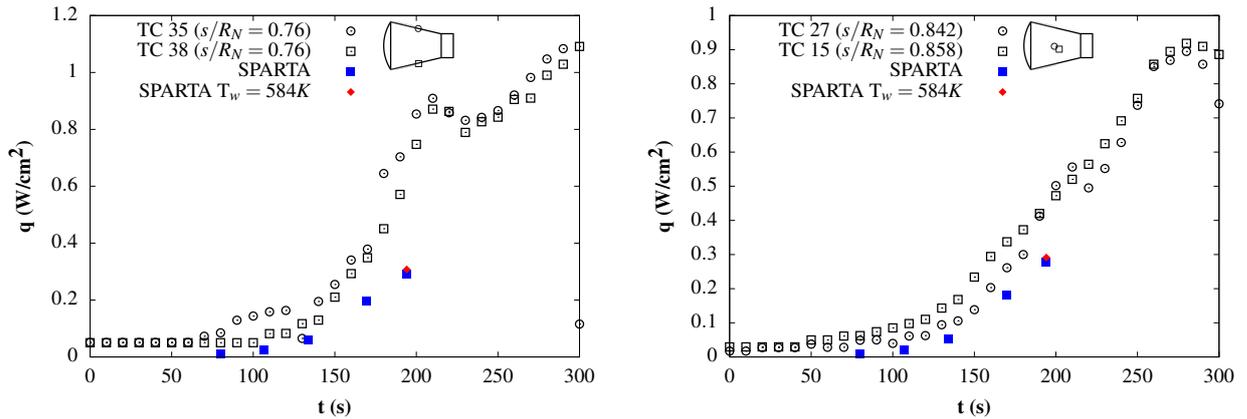
t (s)	Altitude (km)	$U_\infty$ (km/s)	$T_\infty$ (K)	$n_\infty$ ( $\text{m}^{-3}$ )	$X_{\text{N}_2}$	$X_{\text{O}_2}$	$X_{\text{O}}$	$Kn$
80	110	7.47	244.7	$2.1305 \times 10^{18}$	0.7700	0.1232	0.1068	0.39
107	106	7.47	214.8	$4.1894 \times 10^{18}$	0.7796	0.1475	0.0729	0.20
134	102	7.47	198.5	$8.3982 \times 10^{18}$	0.7849	0.1678	0.0473	0.10
170	96	7.47	188.5	$2.4283 \times 10^{19}$	0.7865	0.19351	0.0200	0.035
194	92	7.47	188.1	$4.9646 \times 10^{19}$	0.7873	0.2056	0.0071	0.017

TABLEAU 5.2 – Conditions atmosphériques des vols MA-5 et MA-8 [37].

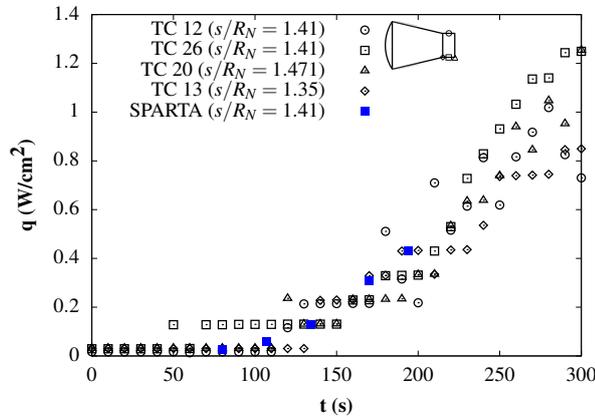
Les résultats montrent que les calculs DSMC sous-estiment les flux de chaleur reconstruits sur la portion conique de l'arrière-corps du module. Par ailleurs, les résultats DSMC suivent l'allure des données de vol et restent globalement dans l'intervalle d'incertitude de 50% pour  $t > 150$  s (*i.e.* altitudes inférieures à 100 km). Sur la portion cylindrique, un bon accord est observé entre les résultats numériques et les données de vol reconstruites. Les résultats DSMC sont donc assez encourageants et plusieurs raisons sont susceptibles d'expliquer les différences avec les mesures.

Tout d'abord, **SPARTA** ne permet pas de calculer dynamiquement (*i.e.* au cours de la simulation) une température de paroi locale en établissant un bilan thermique au niveau de chaque maille surfacique. Ainsi, seule une température de paroi uniforme peut être imposée. Or, les sollicita-

Altitude (km)	$\lambda_{\infty}^{\text{HS}}/\Delta_{x,y}$	Nombre de particules	$\tau_{\text{coll}}/\Delta t$	$T_w$ (K)
110	10	$90 \times 10^6$	7.3	807
106	6	$90 \times 10^6$	6	961
102	4	$100 \times 10^6$	5.7	1148
96	3	$180 \times 10^6$	3.7	1384
92	2.5	$470 \times 10^6$	2.7	1515
92	2.5	$470 \times 10^6$	1.7	390

 TABLEAU 5.3 – Paramètres numériques pour les simulations **SPARTA** des missions MA-5 et MA-8.


(a) Mesures de 2 capteurs de la section conique du module MA-5. (b) Mesures de 2 capteurs de la section conique du module MA-8.



(c) Mesures de 4 capteurs de la section cylindrique du module MA-8.

FIGURE 5.4 – Comparaison des résultats DSMC et des mesures expérimentales en régime raréfié lors des vols MA-5 et MA-8 (extrait de [13]).

tions thermiques subies par les différentes sections du module étant très in-homogènes, l'utilisation d'une température de paroi constante sur tout l'engin et calculée à partir du bilan thermique ( $q_{\text{conv}} - \epsilon\sigma(T_w^4 - T_{\infty}^4) = 0$ ) réalisé au point d'arrêt peut s'avérer inapproprié. Afin d'évaluer l'influence de la température de paroi, deux simulations avec des températures de paroi différentes ont été réalisées pour le point de vol le plus bas (altitude de 92 km atteinte à  $t = 194$  s) qui se trouve dans un régime de glissement. Dans le premier cas, une température de paroi uniforme  $T_w = 1515$  K est imposée sur toute la surface du module. Celle-ci est obtenue en établissant le bilan thermique au point d'arrêt et pour lequel le flux convectif est calculé à l'aide de la formule de Sutton (voir section 2). Pour la deuxième simulation, la température de paroi est obtenue en effectuant une

moyenne des mesures de températures sur la section cylindrique de la capsule lors des vols MA-5 et MA-8. La température de paroi correspondante vaut  $T_w = 390$  K. Comme le montre la Figure 5.3a, le flux de chaleur calculé près de l'épaule du module est sensible au choix de la température de paroi. L'influence de cette sensibilité semble décroître à mesure que la distance au point d'arrêt augmente (cf. Figures 5.3a et 5.4a à  $t = 194$  s). En effet, l'écart relatif entre le flux de chaleur pariétal obtenu avec les deux températures est d'environ 17% près de l'épaule et de 5% au milieu de la section conique. La condition de paroi idéale serait d'utiliser :

- (i) Pour la face avant : une température de paroi calculée à partir d'un équilibre radiatif établi au point d'arrêt
- (ii) Pour l'arrière-corps : une distribution de température interpolée à partir des mesures reportées par Murphy

Cependant, bien que l'utilisation d'une distribution de température donnerait des résultats localement plus proches de l'expérience, les résultats présentés ici suggèrent que les différences entre la DSMC et les résultats expérimentaux à  $t = 194$  s resteraient importants et que la température de paroi ne peut pas être considérée comme la source majeure de ces différences.

Une autre source potentielle de divergence des résultats serait liée aux incertitudes sur les conditions atmosphériques. Comme les simulations sont toutes basées sur le modèle de **Jacchia77** [37] qui est un modèle d'atmosphère moyenné, les fluctuations des conditions atmosphériques (notamment la masse volumique) en fonction de la date et du point de rentrée ne peuvent être prises en compte dans nos calculs.

De la même manière, le fait qu'aucun des véhicules ne soit équipé d'UMI implique que seules les trajectoires théoriques sont connues. Il est donc possible que d'importantes déviations par rapport à la trajectoire nominale aient eu lieu sans qu'elles n'aient été remarquées. Cette dernière hypothèse implique l'existence d'une incertitude significative sur les points de vol et donc sur les conditions d'atmosphère utilisées pour les calculs.

Enfin, une dernière limitation provient du post-traitement des données mesurées qui suppose que l'épaisseur de la couche de protection externe (située entre le TC et la surface du module) soit suffisamment fine pour être négligée. Cette hypothèse permet de calculer les flux surfaciques directement à partir des mesures de températures. La prise en compte de l'épaisseur de la couche externe de protection thermique nécessite l'utilisation d'une méthode inverse qui pourrait améliorer la précision des flux de chaleur reconstruits. Contrairement à Mercury, le module Apollo AS-202 étant équipé d'une UMI et de calorimètres, ses données de vol sont donc exempts de ce type d'incertitudes.

## 2 Le programme Apollo

### 2.1 Présentation du programme et du module de commande

Le contexte de la guerre froide et la rivalité entre les puissances russe et américaine marque le début d'une course à la conquête spatiale dès la fin des années 50. Le 25 mai 1961, le Président Kennedy annonce, lors d'un discours devant le congrès des États-Unis, le lancement d'un programme ayant pour objectif d'envoyer le premier homme sur la Lune avant la fin de la décennie. Cet objectif a donné naissance aux programmes Gemini (1963-1966) et Apollo (1961-1975). Le 21 juillet 1969, les astronautes Neil Armstrong et Buzz Aldrin deviennent les premiers hommes à poser les pieds sur la Lune lors de la mission Apollo 11. Au total six missions se poseront sur la Lune avant la fin du programme en 1975.

L'expérience capitalisée au cours du programme Mercury (1958-1963) et les programmes de recherche Flight Investigation of Re-Entry (FIRE) I et II (avril 1964 et mai 1965) ont conduit à la conception du module de commande Apollo tel que représenté sur la Figure 5.5. Afin d'évaluer la résistance du bouclier thermique de ce module, une série de vols tests fut effectuée entre 1966 et 1968 (Tableau 5.4). Pour ces vols d'essai, les objectifs étaient de vérifier la capacité des modèles analytiques, développés à partir des essais en soufflerie et des modèles théoriques, de prévoir les

sollicitations thermiques subies par le module de commande mais aussi d'analyser l'état de dégradation des protections thermiques après le vol. Les trajectoires des différents vols d'essai sont illustrées sur la Figure 5.6.

Vol (date)	Vitesse (km/s)	$\alpha$ (°)	$\gamma$ (°)	Décél. max. (g)	$q_{\max}^{\text{th}}$ (W/cm <sup>2</sup> )
AS-201 (26/02/1966)	7.67	20	-8.6	14.3	186
AS-202 (25/08/1966)	8.29	18	-3.5	2.4	91
Apollo 4 (09/11/1967)	10.73	25	-5.9	4.6	237
Apollo 6 (04/04/1968)	9.6	25	-6.9	7.3	488

<sup>a</sup>  $\alpha$ ,  $\gamma$  et  $q_{\max}^{\text{th}}$  désignent respectivement l'angle d'attaque, la pente et le flux de chaleur théorique maximal prévu.

TABLEAU 5.4 – Paramètres de vols des différents vol d'essais des modules de commande Apollo [12]



(a) Module de commande AS-202 avant sa rentrée



(b) Module de commande Apollo 6 après sa rentrée (Fernbank Science Center, Atlanta)

FIGURE 5.5 – Photographies de deux modules de commande Apollo utilisés lors des vols d'essais, crédit : NASA

Les innovations informatiques et l'essor du calcul scientifique à la fin du 20<sup>ème</sup> siècle ont rendu possible l'exploitation des données de vol pour la validation des modèles numériques. Du fait de la grande richesse des données collectées (pression, flux de chaleur convecto-diffusifs et radiatifs, etc.) lors des vols d'essai, ces données de vol ont été utilisées à la fois pour la validation de codes Computational Fluid Dynamic (CFD) [12, 127] mais aussi DSMC [128, 129, 94]. Parmi les quatre vols d'essai, le vol AS-201 ne comprenait pas d'UMI contrairement aux trois autres vols. La présence d'un système de bord de ce type permet une reconstruction précise de la trajectoire de vol ainsi que de l'orientation du module tout au long de la rentrée [12]. En outre, l'incomplétude des données pour certains vols (indisponibilité d'une partie des données de trajectographie ou dysfonctionnement de l'instrumentation) ne permet pas la simulation précise de tous ces vols en régime raréfié. Ici, le choix a été fait de travailler sur le vol Apollo 6, pour lequel un grand nombre de simulations numériques

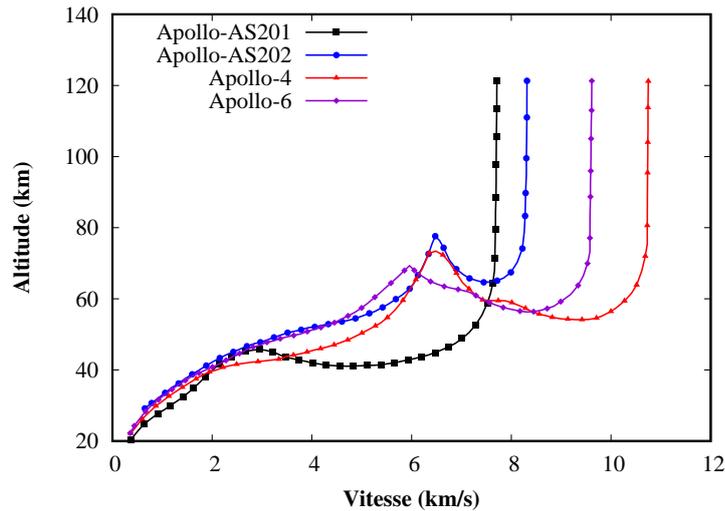


FIGURE 5.6 – Trajectoires des vols d'essais [14]

est disponible [15, 130] puis sur le vol AS-202, pour lequel des données de vol sont disponibles et exploitables.

## 2.2 Apollo 6

Comme l'explique Moss dans [15], la NASA a présenté en 2005 sa nouvelle vision de l'exploration spatiale habitée autour d'une nouvelle génération de Crew Exploration Vehicle (CEV). Cette nouvelle génération comprend différentes versions permettant de relier la Terre et l'International Space Station (ISS), pour l'exploration lunaire et pour l'exploration martienne. Les récentes recherches en matière d'Architecture de Système d'Exploration (AES) recommandent de concevoir les nouveaux CEV en s'inspirant de la forme géométrique du module de commande Apollo. Dans l'objectif de construire de nouvelles bases de données Aerothermodynamiques (ATD) expérimentales et numériques pour ce type de géométrie, Moss s'est penché dans [15] et [130] sur la simulation des coefficients aérodynamiques de la capsule Apollo, dans les conditions de rentrée de la mission Apollo 6.

Dans l'article [8], les auteurs cherchent à évaluer le comportement de l'Intermediate eXperimental Vehicle (IXV) dans les couches supérieures de l'atmosphère en effectuant une série de calculs DSMC. Afin de valider leur outil et pour appréhender la simulation des coefficients aérodynamiques de l'IXV, Banyai *et al.* ont commencé par simuler la rentrée du module Apollo 6 puis ont comparé leurs résultats à ceux de Moss. Afin d'appréhender au mieux la simulation d'écoulements réactifs en régime hypersonique raréfié, la même procédure a été adoptée ici et un ensemble de simulations a été réalisé puis confronté aux résultats numériques de Moss.

### 2.2.1 Conditions initiales et aux limites et paramètres numériques des simulations DSMC

Pour les simulations, les conditions atmosphériques considérées sont résumées dans le tableau 5.5. Pour les altitudes  $h \geq 90$  km, le modèle **Jacchia77** [37] est utilisé tandis que pour les altitudes  $h < 90$  km, les valeurs proviennent du modèle U.S Standard de 1962 [131]. La colonne  $Kn$  est calculée avec comme longueur caractéristique le diamètre  $D_b = 3.9116$  m (Figure 5.7) et un libre parcours moyen calculé à partir de la formule du modèle Hard Sphere (HS) et un diamètre  $d_{\text{ref}} = 3.78 \times 10^{-10}$  m.

Les calculs **SPARTA** ont été réalisés dans les mêmes conditions que celles décrites dans l'article [15] et résumées ci-après. Dans ce papier, Moss simule la rentrée du module Apollo entre 200 et 65 kilomètres d'altitude.

En régime raréfié (entre 200 et 85 km), les calculs sont effectués avec le code DSMC **DS3V**. Le modèle de collision est le modèle Variable Hard Sphere (VHS). Le nombre collisionnel de rotation est pris constant  $Z_{\text{rot}} = 5$  et celui de vibration est calculé à partir du modèle de Millikan-White (cf. chapitre 3, section 3, sous-section 4.3). Un modèle d'air à 5 espèces est utilisé et les réactions chimiques sont modélisées avec le modèle Total Collision Energy (TCE) de Bird et les coefficients du modèle de cinétique chimique de Park [89]. La paroi du module est supposée non-catalytique et les interactions gaz-surface sont supposées totalement diffuses avec accommodation complète à la paroi. Dans [15], une température de paroi constante  $T_w$  est calculée pour chaque altitude de la façon suivante :  $T_w$  est choisie comme la valeur minimale entre la valeur obtenue en effectuant le bilan thermique au point d'arrêt en régime continu et en régime moléculaire libre. Dans le premier cas, le flux convectif est donné par la formule de Sutton [132] pour un écoulement continu non-enthalpique :

$$q_c = \frac{1.76 \times 10^{-4}}{\sqrt{R_n}} \sqrt{\rho_\infty} U_\infty^3, \quad (5.1)$$

où  $R_n = 4.6939$  m est le rayon de nez du module. Dans le second, le flux convectif pour un écoulement en régime moléculaire libre donné par Bird [43] s'écrit :

$$q_c = \frac{1}{2} \rho_\infty U_\infty^3 \cos \alpha, \quad (5.2)$$

où  $\alpha$  est l'angle d'incidence. Ensuite, le bilan thermique s'écrit :

$$\sigma \epsilon_w (T_w^4 - T_\infty^4) = q_c, \quad (5.3)$$

où  $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$  est la constante de Stefan-Boltzmann et  $\epsilon_w$  l'émissivité du matériau prise ici égale à 0.85.

En régime continu (entre 85 et 65 km), les simulations sont effectuées avec le code CFD **LAURA** [133, 134]. Un solveur Thin Layer Navier-Stokes (TLNS) et un solveur Full Navier-Stokes (FNS) sont utilisés avec un modèle d'air réactif à 5, 7 et 11 espèces pour montrer l'indépendance de la solution au choix du solveur CFD et aux effets d'ionisation. La paroi est considérée comme étant non-catalytique avec une température  $T_w$  constante. Les conditions aux limites de glissement et de saut de température ne sont pas utilisées.

Deux séries de simulations ont été réalisées avec le code **SPARTA** et le maillage surfacique représenté sur la Figure 5.8. La première a pour objectif de générer des résultats pour l'analyse des effets de raréfaction (*i.e.* d'altitude) sur les valeurs des coefficients aérodynamiques. Pour ce faire, plusieurs simulations sont réalisées en maintenant la vitesse constante  $U_\infty = 9.6$  km/s, l'angle d'incidence constant  $\alpha = -25^\circ$  et en faisant varier l'altitude entre 200 et 85 km (lignes grisées dans le tableau 5.5). La seconde série de simulations a pour objectif d'étudier l'effet de l'angle d'incidence sur les coefficients aérodynamiques en faisant varier  $\alpha$  entre 0 et 180°. Une troisième série de simulations présentée dans [15] mais non reproduite avec **SPARTA**, illustre la dépendance linéaire à la vitesse des coefficients  $C_A$  et  $C_N$ .

Pour l'ensemble des calculs, le pas de temps a été pris inférieur à la valeur minimale du temps intercollision moyen  $\tau_{\text{coll}}$  dans le domaine et le nombre de particules numériques est choisi de sorte à garantir la présence d'au moins 10 particules dans l'écoulement libre. De la même manière, les maillages sont construits de manière à garantir une taille de maille inférieure à une fraction du libre parcours moyen. Pour cela, une procédure de raffinement automatique est utilisée, assurant le respect de ce critère en proche paroi, là où le libre parcours moyen local est considérablement plus faible que  $\lambda_\infty$ . Pour les altitudes de 95 et 85 km, la simulation d'un domaine contenant la géométrie complète devient extrêmement coûteux. Ces deux points ont donc été sous-résolus en espace. Les paramètres numériques sont résumés dans le tableau 5.6. Pour chaque simulation, la longueur des mailles est identique dans chaque direction et notée  $\Delta_{x,y,z}$ . Pour les points de vol entre 150 et 95 km, la procédure de raffinement adaptatif est appliquée sur tout le domaine de calcul, tandis qu'à 85 km, le raffinement est limité à une région rectangulaire en amont de la face avant du module.

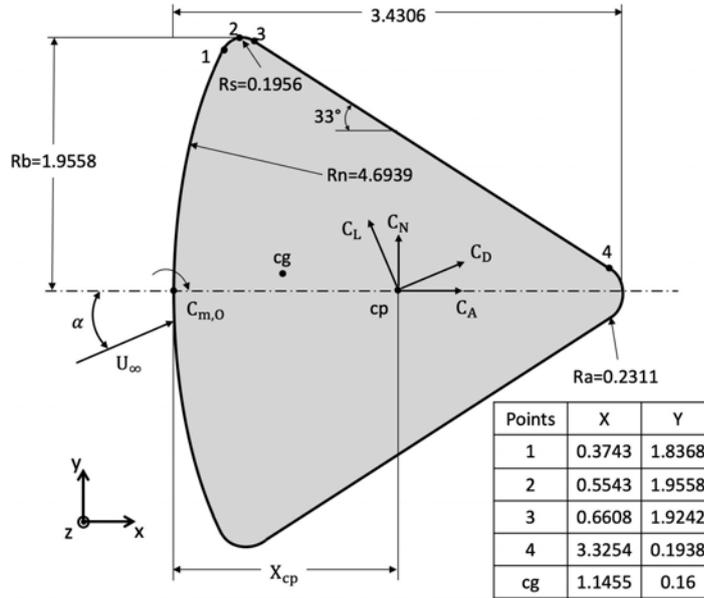


FIGURE 5.7 – Schéma du module de commande Apollo et système de coordonnées aérodynamiques (adapté de [15]). Dimensions en m.

Dans tous les cas, le raffinement s'active automatiquement lorsque le ratio entre la taille des mailles et le libre parcours moyen local dépasse un seuil fixé. Pour les altitudes supérieures à 105 km, le nombre de particules numériques  $N_p$  est pris identique aux valeurs mentionnées par Moss et un nombre de particules largement supérieur est simulé pour les altitudes de 95 et 85 km. Si le nombre de particules ne permet pas toujours de respecter scrupuleusement le critère de stabilité statistique dans la totalité du domaine (à l'intrados et sur l'arrière-cors), l'étude de convergence en maillage présentée par Banyai *et al.* dans [8] montre que l'influence du nombre de particules par cellule sur le coefficient  $C_A$  diminue brusquement à mesure que  $\Delta_{x,y,z}/\lambda_\infty$  tend vers 0.

## 2.2.2 Résultats et discussion

Cette section présente les résultats obtenus avec **SPARTA**. Les coefficients aérodynamiques de force axiale  $C_A$ , de force normale  $C_N$ , de moment de tangage calculé au centre de gravité de la capsule  $C_{m,cg}$  et la position du centre de pression  $X_{cp}$  dans le repère représenté sur la Figure 5.7, sont analysés et comparés aux données de la littérature. Les courbes de la Figure 5.9a montrent l'évolution des coefficients  $C_A$  et  $C_N$  en fonction de l'altitude. Les courbes de la Figure 5.9b montrent l'évolution du coefficient de moment  $C_{m,cg}$  et de la position du centre de pression  $X_{cp}$  en fonction de l'altitude. On remarque qu'un excellent accord est atteint entre **SPARTA** et **DS3V** sur presque toute la trajectoire avec des différences inférieures à 5%. En régime proche continu, les écarts entre les résultats obtenus avec les différents codes DSMC augmentent en raison du caractère séquentiel du code **DS3V** qui atteint ses limites informatiques à un état de convergence spatial plus éloigné de la solution CFD que le code **SPARTA**. Les coefficients  $C_A$ ,  $C_N$  et  $C_{m,cg}$  obtenus avec **SPARTA** (DSMC) et **LAURA** (CFD) à 95 et 85 km sont en bon accord. Par contre, la différence entre les  $X_{cp}$  calculés par ces deux codes est importante.

Afin de déterminer l'origine de ces écarts, une simulation a été faite avec un maillage de fond plus fin ( $\lambda_\infty/\Delta_{x,y,z} = 0.6$ ) mais sans raffinement automatique. Les résultats indiqués dans le tableau 5.7 montrent que l'utilisation d'un maillage de fond plus fin a un effet très faible sur les valeurs des coefficients aérodynamiques calculés. L'utilisation du raffinement automatique permet d'assurer l'obtention de résultats corrects, même à basse altitude. Enfin, cette étude de convergence en espace ne permet pas d'expliquer les écarts observés entre les résultats CFD et DSMC sur le  $X_{cp}$ . Finalement, comme l'illustre la Figure 5.10, les résultats montrent une excellente correspondance

Alt. (km)	$n_\infty$ (m <sup>-3</sup> )	$\rho_\infty$ (kg/m <sup>3</sup> )	X <sub>O<sub>2</sub></sub>	X <sub>N<sub>2</sub></sub>	X <sub>O</sub>	T <sub>∞</sub> (K)	T <sub>w</sub> (K)	Kn
200	$9.00 \times 10^{15}$	$3.28 \times 10^{-10}$	0.0315	0.4548	0.5138	1026	234	44.74
170	$2.27 \times 10^{16}$	$8.78 \times 10^{-10}$	0.0435	0.5482	0.4083	892	300	17.74
150	$5.31 \times 10^{16}$	$2.14 \times 10^{-9}$	0.0546	0.6156	0.3298	733	373	7.59
140	$9.35 \times 10^{16}$	$3.85 \times 10^{-9}$	0.0618	0.6517	0.2865	625	434	4.31
135	$1.31 \times 10^{17}$	$5.49 \times 10^{-9}$	0.0659	0.6716	0.2625	564	474	3.06
130	$1.94 \times 10^{17}$	$8.21 \times 10^{-9}$	0.0709	0.6911	0.238	500	524	2.07
125	$3.06 \times 10^{17}$	$1.31 \times 10^{-8}$	0.0768	0.7117	0.2115	433	589	1.32
120	$5.21 \times 10^{17}$	$2.26 \times 10^{-8}$	0.0845	0.7327	0.1828	368	675	0.773
115	$9.86 \times 10^{17}$	$4.36 \times 10^{-8}$	0.0978	0.7539	0.1484	304	795	0.408
110	$2.12 \times 10^{18}$	$9.61 \times 10^{-8}$	0.1232	0.7704	0.1064	247	920	0.190
105	$5.09 \times 10^{18}$	$2.36 \times 10^{-7}$	0.1581	0.7832	0.0587	208	1029	0.081
100	$1.19 \times 10^{19}$	$5.58 \times 10^{-7}$	0.1768	0.7844	0.0388	194	1146	0.0338
95	$3.12 \times 10^{19}$	$1.48 \times 10^{-6}$	0.2004	0.7869	0.0127	189	1295	0.0139
90	$7.08 \times 10^{19}$	$3.38 \times 10^{-6}$	0.2091	0.7875	0.0035	188	1436	0.0057
85	$1.65 \times 10^{20}$	$7.96 \times 10^{-6}$	0.2372	0.763	0.0	181	1598	0.0024
75	$9.01 \times 10^{20}$	$4.34 \times 10^{-5}$	0.2372	0.7628	0.0	200	-	0.00045
65	$3.47 \times 10^{21}$	$1.67 \times 10^{-4}$	0.2372	0.7628	0.0	293	-	0.00012

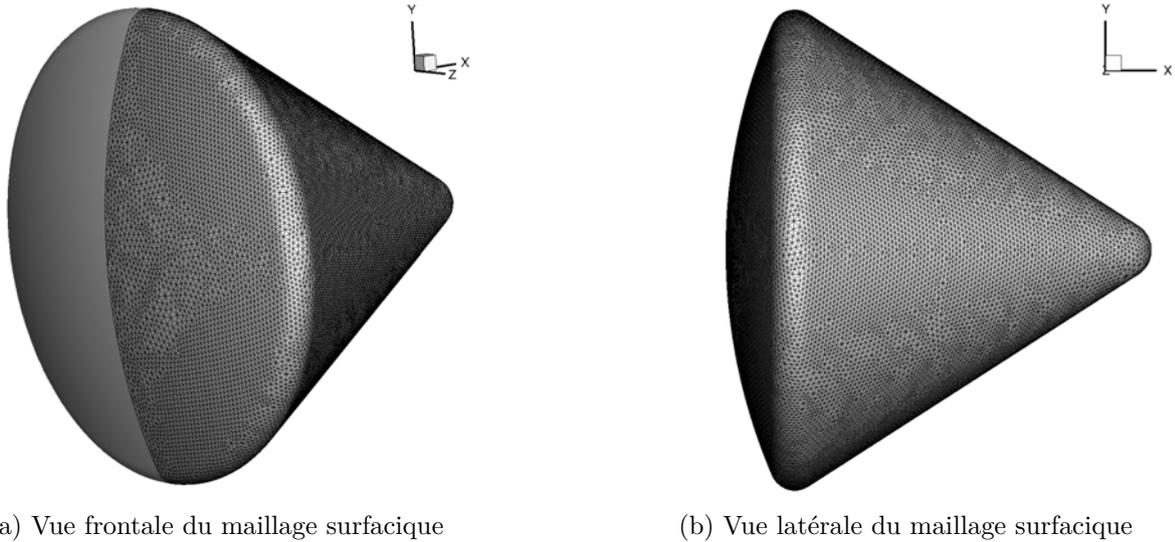
 TABLEAU 5.5 – Conditions atmosphériques pour le module Apollo 6 simulées par Moss [15]. Les conditions grisées sont celles simulées avec **SPARTA**.

Altitude (km)	$\lambda_\infty/\Delta_{x,y,z}$	$N_p \times 10^{-6}$	$\tau_{\text{coll}}/\Delta t$
200	87.5	2	9
170	41.6	2.6	16
150	29.7	3.1	5.6
130	16.2	4.3	5.1
115	7.9	6.6	4.2
105	3.2	21.5	3.9
95	1.65	200	2.0
85	0.4	1000	1.7

TABLEAU 5.6 – Paramètres numériques des simulations

entre les codes **DS3V** et **SPARTA** quel que soit l'angle d'incidence, pour une altitude de 105 km. D'un point de vue aérodynamique, pour stabiliser la position de l'objet pendant la rentrée, il est commun de chercher pour quelle(s) valeur(s) d'angle d'attaque le  $C_{m,\text{cg}}$  s'annule. Ici, la Figure 5.10b montre que cette stabilité est atteinte pour  $\alpha \simeq 83^\circ$ . Toutefois, compte tenu de la position du centre de gravité ( $X_{\text{cg}} = 1.1455$  m,  $Y_{\text{cg}} = 0.16$  m,  $Z_{\text{cg}} = 0$  m), il est nécessaire de calculer et d'analyser le  $C_{m,\text{cg}}$  sur toute la plage d'angle d'attaque, *i.e.* entre  $-180^\circ$  et  $+180^\circ$ , pour pouvoir déterminer autour de quel angle l'engin devrait se stabiliser. Les résultats de Moss montrent qu'il existe un deuxième angle d'attaque ( $\alpha = -164^\circ$ ), pour lequel l'engin est aérodynamiquement stable. Cette valeur étant très loin de la valeur nominale de  $-25^\circ$  de la rentrée d'Apollo 6, il y a de fortes chances pour que l'objet ait été statiquement instable sur la portion raréfiée de sa trajectoire.

Bien que des données de vol soient disponibles pour la rentrée du module Apollo 6 [135], ces données ne sont pas exploitables pour la partie raréfiée. En effet, en raison de l'importante vitesse d'entrée du module, le régime continu est atteint trop rapidement et le peu de résultats de pression ou de flux mesurés pour des altitudes supérieures à 80 km ne sont pas disponibles ou extractibles des graphes. La rentrée du module AS-202 étant moins sévère, une partie des mesures en vol du flux de chaleur est disponible pour le régime raréfié. Leur comparaison avec les résultats **SPARTA**



(a) Vue frontale du maillage surfacique

(b) Vue latérale du maillage surfacique

FIGURE 5.8 – Maillage surfacique de 21970 mailles utilisé pour les calculs **SPARTA**.

Simulation	$\lambda_\infty/\Delta_{x,y,z}$	Raffinement	$C_A$	$C_N$	$C_{m,cg}$	$X_{cp}$ (m)
1	0.4	Oui	1.323	-0.181	-0.0132	2.111
2	0.6	Non	1.313	-0.173	-0.0109	2.027

TABLEAU 5.7 – Influence du maillage sur les coefficients aérodynamiques à 85 km

et leur analyse est l'objet de la prochaine section.

## 2.3 Apollo AS202

### 2.3.1 Structure du module et instrumentation

Dans cette section, les flux de chaleurs mesurés sur l'arrière corps de la capsule Apollo AS202 sont analysés et comparés aux résultats **SPARTA** afin de déterminer la capacité du code à calculer cette grandeur pariétale. Le module AS-202 fut le premier module d'essai équipé d'une UMI permettant d'accéder aux paramètres de vol tels que l'angle d'attaque, de dérapage, etc.

La géométrie originale du module est représentée sur la Figure 5.5a. En comparaison, la géométrie simplifiée (Figure 5.7), utilisée pour les simulations **SPARTA**, ne prend pas en compte les éléments structurels tels que les antennes cimenterres, le logement ombilical ou les systèmes de propulsion situés sur l'extrados du véhicule (Fig. 5.11). De même, l'épaisseur variable du Système de Protection Thermique (TPS) induisant une légère asymétrie du module et les variations de rayon à l'épaule n'ont pas été reproduites sur la géométrie simplifiée [12].

Le module est fait d'une structure en acier inoxydable sur laquelle est fixée une protection thermique Avcoat 5026/39G, composée d'une résine epoxy renforcée par des fibres de quartz et injectée dans une matrice phénolique en nid d'abeille [12]. Le choix d'une émissivité  $\epsilon_w = 0.85$  est donc pertinent puisqu'il s'agit de la valeur habituellement utilisée pour les matériaux ablatifs carbonés. Comme l'analyse du bouclier thermique après le vol a témoigné de faibles niveaux de dégradation des protections thermiques [136] et en raison des conditions de vol (vitesse et masse volumique) peu critiques rencontrées dans la portion transitionnelle de la trajectoire, tous les phénomènes ablatifs sont supposés négligeables.

Sur la face avant, le module était équipé de 12 capteurs de pression et de 12 calorimètres. Parmi les 12 capteurs de pression, 10 ont fourni des données mais aucune n'était exploitable dans le régime raréfié. De plus, aucun calorimètre n'a fourni de données utilisables [135]. La face arrière était instrumentée de 24 capteurs de pression et 23 calorimètres. Seuls 2 capteurs de pression

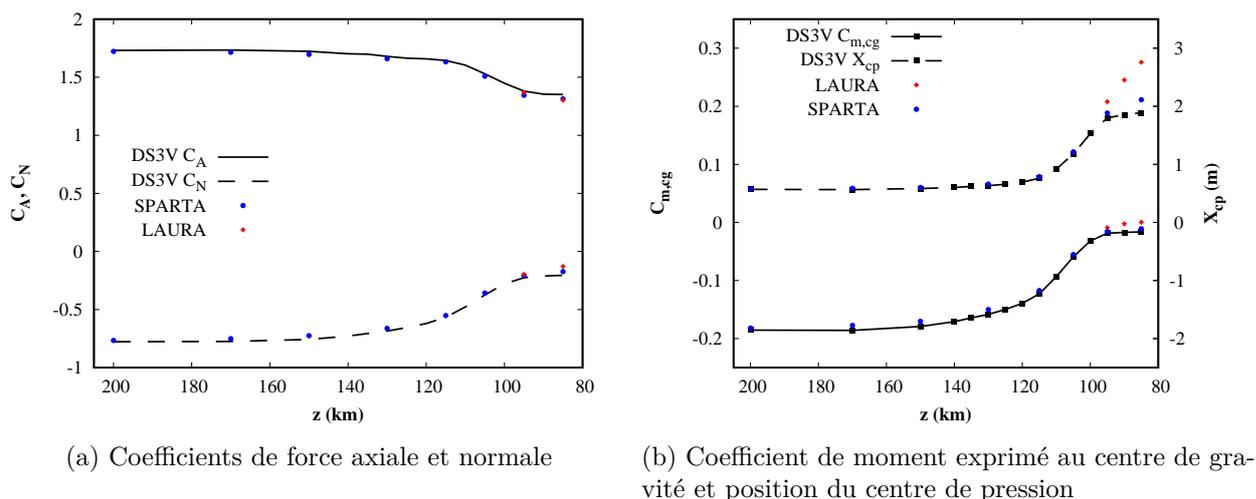


FIGURE 5.9 – Sensibilité des coefficients aérodynamiques à l'altitude

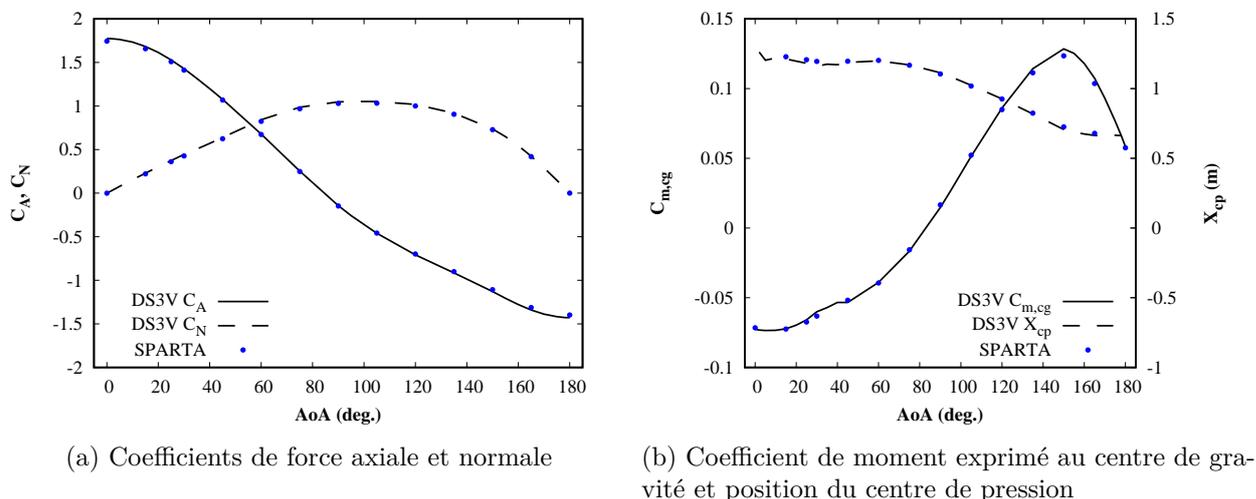


FIGURE 5.10 – Sensibilité des coefficients aérodynamiques à l'angle d'incidence

ont mesuré une augmentation mesurable de pression juste avant l'ouverture des parachutes, ce qui correspond à une altitude trop basse par rapport au domaine d'intérêt de cette étude. D'autre part, les mesures de forces de traînée et de portance dans la partie « low deceleration level », qui englobe la partie de trajectoire entre 120 et 80 km, présentent une incertitude trop importante pour une exploitation pertinente des résultats [137]. Parmi les 23 calorimètres, 19 (représentés en noir sur la Figure 5.11) ont fonctionné correctement pendant la mission. Les coordonnées des calorimètres indiquant leur position exacte sur le module, en tenant compte de l'épaisseur du TPS, sont données dans [12].

Les calorimètres utilisés sont des jauges Gardon [138] conçues pour mesurer des flux inférieurs à  $58 \text{ W/m}^2$ . D'après les explications de Wright [12], lorsque ces jauges sont utilisées en condition de vol avec des écoulements cisailés, l'incertitude des jauges est d'environ  $\pm 20\%$ . Comme le rapport technique de la NASA [139] d'où proviennent les mesures ne donne pas d'estimation de l'incertitude de mesure, l'hypothèse d'une incertitude de 20% proposée par Wright est appliquée à l'ensemble des capteurs dans le cadre de notre étude.

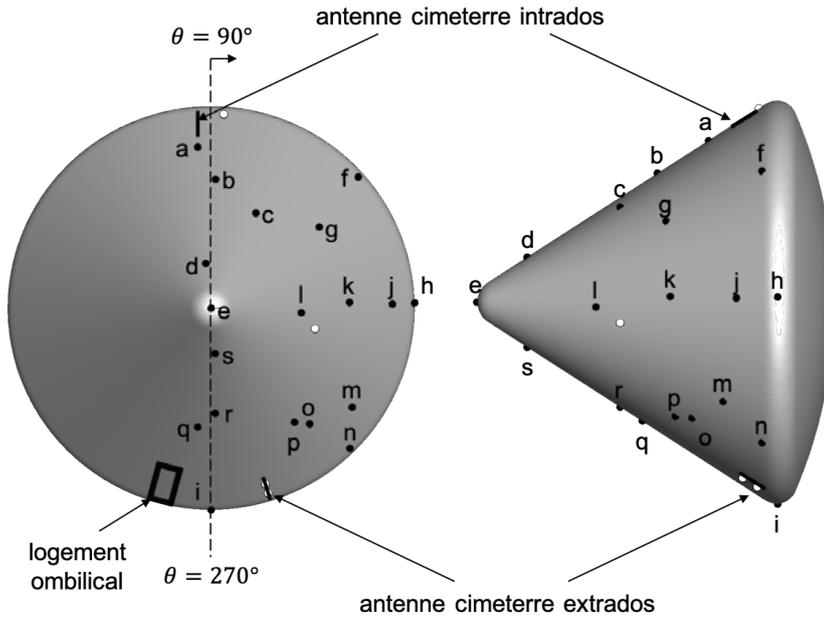


FIGURE 5.11 – Position des calorimètres sur l'arrière-corps du module AS-202. Les symboles blancs indiquent les 4 calorimètres défectueux (adapté de [12]).

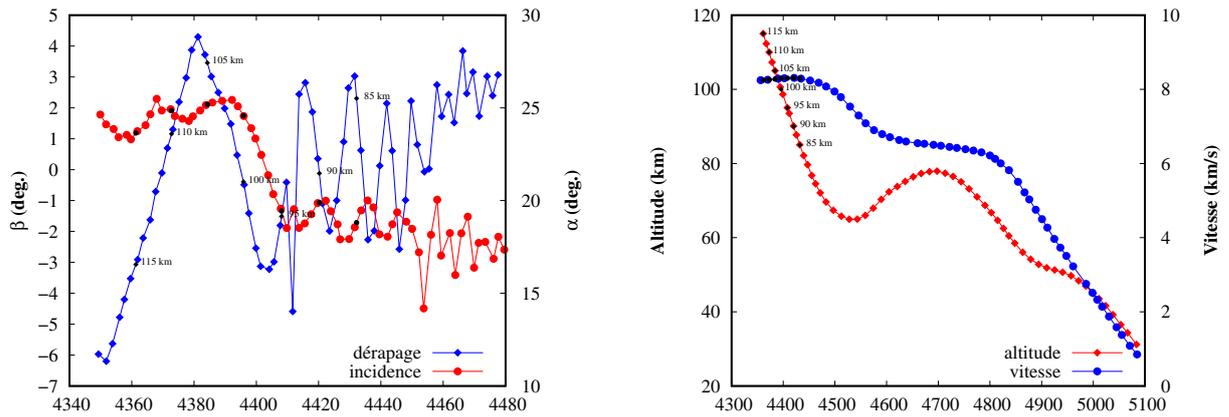
### 2.3.2 Conditions initiales et aux limites et paramètres numériques des simulations DSMC

La trajectoire [12, 127], *i.e.* l'évolution temporelle de la vitesse et de l'altitude, et l'attitude (angles d'incidence  $\alpha$  et de dérapage  $\beta$ ) [137] de la capsule en chaque point de cette trajectoire sont représentées sur la Figure 5.12b. Six points de vol espacés de 5 km ont été sélectionnés dans le régime raréfié, entre 120 et 80 km ( $t=4500$  s). Les paramètres de vol associés à chacun de ces points sont résumés dans le Tableau 5.8. A ces altitudes, l'angle d'attaque varie entre 19 et 25° tandis que l'angle de dérapage oscille entre  $-1.5$  et  $3.5^\circ$  avec des valeurs maximales pour 105 et 85 km. La prise en compte du dérapage empêcherait l'utilisation d'un plan de symétrie induisant une multiplication par deux des ressources informatiques nécessaires pour garder la même précision de calcul. De plus, à 85 km ( $Kn = 2.4 \times 10^{-3}$ ), en régime proche continu, une multiplication par deux des ressources nécessaires à un calcul déjà très coûteux n'est pas envisageable. Par conséquent, pour les 6 points, le choix a été fait de ne pas prendre en compte l'angle de dérapage. Toutefois, l'influence d'une telle hypothèse sur les résultats obtenus est discutée dans la section 2.3.4.

Temps (s)	Altitude (km)	$U_\infty$ (m/s)	$\alpha$ (°)	$\beta$ (°)	$T_w$ (K)
4373	110	8261	24.85	1.2	739
4384	105	8276	25.18	3.5	826
4396	100	8291	24.58	0.4	921
4408	95	8302	19.44	-1.5	1041
4420	90	8307	19.9	-0.1	1155
4432	85	8291	18.81	2.3	1283

TABLEAU 5.8 – Points de trajectoire du module AS-202 sélectionnés pour les simulations SPARTA

Pour ces simulations, les conditions atmosphériques à l'infini amont sont les mêmes que celles utilisées dans l'étude d'Apollo 6 (Tableau 5.5). La température de paroi est supposée constante et homogène, calculée à partir d'une *bridging function* (voir chapitre 7) entre la valeur calculée à l'équilibre radiatif en régime moléculaire libre et en régime continu. Bien que l'hypothèse d'une



(a) Evolution de l'angles d'incidence  $\alpha$  et de dérapage  $\beta$  en fonction du temps (b) Evolution de l'altitude et de la vitesse en fonction du temps

FIGURE 5.12 – Données de trajectographie du module AS-202

température constante homogène soit assez commune en DSMC, elle est peut-être inappropriée en raison de la forte inhomogénéité du champ de température entre la face avant et les parties à l'ombre. L'influence de la température de paroi est donc elle aussi discutée dans l'analyse des résultats. Contrairement à l'hypothèse de Wright [12] pour l'étude du régime continu, la paroi est ici supposée non catalytique. En effet, en régime transitionnel, au niveau de l'arrière-corps de la capsule, les espèces diatomiques sont très peu dissociées. Aussi, le pouvoir catalytique de la paroi a localement peu, voire pas d'influence sur les flux de chaleurs pariétaux calculés dans cette zone.

Pour les calculs, la même géométrie simplifiée et le même maillage (Figure 5.8) que ceux utilisés dans le cadre de l'étude d'Apollo 6 ont été employés. En effet, le logement ombilical est situé sur le côté opposé à celui où se trouve la grande majorité des capteurs. De plus, le petit profil des antennes est tel que leur effet est jugé négligeable.

### 2.3.3 Paramètres numériques des simulations

Les simulations DSMC ont été réalisées avec les mêmes modèles que ceux utilisés pour l'étude du module Apollo 6. Les conditions numériques sont données dans le tableau 5.9. Le domaine de calcul est pris suffisamment grand pour que les valeurs aux conditions aux limites externes coïncident avec les conditions d'atmosphère. De plus, une attention particulière a été portée au respect des métriques DSMC jusqu'à 95 km. Pour les points de vol à 90 et 85 km, bien que les capacités du supercalculateur aient été poussées jusqu'à leurs limites, le critère de validité en espace ne fut pas atteint. Contrairement aux calculs de la section précédente, on remarque qu'ici le nombre de particules est supérieur ou égal à 500 millions même pour les altitudes supérieures à 100 km. Si ce choix peut paraître surprenant a priori, il vient du fait que le flux de chaleur est une grandeur locale statistiquement plus sensible que les grandeurs globales telles que les coefficients aérodynamiques. Afin de minimiser le bruit statistique, il est donc nécessaire d'utiliser un nombre de particules numériques assez grand pour que suffisamment de particules soient présentes dans l'ensemble des cellules du domaine y compris dans les zones les plus raréfiées (*i.e.* dans les cellules adjacentes à l'arrière corps). Un autre moyen mis en œuvre pour réduire le bruit est d'effectuer l'échantillonnage des propriétés surfaciques sur un grand nombre d'itérations.

### 2.3.4 Analyse des résultats

L'observation des lignes de courant sur la Figure 5.13 montre que l'écoulement reste attaché jusqu'à 95 km (Figure 5.13b) et se détache entre les altitudes de 95 et 90 km (Figure 5.13c). Toutefois, pour les altitudes considérées, le nombre de Reynolds le plus élevé vaut environ 19000

Altitude (km)	$\lambda_\infty/\Delta_{x,y,z}$	Raffinement	$N_p \times 10^{-6}$	$\tau_{\text{coll}}/\Delta t$
110	3.7	Oui	500	9.3
105	3.2	Oui	500	4.7
100	2	Oui	500	3.3
95	2	Oui	990	2.2
90	1	Non	1000	2.4
85	0.6	Non	1000	1.5

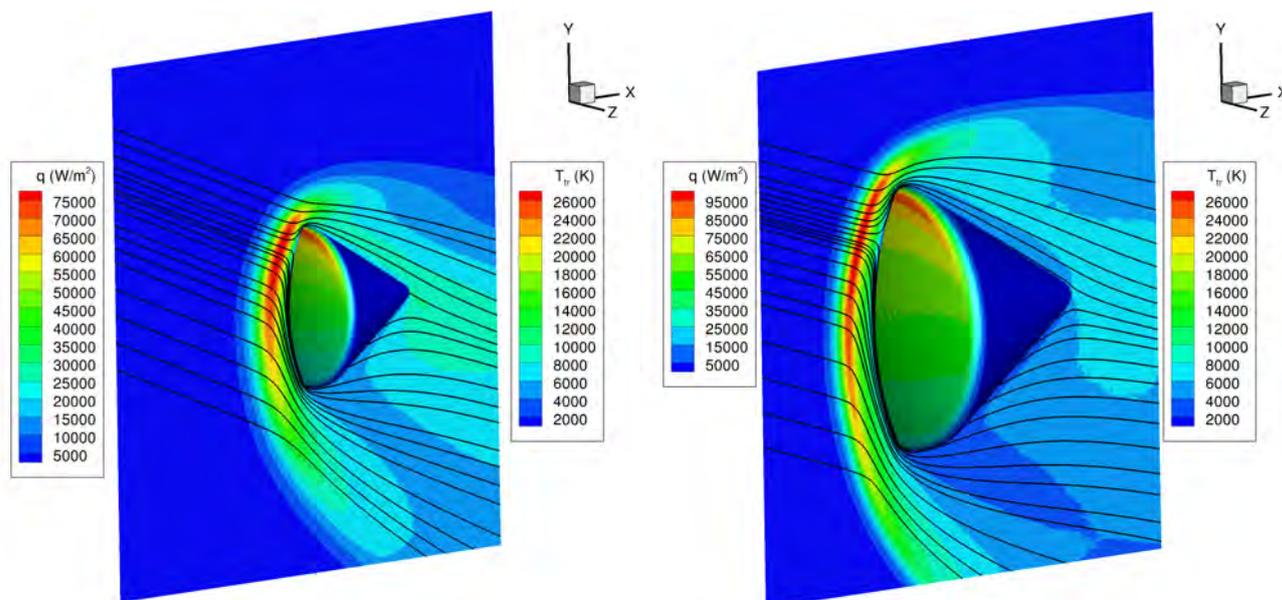
TABLEAU 5.9 – Paramètres numériques des simulations.

ce qui est inférieur à la valeur critique de 30 000 donnée par Wright [12] au delà de laquelle des effets de turbulences sont attendus.

Le module AS202 n'étant pas équipé de radiomètres, la part du flux de chaleur mesuré due au rayonnement de la couche de choc est indéterminée. Bien que les mesures des radiomètres des modules Apollo 4 et 6 aient indiqué que le flux de chaleur radiatif était négligeable [136], Johnston et Brandis [140] ont montré qu'en raison de la sensibilité des calorimètres et de la plage réduite de spectre mesurable, des flux radiatifs significatifs ont tout de même pu être reçus par la paroi de l'arrière-corps des modules Apollo 4 et 6. Toutefois, les conclusions de ce papier sont valables pour des vitesses de rentrée supérieures à 10 km/s. La vitesse d'entrée du module AS202 étant plus faible (environ 8.3 km/s), il semble raisonnable de considérer les effets radiatifs et d'ionisation comme négligeables. La pertinence de cette hypothèse a été confirmée numériquement grâce aux densités numériques d'oxygène O et d'azote N dans la couche de choc du module Apollo AS-202. En effet, pour la simulation à 85 km, les densités  $[n_N, n_O] = [2 \times 10^{14}, 1 \times 10^{14}]$  sont bien plus faibles que les valeurs caractéristiques  $[n_N, n_O] = [7.50 \times 10^{15}, 2.11 \times 10^{15}]$  données par Johnston et Brandis à  $T_{\text{tr}} = 5231$  K [140].

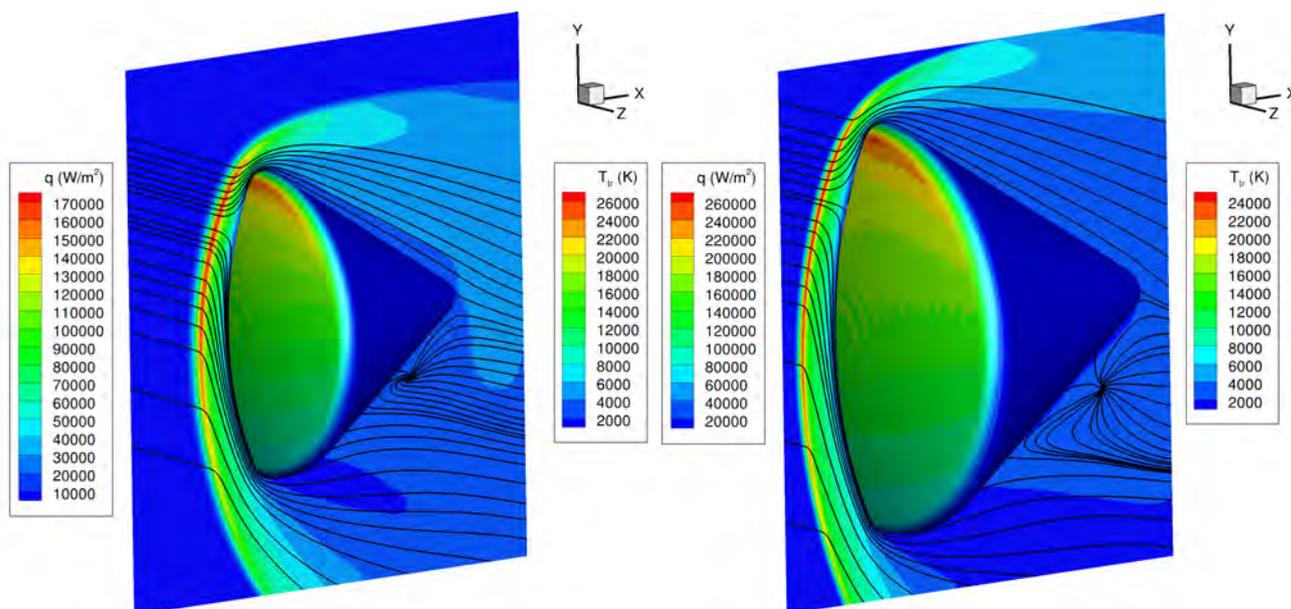
Les flux mesurés par les capteurs sont comparés aux flux de chaleur convecto-diffusifs obtenus avec **SPARTA** sur la Figure 5.14. L'analyse des courbes montre que pour les capteurs situés sur l'intrados du module, c'est-à-dire là où les flux de chaleur sur l'arrière-corps sont les plus sévères, un bon accord est observé entre les résultats numériques et les données de vol. Plus précisément, pour 14 des 19 capteurs, les résultats numériques sont dans l'intervalle d'incertitude de  $\pm 20\%$  associé aux mesures en vol. Les capteurs qui présentent les différences les plus marquées sont les capteurs **e**, **s**, **m**, **n** et **i**. Le colorimètre **e** est situé au niveau de l'apex ce qui signifie qu'une partie des différences observées peut être due aux différences géométriques entre la version simplifiée de l'apex et la géométrie réelle. Le calorimètre **s** est situé sur l'extrados de la capsule et est le symétrique du capteur **d** situé sur l'intrados. Cependant, les deux capteurs ont enregistré des flux du même ordre de grandeur. Cette observation est aussi valable pour le calorimètre **n**, symétrique du calorimètre **f**. De plus, les flux mesurés par le capteur **m** est significativement plus grand que ceux mesurés par les capteurs voisins **o** et **p** mais sont particulièrement proches des valeurs mesurées par le capteur **j** situé sur l'intrados. Cependant, en raison des forts angles d'attaque ( $18.81 \leq \alpha \leq 25.18$ ) pour les points de vol considérés, le champ de température et la topologie de l'écoulement autour de la capsule sont très différents entre l'intrados et l'extrados de l'arrière-corps (Figure 5.13). Il est donc difficile de comprendre pourquoi les flux de chaleur enregistrés par certains capteurs de l'intrados et de l'extrados sont équivalents. De telles anomalies pourraient indiquer que pour ces capteurs, l'incertitude de mesure dépasse la valeur estimée de 20%, qu'ils aient dysfonctionné pendant la partie raréfiée de la rentrée ou encore que leur limite de sensibilité ait été atteinte.

Pour le calorimètre **i**, les résultats numériques sous-estiment grandement les mesures. Cette différence peut s'expliquer par la position critique du capteur qui se situe au niveau de l'épaulement du module. A cet endroit, le flux de chaleur numérique varie fortement d'un élément du maillage surfacique à l'autre. A 85 km, le flux peut varier de  $0.7$  W/cm<sup>2</sup> jusqu'à  $1.3$  W/cm<sup>2</sup> pour deux éléments du maillage surfacique adjacents ce qui permet de relativiser le désaccord observé avec les mesures (Figure 5.14i).



(a) 100 km,  $Kn = 3.4 \times 10^{-2}$ ,  $M_\infty = 29.3$ ,  $Re_\infty = 1278$

(b) 95 km,  $Kn = 1.4 \times 10^{-2}$ ,  $M_\infty = 30$ ,  $Re_\infty = 3178$



(c) 90 km,  $Kn = 5.7 \times 10^{-3}$ ,  $M_\infty = 30.1$ ,  $Re_\infty = 7831$

(d) 85 km,  $Kn = 2.4 \times 10^{-3}$ ,  $M_\infty = 30.7$ ,  $Re_\infty = 18969$

FIGURE 5.13 – Champs de température, flux de chaleur et lignes de courant calculés par DSMC pour quatre points de vol de la rentrée du module Apollo AS-202

Pour certains capteurs, le flux de chaleur calculé diminue fortement à 85 km, induisant un flux de chaleur bien inférieur à celui qui est mesuré par les calorimètres à cette altitude. Cette tendance s'explique probablement par la convergence en espace qui n'est pas atteinte pour les raisons mentionnées précédemment. De plus, pour les altitudes les plus basses (à 90 et 85 km), l'écoulement est détaché et une zone de recirculation apparaît à l'extrados du module. Cette partie de l'écoulement est susceptible d'être instationnaire et la pertinence des résultats numériques à ces altitudes pourrait être confortée en utilisant une procédure d'échantillonnage plus longue que celle prise ici ou en procédant à des moyennes d'ensemble, c'est-à-dire en réalisant un grand nombre de simulations identiques et en moyennant les résultats.

Puisque les écarts observés entre les mesures et les calculs ne sont pas propres aux points de vol à 105 et 85 km d'altitude, où l'angle de dérapage est maximal, mais qu'ils sont aussi observés pour d'autres altitudes où l'angle de dérapage est très faible, il en est conclu que ce paramètre n'a qu'un faible impact sur les résultats.

Comme mentionné plus tôt, la température de paroi a été considérée constante et homogène. Toutefois, même en régime raréfié, la température de paroi est fortement inhomogène. Ainsi, pour l'altitude de 85 km, la formule de Sutton modifiée (avec un facteur correctif d'enthalpie) donne une température de paroi au point d'arrêt de  $T_w = 713$  K. Cette valeur est inférieure de 44% à la valeur utilisée pour les simulations DSMC. Ainsi, une nouvelle simulation a été faite avec cette température de paroi et des variations de flux de chaleur on été observées : environ 2% pour les capteurs **a**, **d**, **j**, **r** et jusqu'à 28% pour le capteur **e** situé à l'apex. Notons que de faibles variations de l'ordre de  $50 \text{ W/m}^2$  peuvent représenter des variations relatives de 10% pour certains capteurs. Pour des simulations complexes 3D, de tels écarts peuvent être le résultat du bruit statistique, il est donc difficile d'évaluer précisément l'influence qu'ont certains paramètres (la position du capteur et la sensibilité à la température de paroi) sur les résultats. Cependant, les écarts entre les deux simulations confirment que la température de paroi possède une influence non négligeable sur les flux de chaleur d'arrière-corps calculés. Le calcul de la température pariétale en faisant le bilan thermique à la paroi permettrait probablement d'obtenir de meilleurs résultats. Dans **SPARTA**, l'implémentation de cette fonctionnalité nécessite de synchroniser l'évolution de la température des éléments à travers les différents processeurs qui se partagent parfois certains éléments. L'ajout de cette fonction n'est donc pas triviale et est actuellement à l'étude au sein du laboratoire Sandia qui développe le code **SPARTA**.

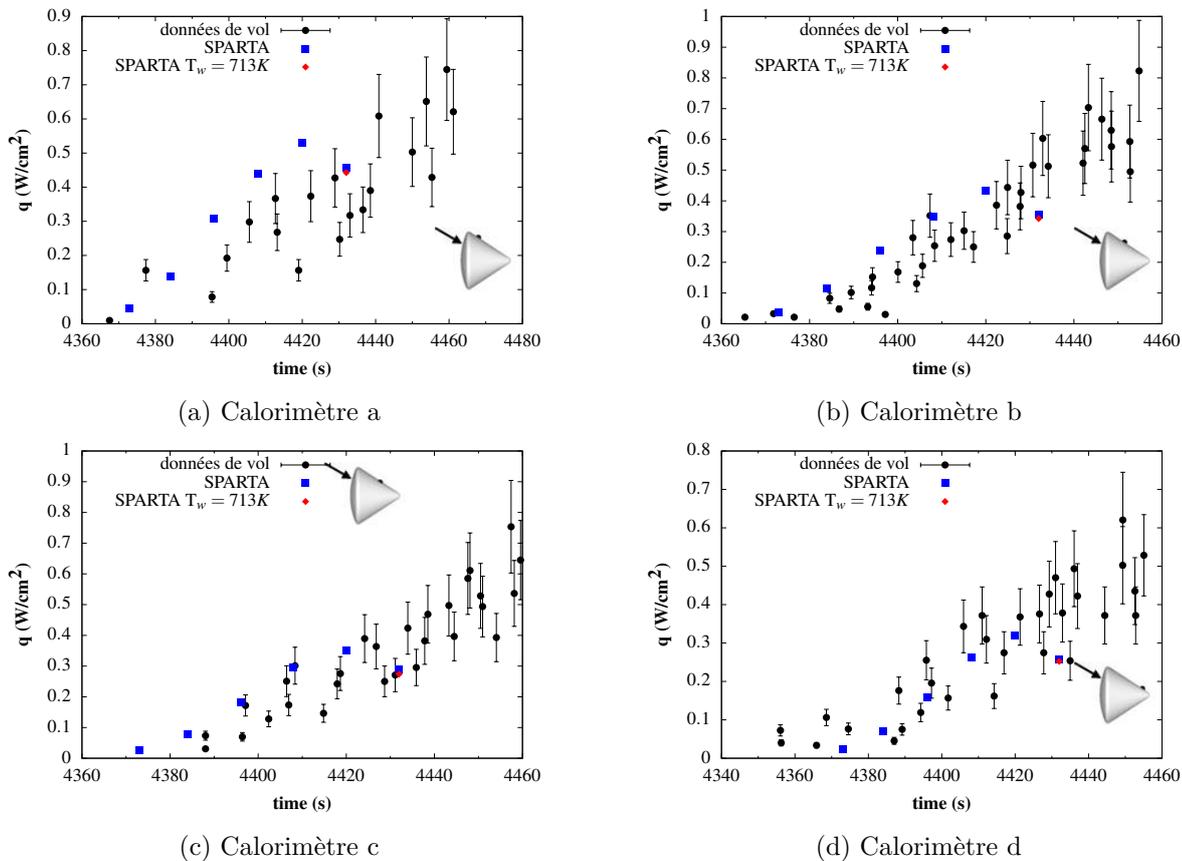


FIGURE 5.14 – Comparaison entre les résultats DSMC et les données de vol du module AS-202

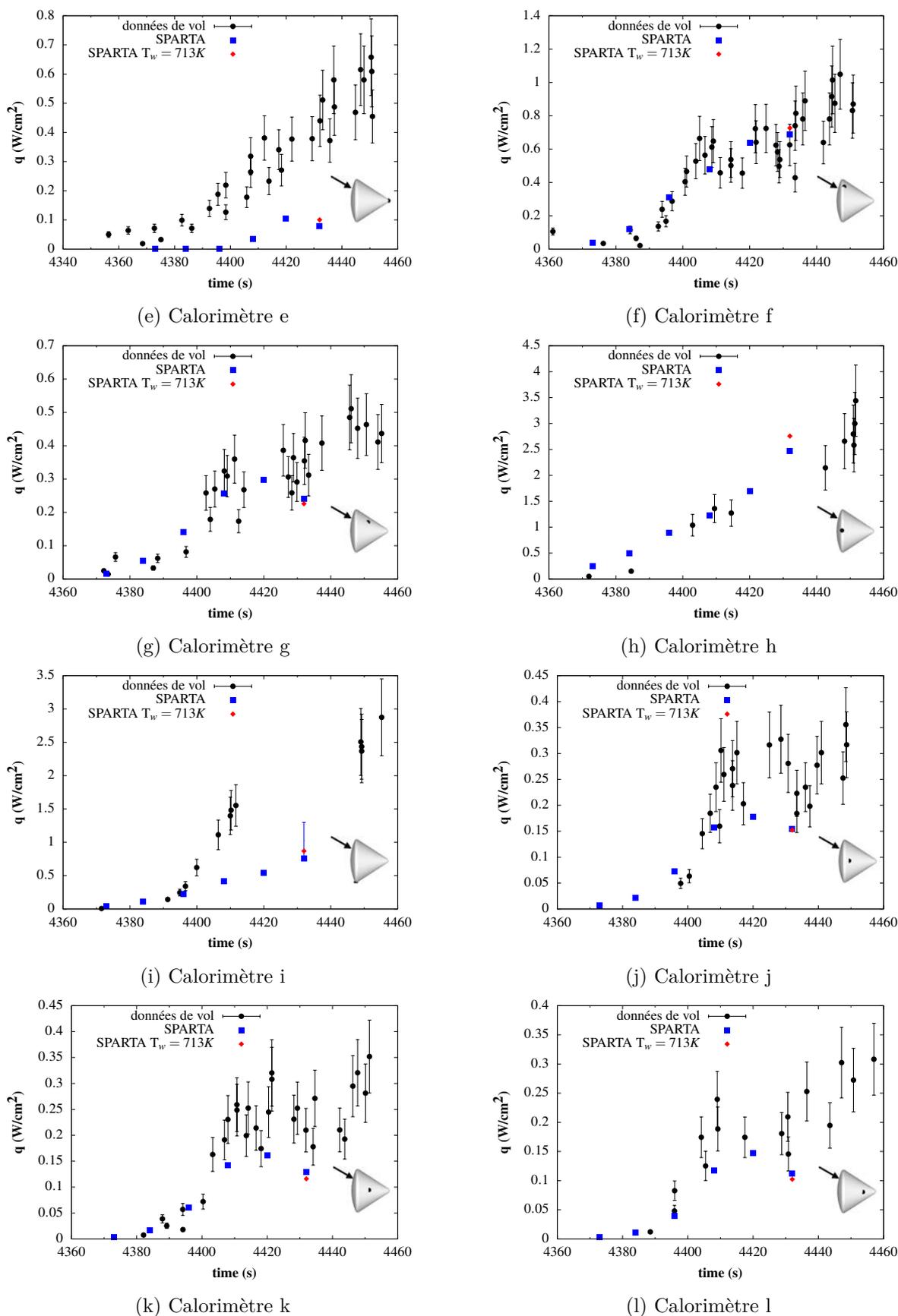


FIGURE 5.14 – Comparaison entre les résultats DSMC et les données de vol du module AS-202 (suite)

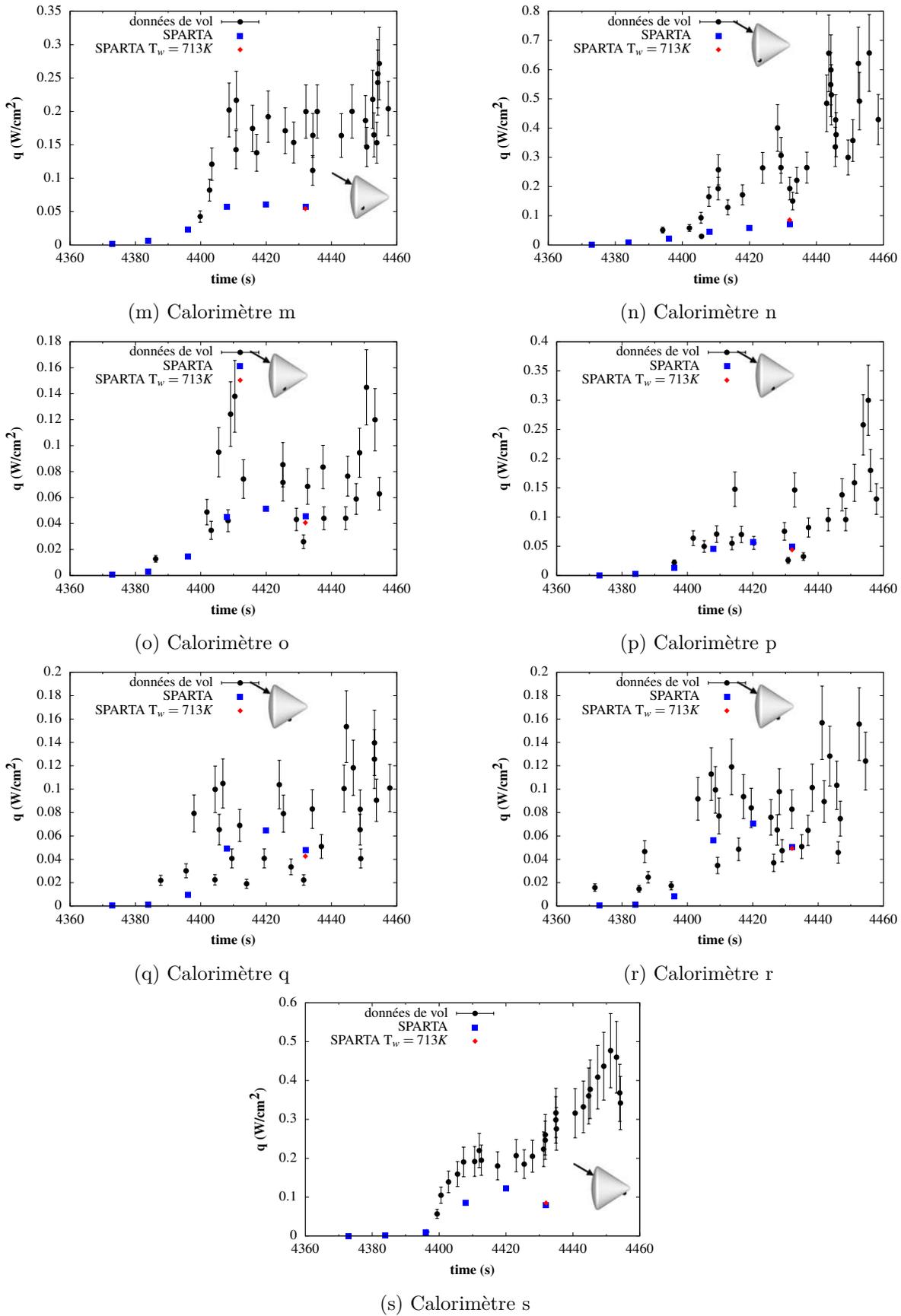


FIGURE 5.14 – Comparaison entre les résultats DSMC et les données de vol du module AS-202 (fin)

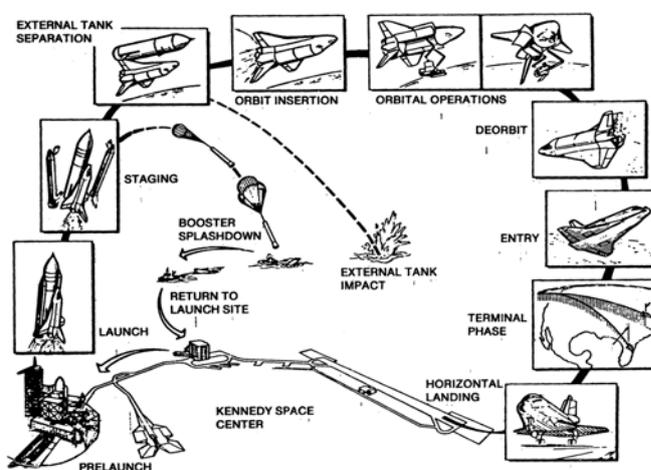
### 3 La navette spatiale américaine

#### 3.1 Structure et instrumentation de la navette

La navette spatiale américaine aussi connue en anglais sous le nom de Space Shuttle ou encore de Space Transportation System (STS) fut le premier véhicule spatial partiellement réutilisable en service entre 1981 et 2011. La flotte était composée de cinq systèmes de navettes : Columbia, Challenger, Discovery, Atlantis et Endeavour. Au total, près de 135 missions ont été réalisées par cette flotte que ce soit pour la construction de l'ISS, l'acheminement de spationautes et de matériels vers l'ISS, la réalisation d'expériences en orbite ou encore pour la mise en orbite de satellites. Le système de lancement de la navette se composait du véhicule, d'un réservoir et de propulseurs solides externes (Figure 5.15a) et permettait de transporter des charges utiles vers ainsi qu'en provenance d'une orbite terrestre basse. La navette était donc capable de réaliser des opérations orbitales complexes telles que des manoeuvres de rendez-vous ou de docking avant de quitter son orbite et d'effectuer un atterrissage à un endroit précis sur Terre [141] (Figure 5.15b).



(a) Lancement du vol STS-1 le 12 avril 1981 (crédit : NASA).



(b) Phases de mission nominales de la navette (extrait de [142]).

FIGURE 5.15 – Lancement et phases opérationnelles de la navette STS.

À l'origine, la navette fut pensée comme un système se comportant comme un véhicule spatial pendant la première partie de sa rentrée puis comme un avion sur la phase finale. Par conséquent, le développement de ce véhicule fut un challenge sans précédent, notamment du point de vue aérodynamique. En effet, le véhicule envisagé était statiquement instable pendant une partie de sa phase opérationnelle et la précision nécessaire pour être piloté en vol impliquait l'accès à des données aérodynamiques pre-flight précises [143]. La conception du système de protection thermique de la navette fut donc basée principalement sur des données obtenues en soufflerie complétées ensuite par des mesures obtenues lors de vols d'essai [144]. Finalement, le système de protection thermique de la navette fut composé d'une couche isolante réutilisable en un matériau carbone-carbone renforcé choisi pour sa capacité à supporter des fortes températures et sa faible masse volumique [145].

Lors de la rentrée de la navette, de nombreux phénomènes physiques complexes ont lieu dans l'écoulement (dissociation des molécules de l'air) ainsi qu'à la paroi (réactions chimiques de recombinaison liées au pouvoir catalytique de la paroi). Beaucoup d'efforts ont donc été menés dans le but de simuler ces différents phénomènes physiques et ainsi évaluer les flux de chaleur pariétaux reçus par la navette [24]. Pour valider l'approche numérique, les résultats CFD ont été comparés aux données de vol mesurées lors du Development Flight Investigation (DFI) [146]. La DFI consistait en une série de 200 thermocouples situés à l'intérieur du système de protection thermique. À partir de la température mesurée par chaque TC durant la rentrée, le flux de chaleur convecto-diffusif

reçu par la paroi est calculé par méthode inverse 1D [24]. Par ailleurs, la navette était également équipée d'une série d'accéléromètres linéaires utilisés pour l'expérience High Resolution Accelerometer Package (HiRAP) qui avait pour objectif de mesurer de manière précise les accélérations de faible amplitude ayant lieu le long des axes principaux de la navette lorsqu'elle se trouvait en régime raréfié [147, 148, 149].

### 3.2 Calculs DSMC et données de vol

La navette spatiale est un cas d'étude particulièrement riche puisque, pour ce véhicule, des données aérodynamiques et aérothermodynamiques sont disponibles. Malheureusement, la géométrie exacte de la navette n'est pas facilement accessible. De plus, en raison de la complexité de cette géométrie par rapport aux autres formes abordées jusqu'ici, il n'a pas été possible de la recréer de façon fiable pour la réalisation de calculs. Dans le cadre de travaux impliquant la NASA, plusieurs auteurs ont réalisé des calculs DSMC sur la navette spatiale pour reconstruire des mesures en vol et la DSMC a même été utilisée en support de l'enquête sur l'accident de la navette STS-107 [150].

Ainsi, Moss et Bird [38] se sont intéressés à la reconstruction DSMC des flux de chaleur mesurés au niveau du nez de la navette, pour des altitudes entre 92 et 150 km, dans les conditions données dans le Tableau 5.10. Pour ces calculs, seul le nez de la navette a été représenté. Sa forme a été

Altitude (km)	$\rho_\infty$ (kg/m <sup>3</sup> )	$U_\infty$ (km/s)	$T_\infty$ (K)	$X_{O_2}$	$X_{N_2}$	$X_O$	$Kn$
92.35	$2.184 \times 10^{-6}$	7.50	180	0.217	0.783	0	0.028
99.49	$5.906 \times 10^{-7}$	7.50	190	0.217	0.783	0	0.098
104.93	$2.457 \times 10^{-7}$	7.47	223	0.153	0.782	0.065	0.23
109.75	$1.146 \times 10^{-7}$	7.47	249	0.123	0.771	0.106	0.48
115	$4.380 \times 10^{-8}$	7.50	304	0.098	0.754	0.148	1.22
122.5	$1.790 \times 10^{-8}$	7.50	401	0.080	0.723	0.197	2.91
130	$8.230 \times 10^{-9}$	7.50	500	0.071	0.691	0.238	6.20
150	$2.140 \times 10^{-9}$	7.50	733	0.055	0.615	0.330	22.7

TABLEAU 5.10 – Conditions de vol de la navette STS (adapté de [38]).

approximée par un corps axi-symétrique équivalent constitué d'une hyperboloïde de rayon de nez  $R_n$  et de demi-angle  $\theta$ . Comme expliqué par Shinn [24], le concept de corps équivalent fut introduit par Adams *et al.* [151] qui ont obtenu un bon accord entre les flux de chaleur calculés et mesurés le long de la ligne centrale de la navette en incidence de 30°. Le même concept a ensuite été étendu par Zoby [152] pour un angle d'attaque variant entre 25 et 45°. Des informations complémentaires sur cette simplification géométrique, dont les valeurs des paramètres  $\theta$  et  $R_n$ , sont données dans [38].

Pour les simulations DSMC [38], le modèle VHS a été utilisé avec le modèle phénoménologique de Borgnakke-Larsen [69] pour les échanges d'énergie entre le mode de translation et les modes internes. Pour la simulation des réactions chimiques, le modèle TCE de Bird est utilisé avec un modèle d'air à 5 espèces et un total de 34 réactions.

Les résultats DSMC sont comparés aux données de vol et aux résultats numériques obtenus en régime continu [153]. La sensibilité au modèle d'interactions gaz-surface (accommodation thermique) ainsi qu'au pouvoir catalytique de la paroi est également étudiée dans [38] et discutée ci-dessous.

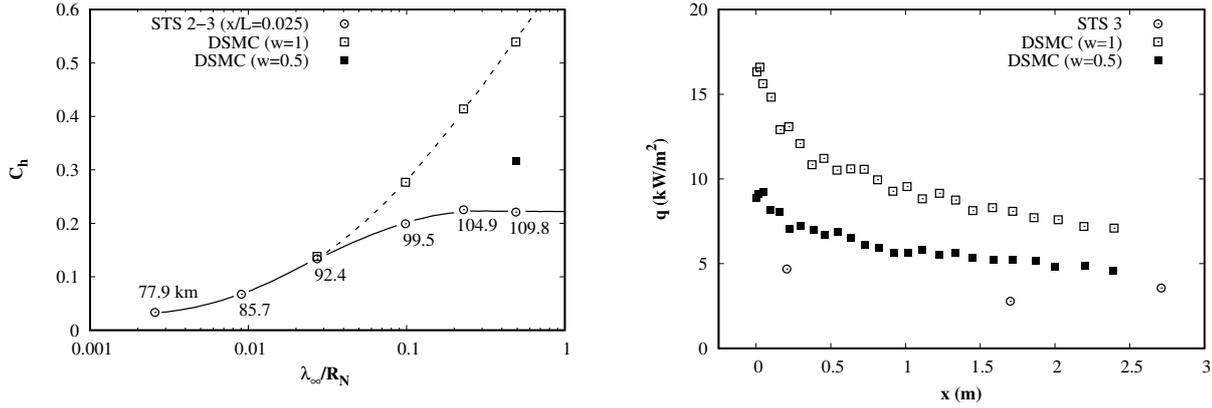
Sur la Figure 5.16a, le coefficient de transfert de chaleur  $C_h$  est tracé en fonction du nombre de Knudsen. Les résultats correspondent à la position  $x/L = 0.025$  où  $x$  est la distance depuis le nez et  $L = 32.9$  m est la longueur entre le nez et le début des gouvernes. Dans le repère de l'hyperboloïde (*i.e.* la géométrie équivalente simplifiée), cette position correspond à  $x = 0.2$  m. Les résultats DSMC et les données de vol sont en bon accord pour des altitudes inférieures ou égales à 92.35 km. Toutefois, les différences entre les résultats augmentent avec l'altitude. Ces disparités

sont aussi visibles sur la Figure 5.16b qui compare les données de vol et les résultats DSMC le long de la ligne centrale suivant la position  $x$  sur l'hyperboloïde à 110 km. Bien que l'écart s'atténue à mesure que  $x$  augmente, il reste significatif. Une explication possible avancée par les auteurs est que la réduction du flux de chaleur serait due à la modification de la composition chimique de l'écoulement résultant de l'injection d'un gaz en provenance de la paroi de la navette. Compte tenu de la nature du TPS [47, 154] et des faibles températures de paroi à 110 km, ce phénomène n'est probablement pas dû à la dégradation des protections thermiques mais pourrait être le résultat d'une décharge de carburant en provenance du nez lors de l'amorce de la rentrée [38]. Une autre explication serait que le coefficient d'accommodation thermique à la paroi choisi pour les simulations ne corresponde pas au coefficient réel. Contrairement à la première hypothèse, la deuxième a été étudiée et une simulation avec un coefficient d'accommodation de 50% a été faite. La diminution de la valeur du coefficient d'accommodation induit une réduction des différences entre les flux de chaleur calculés et mesurés, mais pas une annulation de ces écarts. Comme le précisent les auteurs, la correspondance des résultats n'a pas pu être atteinte pour des valeurs physiquement réalistes du coefficient d'accommodation. De plus, au-dessus de 100 km, la courbe expérimentale représentée sur la Figure 5.16a converge rapidement vers un plateau dont la valeur ne correspond pas à la valeur asymptotique du régime moléculaire libre. Il est donc possible que les écarts entre les mesures et les résultats numériques soient simplement dus à l'incapacité des thermocouples à mesurer des températures aussi faibles que celles de la paroi de la navette au-dessus de 100 km. Comme on le verra dans le chapitre 6, ces écarts pourraient également provenir d'une mauvaise connaissance des conditions atmosphériques.

Plus tard, Bird [16] et Rault [17] ont réalisé des simulations DSMC de l'écoulement autour de la forme 3D complexe de la navette. L'aérodynamique de la navette et les caractéristiques des écoulements mis en jeu ont été étudiés entre 170 et 120 km pour Bird et entre 170 et 100 km pour Rault. Bien que Bird ne donne pas de détails explicites sur les modèles DSMC utilisés, les simulations ont été réalisées par Bird et Rault avec le code DSMC **F3-code** dont les modèles sont explicités dans [17].

Sur la Figure 5.17, la finesse ( $L/D$ ) calculée par Bird entre 170 et 120 km est comparée aux résultats de l'expérience HiRAP de Blanchard. Entre 100 et 170 km, les résultats DSMC obtenus par les deux auteurs sont en bon accord avec les mesures en vol (incluant la plage d'incertitude). De plus, entre 150 et 130 km, un bon accord est observé entre les résultats numériques. Toutefois, à 120 km, une dispersion des données DSMC est relevée. Celle-ci est due au fait que les simulations de Bird ont été réalisées à une époque où les capacités de calcul étaient réduites. Ainsi le maillage et/ou les paramètres numériques utilisés ne sont sans doute pas suffisants pour garantir le respect des métriques de la DSMC. Les simulations de Rault étant plus récentes, les paramètres numériques choisis et décrits dans [17] lui ont permis de conserver un bon accord entre ses résultats et les données de vol jusqu'à une altitude de 100 km. Finalement, les différences entre les données en soufflerie et les données illustrées sur la Figure 5.17 montrent que les expériences en soufflerie n'ont pas réussi à recréer totalement les conditions rencontrées en vol par la navette. Cette incapacité des souffleries gaz-parfait à capturer l'aérodynamique de vol est un phénomène bien connu, établi au début des années 90 [155, 156].

Les simulations présentées dans ce paragraphe montrent comment l'évolution des ressources informatiques en à peine 4 ans (entre 1990 et 1994) a permis de réaliser des simulations plus complexes et plus précises. Depuis, les ressources informatiques n'ont cessé de croître permettant désormais d'envisager des simulations DSMC jusqu'à des altitudes inférieures à 100 km.



(a) Coefficient de transfert de chaleur  $C_h$  en fonction de  $Kn$  à  $x/L = 0.025$  (extrait de [38]). (b) Flux de chaleur le long de la ligne centrale de l'intrados à 109.75 km (extrait de [38]).

FIGURE 5.16 – Résultats ATD numériques et expérimentaux pour la navette spatiale américaine.

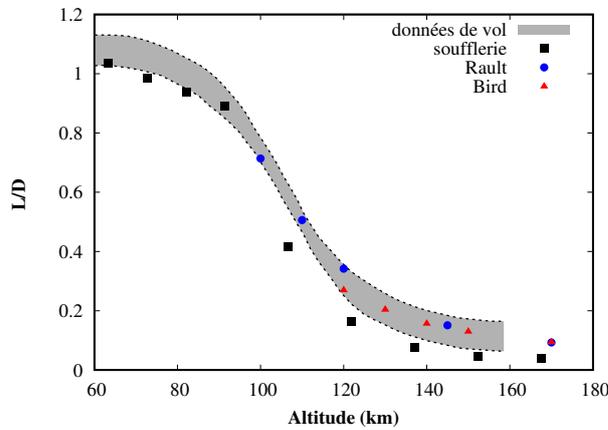


FIGURE 5.17 – Comparaison de résultats DSMC [16], [17] avec des résultats expérimentaux [18] et des données de vol [19] pour la navette spatiale américaine.

## 4 L'Orbital Reentry Experiment - OREX

### 4.1 Structure et instrumentation de la capsule

Le véhicule japonais OREX fut lancé le 4 février 1994 par une fusée H-II avant d'effectuer une manœuvre de désorbitation puis une rentrée balistique quelques heures plus tard [157]. Cette expérience constitue le premier vol d'une série de trois dans le cadre de la préparation du programme spatial japonais HOPE dont les deux objectifs étaient de rassembler des données de vol et de tester le système de protection thermique pour le véhicule HOPE [158]. La capsule OREX consiste en un sphère-cône de demi-angle de  $50^\circ$  dont le diamètre de base vaut 3.4 m et le rayon de nez 1.35 m (Figure 5.18). Le système de protection thermique se compose principalement d'une couche protectrice en carbone-carbone, d'une couche d'aluminium en nid d'abeille et de tuiles en céramique.

Les données aérothermiques du vol ont été enregistrées entre 120 et 40 km grâce à des capteurs situés sur l'avant de la capsule [158]. Parmi l'ensemble des données récoltées, les comparaisons avec les résultats DSMC se concentrent plus particulièrement sur les flux de chaleur reconstruits à partir des mesures de température au niveau du point d'arrêt, sur les pressions mesurées par les capteurs en hautes et moyennes altitudes ainsi que sur les accélérations enregistrées à l'aide de l'accéléromètre micro-g monté le long de l'axe de symétrie d'OREX.

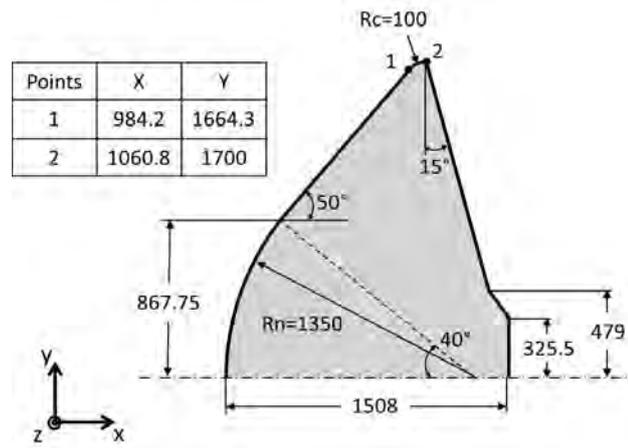


FIGURE 5.18 – Schéma de la configuration OREX (adapté de [20]). Dimensions en mm.

## 4.2 Calculs DSMC et données de vol

Gupta, Moss et Price ont publié leurs travaux sur la rentrée d'OREX dans deux papiers. Le premier [158], présente l'analyse des résultats obtenus avec un code de couche limite visqueuse Viscous Shock Layer (VSL) entre 105 et 48.4 km. Les résultats sont comparés aux données de vol sur toute la trajectoire ainsi qu'aux résultats de simulations DSMC pour des altitudes supérieures à 80 km. Ces derniers font l'objet du deuxième papier [20]. Dans cet article, des calculs entre 80 et 200 km sont présentés et comparés aux valeurs mesurées d'accélération axiale, de pression surfacique et de flux convecto-diffusif au point d'arrêt. Les simulations DSMC 2D axi-symétriques ont été réalisées avec un modèle de collision VHS et un modèle d'air à 5 espèces. Les modes internes de vibration et de rotation ont été activés et les échanges d'énergie sont effectués avec le modèle Borgnakke-Larsen [69]. Des nombres de collision  $Z_{rot}$  et  $Z_{vib}$  constants de respectivement 5 et 50 ont été utilisés. Pour les calculs, le modèle d'interactions gaz-surface est le modèle de Maxwell avec accommodation thermique complète et la paroi est supposée catalytique. De plus, pour les altitudes supérieures à 105 km, la température de paroi est supposée constante  $T_w = 331.8$  K tandis que pour les altitudes inférieures, le calcul du bilan thermique à la paroi permet d'obtenir une distribution de température pariétale [20]. Les conditions atmosphériques utilisées et les résultats DSMC obtenus sont tabulés dans [20].

Les résultats du flux de chaleur au point d'arrêt sont donnés sur les Figures 5.19a et 5.19b. L'évolution du coefficient de flux de chaleur ( $C_h$ ) en fonction de l'altitude est en bon accord avec celui mesuré en vol. Toutefois, des écarts importants entre les  $C_h$  calculés et mesurés sont relevés pour des altitudes supérieures à 95 km. En particulier, un écart relatif maximal de 35% est observé à 100 km entre le résultat DSMC et la donnée de vol. Les auteurs précisent que le pouvoir catalytique de la paroi n'a que très peu d'influence sur les résultats entre 105 et 79.9 km. L'hypothèse de paroi totalement catalytique prise pour les simulations n'est donc pas responsable des écarts observés avec les mesures.

Afin d'étudier l'écart entre les résultats numériques et expérimentaux, trois altitudes critiques ont été sélectionnées (Tableau 5.11) et des calculs 3D ont été réalisés avec **SPARTA**. Pour chaque point de vol, une procédure de raffinement adaptatif est utilisée et les paramètres numériques sont résumés dans le Tableau 5.12. Pour ces calculs, la température de paroi est supposée constante, le nombre collisionnel de vibration est calculé à partir de la formule de Millikan-White et deux coefficients d'accommodation de respectivement 0.8 et 1 ont été testés. Les autres paramètres ont été pris égaux à ceux de Moss. Ces nouveaux résultats DSMC sont présentés sur la Figure 5.19b où ils peuvent être comparés à ceux de Moss et aux données de vol. En supposant la paroi diffuse avec accommodation complète (*i.e.*  $w = 1$ ), des résultats quasi-identiques à ceux de Moss ont été obtenus. Avec un coefficient d'accommodation  $w = 0.8$ , la différence avec les données de vol diminue d'environ 10% pour les altitudes de 105 et 101 km. Toutefois, pour l'altitude de 96.8 km, l'influence

de ce paramètre est trop faible pour être visible sur la Figure 5.19b. Ces résultats montrent donc que le coefficient d'accommodation joue un rôle significatif au-dessus d'un certain niveau de raréfaction seulement ; ici en l'occurrence pour des altitudes supérieures à 100 km (*i.e.*  $Kn > 3 \times 10^{-2}$ ).

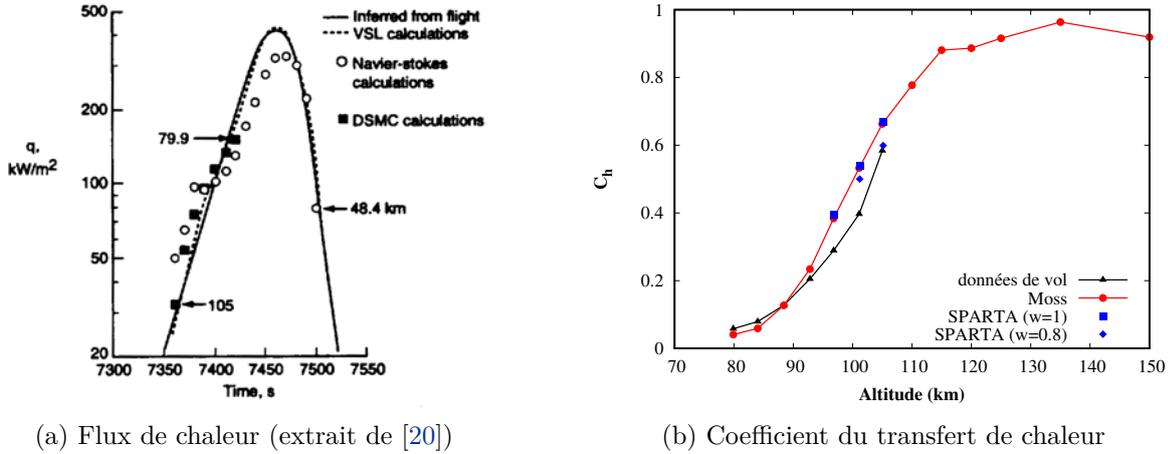
Alt. (km)	$U_\infty$ (m/s)	$n_\infty$ (m <sup>-3</sup> )	$T_\infty$ (K)	$T_w^a$ (K)	$Kn$	$X_{O_2}$	$X_{N_2}$	$X_O$
105	7451	$5.0515 \times 10^{18}$	211	331.8	0.0718	0.1528	0.7815	0.0657
101.1	7454.6	$1.0326 \times 10^{19}$	196.9	401.5	0.0346	0.1726	0.7839	0.0435
96.8	7456.3	$1.9812 \times 10^{19}$	190.3	485.2	0.0179	0.1884	0.7863	0.0253

<sup>a</sup> Température au point d'arrêt obtenue par simulations CFD pour les altitudes inférieures ou égales à 105 km.

TABLEAU 5.11 – Conditions atmosphériques pour les simulations OREX (adapté de [20]).

Altitude (km)	$\lambda_\infty/\Delta_{x,y,z}$	Nombre de particules	$\tau_{coll}/\Delta t$
105	4.8	$450 \times 10^6$	3.6
101.1	3.4	$530 \times 10^6$	3
96.8	3	$590 \times 10^6$	2.6

TABLEAU 5.12 – Paramètres numériques des simulations **SPARTA** pour trois points de vols de la trajectoire d'OREX.

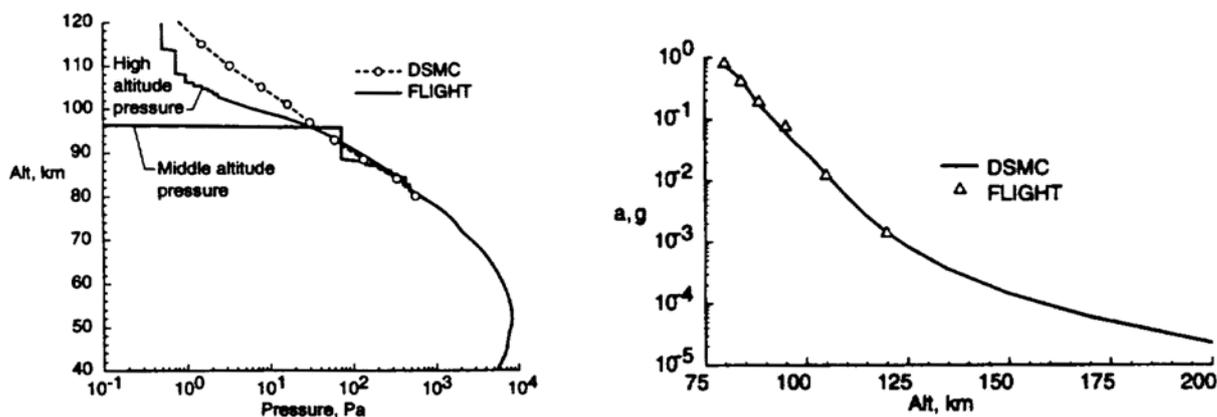


(a) Flux de chaleur (extrait de [20])

(b) Coefficient du transfert de chaleur

FIGURE 5.19 – Comparaison des mesures ATD et des résultats DSMC au point d'arrêt de la capsule OREX (Figure (a) extraite de [20]).

Pendant la rentrée d'OREX, deux types de mesures de pression ont été effectuées [20]. Pour les altitudes inférieures à 95 km, les pressions de surface calculées par DSMC s'accordent bien avec les mesures. Pour des altitudes supérieures à 95 km, l'écart entre les pressions mesurées et calculées augmente avec l'altitude (Figure 5.20a). D'après Moss et Bird, ce comportement s'explique par l'état de déséquilibre thermo-chimique élevé au niveau de l'orifice d'entrée et le long du tube de connexion vers le transducteur de pression. En effet, les travaux présentés dans l'article [159] des mêmes auteurs montrent que pour un tel système de mesure, les effets de raréfaction se traduisent par la mesure d'une pression plus faible à l'intérieur du tube que celle effective au niveau de la surface extérieure du véhicule. Finalement, l'accélération calculée numériquement à partir du coefficient de traînée pour une capsule de masse supposée constante  $m = 761$  kg et pour une surface de référence  $S_{ref} = 9.0792$  m<sup>2</sup> est en excellent accord avec les données de vol (Figure 5.20b).



(a) Comparaison de la pression numérique et expérimentale à l'avant de la capsule (extrait de [20]).

(b) Comparaison de l'accélération numérique et expérimentale (extrait de [20]).

FIGURE 5.20 – Comparaison des mesures de pression et d'accélération avec les résultats DSMC pour la capsule OREX (extrait de [20]).

En conclusion, la correspondance entre les résultats des calculs DSMC et les données de vol d'OREX est bonne dans l'ensemble. De plus, pour une grande partie du régime transitionnel, les flux de chaleur mesurés lors de la rentrée d'OREX ne sont pas modifiés par les phénomènes associés à l'ablation de la paroi, ce qui facilite grandement l'exploitation des données. Moss *et al.* [20] concluent leur papier dans l'expectative de données aérodynamiques complémentaires mais aucune donnée ni résultat calcul supplémentaire en régime raréfié n'ont été publiés pour OREX depuis.

## 5 Résumé

Bien que l'obtention de données ATD en régime raréfié ne soit pas l'objectif premier des véhicules de rentrée instrumentés, certaines mesures effectuées peu après le franchissement du point d'entrée permettent tout de même d'accéder à des données en haute altitude. Ainsi, des flux d'arrière-corps mesurés sur les modules Mercury et Apollo ont été extraits et confrontés à des résultats de calculs DSMC. Les vols OREX et STS ont également permis de mesurer expérimentalement certaines grandeurs aérodynamiques. Dans l'ensemble, un bon accord a été obtenu au niveau des grandeurs aérodynamiques mais la faible quantité de données aérodynamiques et les tendances contradictoires ne permettent pas de conclure quant aux capacités de la DSMC à reproduire fidèlement les flux de chaleur mesurés. Par ailleurs, comme l'ont montré les calculs sur la navette spatiale, l'amélioration des moyens informatiques au cours du temps a permis d'accroître les capacités de la DSMC et les simulations **SPARTA** ont montré qu'une meilleure compréhension et modélisation des interactions gaz-surface pourraient conduire à l'obtention de résultats plus proches des mesures pour les altitudes les plus hautes, notamment grâce au coefficient d'accommodation et à l'utilisation d'une température de paroi non uniforme. Les simulations DSMC ont également montré les limites de la méthode dans des conditions trop proches du régime continu.

Parmi les résultats discutés dans ce chapitre, le flux de chaleur s'est imposé comme la grandeur la plus difficile à reproduire de manière entièrement satisfaisante. Plusieurs pistes d'amélioration ont été envisagées et bon nombre d'interrogations subsistent aussi bien sur les données que sur les modèles DSMC qui peinent à les reproduire. Afin d'essayer d'éclairer les zones d'ombre restantes, le prochain chapitre porte sur la confrontation de la DSMC aux données obtenues lors de la rentrée récente (2015) de l'IXV.



# Chapitre 6

## Simulation et analyse post-flight de la portion raréfiée de la rentrée de l'IXV

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Présentation de la mission et du véhicule</b>	<b>136</b>
1.1	Trajectoire et paramètres de vol	136
1.2	Objectifs de la mission	137
1.3	Le système de protection thermique	138
1.4	L'instrumentation du véhicule	138
<b>2</b>	<b>Exploitation des données de vol par méthode inverse</b>	<b>140</b>
2.1	Principe de la méthode inverse	140
2.2	Application à la rentrée de l'IXV	141
2.3	Sensibilité et incertitude de la méthode inverse	142
<b>3</b>	<b>Les modèles d'atmosphère : sensibilité et incertitude</b>	<b>142</b>
3.1	Les modèles d'atmosphère principaux	142
3.2	Sensibilité et incertitude du modèle MSISE-00	144
<b>4</b>	<b>Paramètres numériques pour la simulation de la rentrée de l'IXV en régime raréfié</b>	<b>147</b>
4.1	Simulations DSMC	147
4.2	Simulations CFD	151
<b>5</b>	<b>Analyse des résultats DSMC</b>	<b>152</b>
5.1	Analyse de l'écoulement	152
5.2	Analyse des résultats aérodynamiques	155
5.3	Analyse des résultats aérothermodynamiques	159
<b>6</b>	<b>Analyse des résultats CFD versus DSMC</b>	<b>168</b>
6.1	Comparaison des champs DSMC et CFD à 90km	168
6.2	Analyse des résultats aérodynamiques	171
6.3	Analyse des résultats aérothermodynamiques	172
<b>7</b>	<b>Influence du modèle d'atmosphère sur les grandeurs aérothermodynamiques</b>	<b>175</b>
7.1	Le modèle MSIS 2.0	175
7.2	Simulation du flux de chaleur avec le modèle MSIS 2.0	175
<b>8</b>	<b>Résumé</b>	<b>180</b>

---

**Introduction :** Suite à la rentrée de l'IXV en 2015, les travaux d'exploitation des données de vol réalisés à l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales (ONERA) ont permis de reconstruire les flux de chaleur subis par l'IXV depuis le point d'entrée situé à environ 120 km d'altitude, jusqu'à son amerrissage. Ces données de vol constituent donc une source de confrontation unique des méthodes numériques pour la simulation d'écoulement de rentrée. Afin de poursuivre l'évaluation de la méthode DSMC, on s'intéresse dans ce chapitre à la reconstruction numérique des flux de chaleur subis par l'IXV entre 120 et 90 km. Ainsi, le véhicule et sa mission sont d'abord décrits puis le processus de reconstruction des flux de chaleur par méthode inverse est présenté. En raison de l'importance des données atmosphériques pour la reconstruction des données de vol, une discussion sur les problématiques d'incertitude et de sensibilité des modèles d'atmosphère est également menée. Ensuite, l'influence de plusieurs modèles numériques de la DSMC et de l'incertitude sur la masse volumique est analysée de manière approfondie à la lumière d'un calcul CFD réalisé à 90 km et des mesures expérimentales. Finalement, suite à la récente publication d'une nouvelle version du modèle d'atmosphère **MSIS** utilisé pour estimer la masse volumique et compte tenu de son importance pour la reconstruction du flux de chaleur, une série de calculs complémentaires a été réalisée en utilisant avec la version **MSIS 2.0**.

## 1 Présentation de la mission et du véhicule

Le projet Intermediate eXperimental Vehicle (IXV) est né dans les années 2000 de la volonté de l'Europe d'affirmer sa position et ses ambitions en terme de transport spatial [22]. Après un appel à projets portant sur la forme du véhicule et lancé par l'Agence Spatiale Européenne (ESA), c'est finalement la forme du Pre-X [160] proposée par Dassault Aviation qui est retenue en 2007 (Figure 6.1). Suite à une réorganisation industrielle du projet, l'entreprise Thales Alenia Space Italy (TASI) est nommée maître d'œuvre du projet en 2010. La progression des activités industrielles a ensuite permis d'avancer dans les différentes phases du projet jusqu'à l'accomplissement des dernières activités d'intégration et de qualification du véhicule en 2014. Suite à la suspension temporaire du projet pour consolider certains aspects de sécurité du lanceur, le lancement prévu initialement courant novembre 2014 fut reporté au mois de février 2015.

### 1.1 Trajectoire et paramètres de vol

L'IXV a finalement été lancé le 11 février 2015 par un lanceur VEGA depuis le pas de tir de Kourou en Guyane française (Figure 6.2). Le véhicule a ensuite effectué un vol d'un peu plus de 30 000 km, dont environ 7000 km en atmosphère chaude et en pilotage automatique, de façon nominale jusqu'à son amerrissage dans l'Océan Pacifique. Les paramètres comme la position au point d'entrée prévus et effectifs sont résumés dans [161] tandis que les paramètres de vol pour la partie raréfiée sont donnés dans le tableau 6.1.

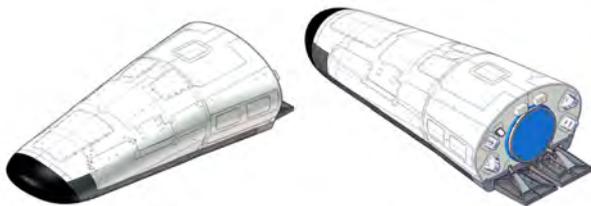


FIGURE 6.1 – Configuration de l'IXV [21]

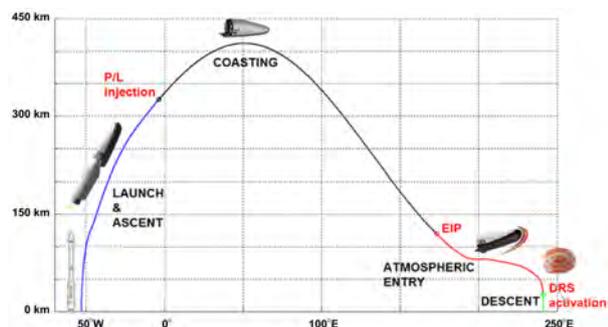


FIGURE 6.2 – Résumé de la mission IXV [22]

De plus, comme l'explique Van Ghele [47], la trajectoire de l'IXV est particulièrement proche de certaines missions de la navette spatiale américaine. Ces similarités entre les trajectoires sont

illustrées sur la Figure 6.3 et justifient d'analyser les données de vol de l'IXV à la lumière des mesures obtenues pour la navette spatiale américaine et ce malgré la différence de taille entre les deux véhicules.

t (s)	Alt. (km)	$U_\infty$ (km/s)	AoA ( $^\circ$ )	AoS ( $^\circ$ )	AoF ( $^\circ$ )
3933	115	7.44	46.96	0.31	15
3968	110	7.45	45.45	-0.98	15
4005	105	7.46	44.51	0.34	15
4045	100	7.46	46.12	0.59	15
4087	95	7.46	46	-0.09	15
4134	90	7.46	46.94	-0.46	15

AoA, AoS et AoF désignent respectivement l'angle d'attaque, l'angle de dérapage and l'inclinaison des gouvernes.

TABLEAU 6.1 – Paramètres de vol communiqués par Thales Alenia Space Italy

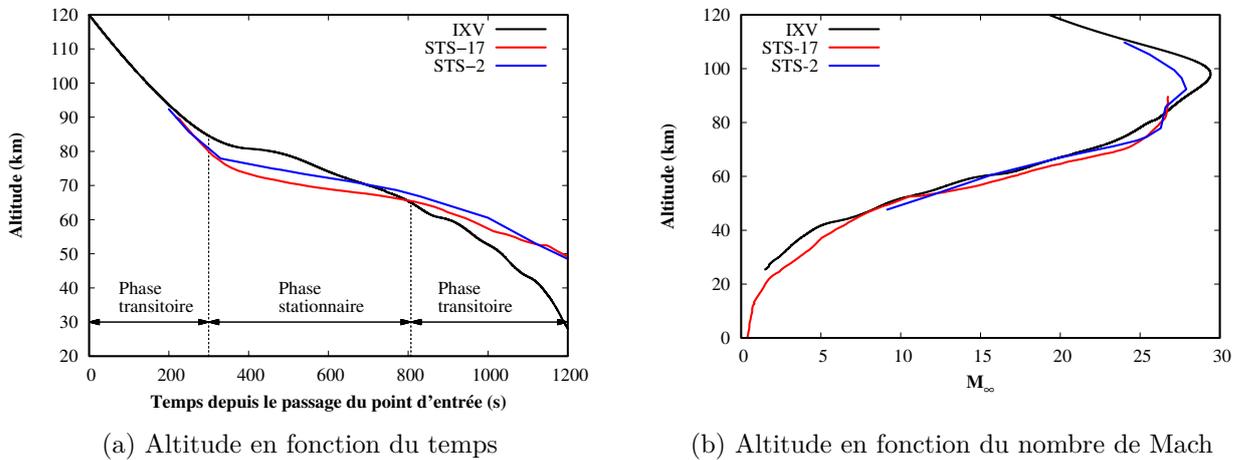


FIGURE 6.3 – Comparaison des trajectoires de rentrée de l'IXV [23], STS-2 [24] et STS-17 [25].

## 1.2 Objectifs de la mission

Comme son nom l'indique, l'Intermediate eXperimental Vehicle a été conçu comme l'élément intermédiaire capable d'effectuer un pas en avant par rapport à l'Atmospheric Reentry Demonstrator (ARD) lancé en 1998. L'IXV vise à tester la manœuvrabilité du système tout en vérifiant les performances des technologies embarquées pour un couloir de rentrée plus large que celui de l'ARD. Les objectifs de la mission sont donc multiples : la conception, le développement, la fabrication, l'assemblage et la vérification au sol et en vol d'un système de rentrée autonome européen portant et aérodynamiquement contrôlé qui intègre des technologies critiques de rentrée [22].

Pour cela, plusieurs expériences en vol ont été choisies parmi une variété de propositions européennes. Le plan d'expériences se divise en deux parties. La première a pour but d'étudier les phénomènes aérothermiques grâce à un ensemble d'expériences aérodynamiques et aérothermodynamiques. Parmi elles, on peut mentionner les expériences visant à évaluer les phénomènes physiques suivants [26] :

- Efficacité et aérothermodynamique des gouvernes,
- Interactions choc-choc,
- Interaction choc-couche limite (SWBLI),
- Transition laminaire-turbulent (LTT),
- Aérodynamique des régimes continu et raréfié,

- Comportement des matériaux catalytiques (CATE),
- Effets de gaz réel.

La deuxième partie du plan d'expériences porte sur l'étude du système de protection thermique et plus particulièrement sur la validation de ses capacités isolantes ainsi que de ses performances mécaniques pendant la rentrée.

Pour ce vol expérimental, l'objectif sous-jacent était d'obtenir une réduction mesurable des incertitudes actuelles pour la conception de systèmes de rentrée atmosphérique futurs comme le Space Rider [162].

### 1.3 Le système de protection thermique

Les parties constitutives du Système de Protection Thermique (TPS) sont représentées sur la Figure 6.4a. La partie supérieure (« leeward »), les panneaux latéraux et la base sont faits de matériaux ablatifs dont les étapes de conception, de qualification et d'intégration sont présentées dans [163]. Les parties à l'intrados qui comprennent le nez et le ventre (« windward ») sont faites respectivement d'une unique pièce et d'un assemblage de 30 tuiles (Figure 6.4b). Pour ces deux parties, la structure du TPS se divise en trois composants de fonctions distinctes. A l'extérieur, une fine coque en Carbon-Silicium Carbide (C-SiC) qui est un matériau Composite à Matrice Céramique (CMC) résistant aux importantes sollicitations mécaniques permet de maintenir la forme aérodynamique du véhicule. En-dessous, des couches de matériaux isolants permettent de protéger les parties froides des fortes températures rencontrées durant la rentrée. Sous ces isolants, un système de fixation assure la cohésion de l'ensemble et son attachement à la structure interne du véhicule [164]. Le développement ainsi que la qualification thermique et dynamique des protections thermiques en C-SiC sont présentés par Buffenoir dans les articles [165] et [166]. La charnière (« hinge ») est également recouverte d'une couche de C-SiC et les gouvernes (« flaps ») sont faites entièrement en un matériau Keraman C-SiC [23].

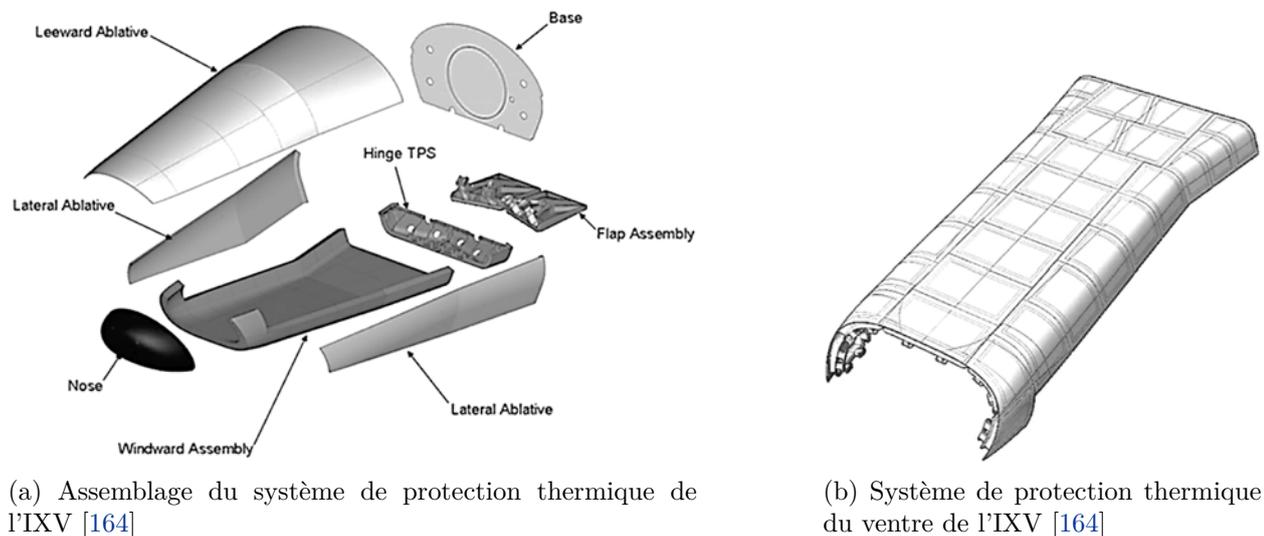


FIGURE 6.4 – Système de protection thermique de l'IXV

### 1.4 L'instrumentation du véhicule

Pour atteindre les objectifs de la mission, les expériences en vol ont nécessité la mise en place d'une instrumentation complexe. Ainsi, le véhicule a été équipé de 37 ports de pression, de 194 Thermo-Couples (TC), de 12 capteurs de déplacement, de 48 jauges d'effort et d'une caméra Infra-Rouge (IR) [26]. Parmi ces capteurs, 34 TC et 6 jauges de déplacement servent à observer les zones de transition laminaire-turbulent (Figure 6.5a). Deux patchs catalytiques et 30 TC ont pour but d'analyser le comportement catalytique des matériaux céramique (Figure 6.5b). Pour l'expérience

sur les phénomènes d'interactions entre la couche limite et la couche de choc, 21 TC et 4 capteurs de pression ont été placés à l'intrados, sur la partie arrière du ventre et sur les gouvernes du véhicule (Figure 6.5c).

La répartition globale des TC sur l'intrados du véhicule est illustrée sur la Figure 6.5d. Afin d'avoir accès à une distribution précise de température en temps réel au niveau des gouvernes, une caméra infra-rouge a été montée (Figure 6.6a) en complément de TC (Figure 6.6b). Tous les thermocouples positionnés sur l'intrados du véhicule sont des TC de type S, capables de mesurer des températures comprises entre 273.15 et 1823.15 K avec une précision de 0.5%. Le système de mesure de pression a été conçu pour supporter de fortes températures et pour être sensible à des pressions inférieures à 10 hPa. Le système est constitué de transducteurs de pression Kulite conçus sur mesure, d'une ligne pneumatique et de ports de pression [26].

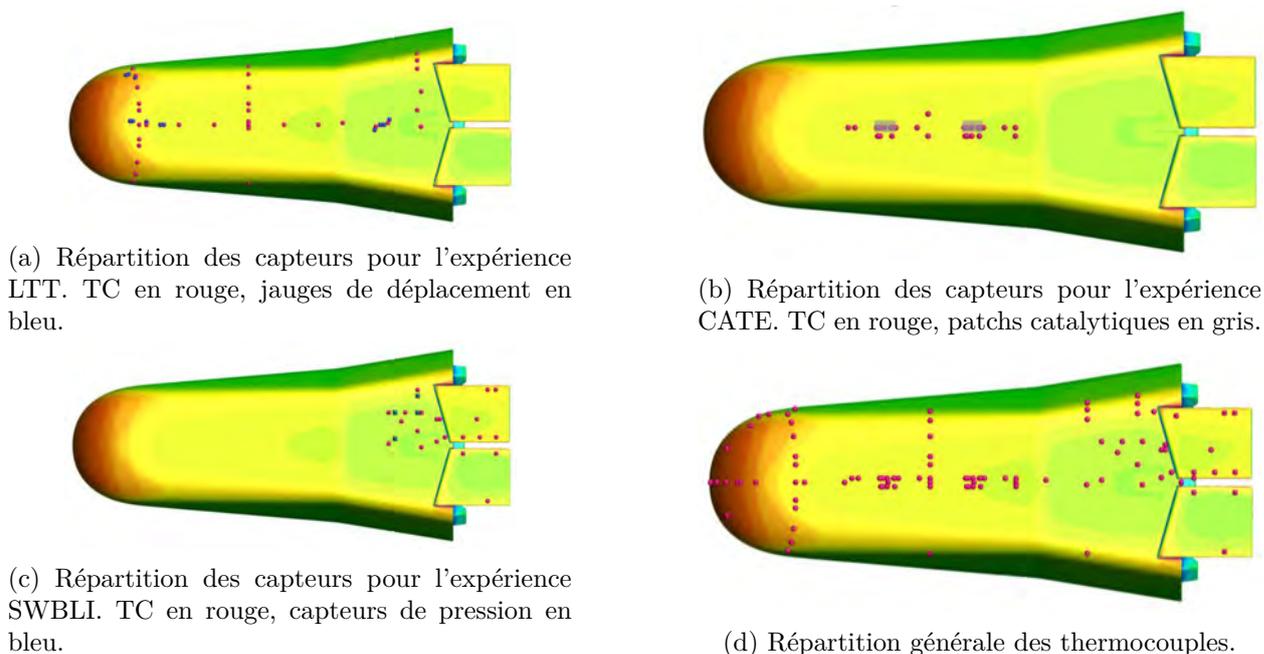


FIGURE 6.5 – Instrumentation de l'IXV pour les expériences LTT, CATE et SWBLI (extrait de [26]).

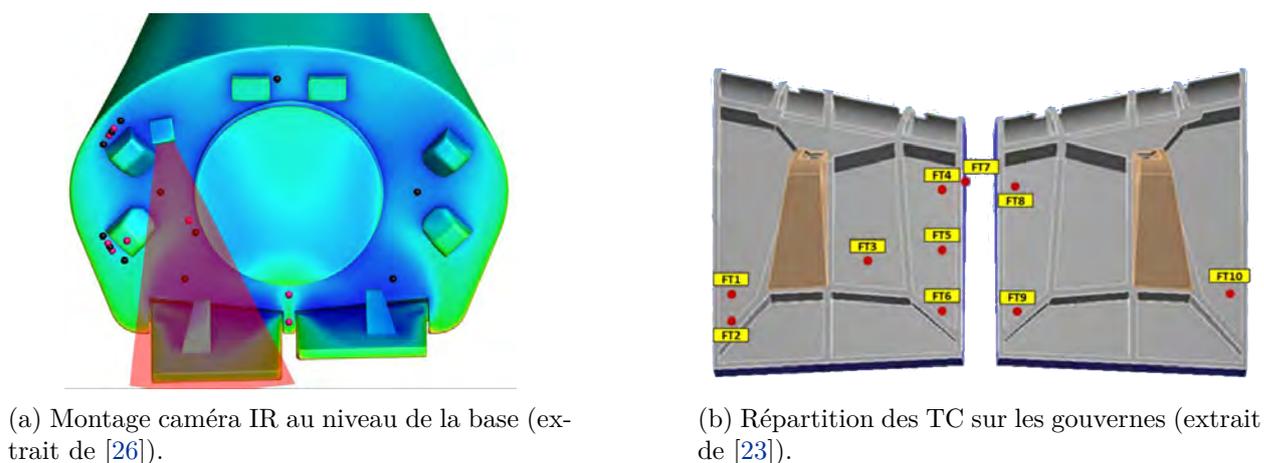


FIGURE 6.6 – Instrumentation de la base et des gouvernes de l'IXV.

Les capteurs de pression n'ayant pas été conçus pour mesurer des pressions aussi faibles que celles rencontrées en régime raréfié, les mesures se sont avérées inexploitable et n'ont pas été considérées dans cette analyse. Ainsi, l'étude numérique présentée ici se concentre sur les 20 thermocouples

représentés sur la Figure 6.7.

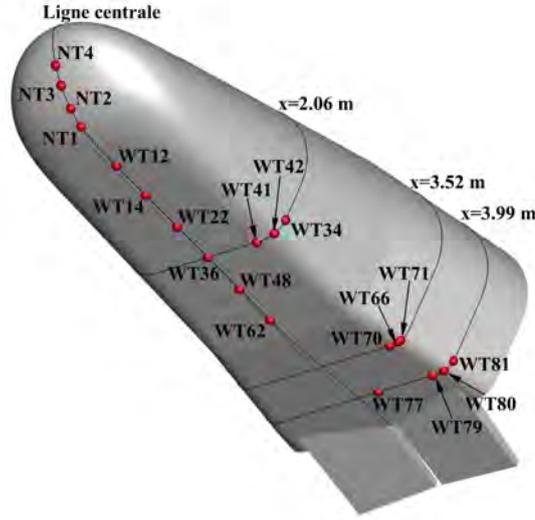


FIGURE 6.7 – Thermocouples considérés pour l’analyse des résultats et la comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux.

En plus de l’instrumentation expérimentale, l’IXV était équipé d’un ensemble de systèmes de navigation dont une Unité de Mesure Inertielle (UMI), un récepteur GPS et un système de Guidage Navigation et Contrôle (GNC) [22]. Afin de garantir l’obtention des données des capteurs et de la trajectoire, un réseau de communication a été mis en place pour assurer la transmission par télémétrie des données collectées par l’unité d’acquisition [23]. L’architecture du système In Flight Experiments (IFE) permettant l’enregistrement et la transmission des données est détaillée dans [26] et le bon fonctionnement des systèmes de vol (communications, GNC, TPS, parachutes, flotteurs, etc.) a été confirmé lors de l’analyse post-flight préliminaire [167].

## 2 Exploitation des données de vol par méthode inverse

L’ensemble des thermocouples répartis dans les protections thermiques de l’intrados de l’IXV a permis d’enregistrer, localement, l’historique de température lors de la rentrée. De la même manière, la caméra située sur la base du véhicule a mesuré, par thermographie infra-rouge, l’historique du champ de température sur l’extrados d’un des deux flaps. A partir de ces historiques, la résolution du problème inverse de conduction de la chaleur permet de remonter jusqu’au flux convecto-diffusif à la surface extérieure pour servir d’élément de comparaison des calculs DSMC.

### 2.1 Principe de la méthode inverse

La résolution du problème inverse de conduction de la chaleur pour l’exploitation des données de vol de l’IXV a fait l’objet de la thèse de Loïc Van Ghele [47]. Ses travaux portent sur les données locales (thermocouples) et surfaciques (images IR). Dans le présent manuscrit, seule l’application de la méthode aux données mesurées par les TC du nez et du ventre est présentée.

En reprenant les explications de [27] et en notant  $T(x, y, z, t)$  le champ de température au sein d’un solide orthotrope  $\Omega$ , le problème non linéaire de l’équation de la chaleur s’écrit :

$$\begin{cases} c(T) \rho(T) \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (\bar{K} \nabla T) \\ T(x, y, z, t_0) = T_0 \end{cases} \quad (6.1)$$

où  $T_0$  est la température (K) du solide à l'instant  $t_0$  (s),  $c$  et  $\rho$  sont respectivement la capacité thermique spécifique ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) et la masse volumique du matériau ( $\text{kg/m}^3$ ).  $\overline{\overline{K}}$  est la matrice de conductivité. Pour un matériau orthotrope, elle prend la forme :

$$\overline{\overline{K}} = \begin{bmatrix} k_x(T) & 0 & 0 \\ 0 & k_y(T) & 0 \\ 0 & 0 & k_z(T) \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

où les coefficients  $k_x, k_y, k_z$  sont les conductivités thermiques ( $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) dans les trois directions de l'espace. Pour fermer le problème, la condition limite au bord  $\partial\Omega$  de type Neumann s'écrit :

$$(\overline{\overline{K}} \nabla T) \cdot \vec{n} = q_{\text{cond}}(x, y, z, t), \quad (6.3)$$

où  $\vec{n}$  est le vecteur unitaire normal dirigé vers l'extérieur de  $\partial\Omega$ , et  $q_{\text{cond}}$  est le flux de chaleur conductif connu ( $\text{W/m}^2$ ). La résolution du problème direct vise alors à calculer la variation spatio-temporelle de la température  $T$  (K) en réponse au flux imposé  $q_{\text{cond}}$ .

Dans notre cas, le problème est inversé, la variation temporelle de température est connue et l'objectif est de retrouver le flux conductif  $q_{\text{cond}}$  correspondant. Ce problème inverse est mal posé puisqu'il n'y a pas unicité de la solution et parce qu'il est très sensible aux erreurs dans les données mesurées [27]. De plus, dans le cas présent, les propriétés du matériau dépendent de la température ce qui rend le problème non linéaire. Une manière de le résoudre est de le reformuler sous la forme d'un problème aux moindres carrés [27], [168] et d'utiliser la méthode de régularisation de Beck [169]. Une description succincte de la résolution de ce problème est proposée dans la référence [27] tandis qu'une description exhaustive est disponible dans le manuscrit de thèse [47].

## 2.2 Application à la rentrée de l'IXV

Pour chaque thermocouple, la température a été enregistrée à partir de 3914 s après le lancement (altitude d'environ 118 km) et jusqu'à 5114 s (altitude d'environ 25 km). Au début des mesures, le système de protection thermique est supposé à l'équilibre thermique. Par ailleurs, du fait de la couche protectrice en C-SiC, le système de protection thermique de l'intrados est supposé non-ablatif. La surface de contact entre le système de protection thermique et les parties froides du véhicule est supposée adiabatique. Le calcul du nombre de Fourier dans les directions parallèles et la direction perpendiculaire à la surface du véhicule a montré que le premier était négligeable devant le second. Ce dernier aspect a finalement permis de justifier l'utilisation d'une approche 1D et de traiter les thermocouples indépendamment les uns des autres [47]. Le problème 1D pour un thermocouple du nez est illustré sur la Figure 6.8.

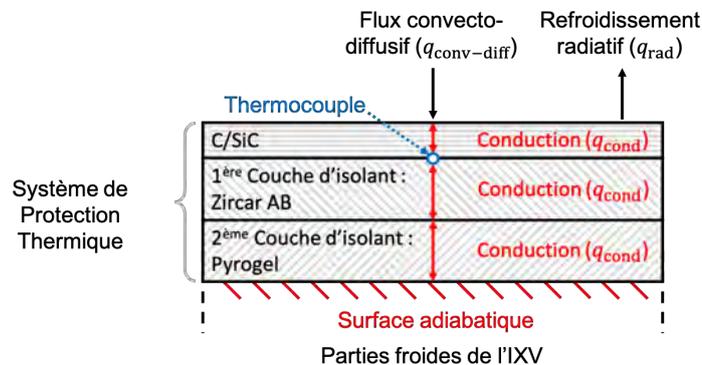


FIGURE 6.8 – Schéma du problème 1D de conduction pour un thermocouple du nez de l'IXV (adapté de [27]).

L'utilisation de la méthode inverse permet donc de reconstruire pour chaque TC, le flux conductif  $q_{\text{cond}}$  de l'équation (6.3) ainsi que la température pariétale  $T_w$ . Or, dans le cadre de la rentrée

atmosphérique de l'IXV, les phénomènes de transfert de chaleur prédominants sont la convection-diffusion et le refroidissement radiatif. Le bilan thermique à la paroi s'écrit donc :

$$q_{\text{cond}} = q_{\text{conv-diff}} - q_{\text{rad}}. \quad (6.4)$$

En utilisant la loi de Stefan-Boltzmann, le flux radiatif  $q_{\text{rad}}$  s'écrit :

$$q_{\text{rad}} = \epsilon_w \sigma (T_w^4 - T_\infty^4), \quad (6.5)$$

avec  $\epsilon_w$  l'émissivité de paroi et  $\sigma$  la constante de Stefan-Boltzmann. En connaissant la température de l'atmosphère  $T_\infty$  et la température de paroi  $T_w$  par méthode inverse, le flux radiatif peut être calculé. Finalement, le flux convecto-diffusif  $q_{\text{conv-diff}}$  peut être déduit de l'équation (6.4) [27].

### 2.3 Sensibilité et incertitude de la méthode inverse

Afin d'estimer la sensibilité de la méthode inverse aux incertitudes sur les propriétés des matériaux (conductivité thermique, capacité thermique spécifique, masse volumique, émissivité et épaisseur des couches) ainsi que l'erreur associée aux thermocouples, une étude de sensibilité a été effectuée avec une méthode Monte-Carlo [27]. Son principe consiste à tirer aléatoirement pour chaque paramètre, une incertitude dans un intervalle de trois écart-types autour de la valeur nominale et de l'ajouter à la valeur nominale du paramètre associé. En répétant ce processus un grand nombre de fois, l'observation de l'influence de ces incertitudes sur le flux de chaleur reconstruit permet de déterminer l'intervalle de confiance correspondant. L'étude de corrélation entre le flux de chaleur estimé et l'incertitude sur les paramètres d'entrée a mis en évidence plusieurs aspects fondamentaux. Tout d'abord, l'étude montre que pendant les phases de vol dites transitoires (au-dessus de 85 km et en-dessous de 60 km - Figure 6.3a), c'est l'incertitude sur l'épaisseur de la couche de C-SiC qui a la plus forte influence sur la précision des résultats. Pendant la phase de vol dite permanente (entre 85 et 60 km - Figure 6.3a), ce sont l'émissivité du C-SiC et l'incertitude sur la température de surface due à l'incertitude de calibration des thermocouples qui ont la plus grande influence sur la valeur du flux de chaleur convecto-diffusif reconstruit. Plus généralement, la faible épaisseur de l'intervalle de confiance par rapport aux estimations nominales a montré la robustesse de la méthode inverse pour l'ensemble des capteurs avec une incertitude maximale sur la valeur nominale du flux de chaleur inférieure à  $\pm 8\%$  [47].

## 3 Les modèles d'atmosphère : sensibilité et incertitude

Lorsque l'on cherche à reconstruire numériquement les grandeurs Aerothermodynamiques (ATD) pariétales d'une trajectoire de rentrée, plusieurs données d'entrée sont nécessaires : les données de trajectographie (vitesse du véhicule, angle d'incidence, angle de dérapage) et les conditions atmosphériques (température, masse volumique, composition chimique). Si les données de trajectographie sont généralement disponibles grâce aux enregistrements des systèmes embarqués et de signaux GPS [167], les données d'atmosphère ne sont pas mesurées pendant la rentrée. Elles sont généralement obtenues a posteriori grâce à l'utilisation de modèles d'atmosphère. De tels modèles se définissent comme des outils capables de décrire les propriétés physiques et parfois chimiques de l'atmosphère en fonction, a minima, de l'altitude [170]. Comme indiqué dans le rapport descriptif du modèle **US62** [131], les premiers modèles d'atmosphère ont été développés dans les années 50 et se sont vite révélés obsolètes suite aux premières révolutions orbitales du satellite Spoutnik. Depuis lors, beaucoup d'autres modèles ont été conçus avec une précision croissante et pour des altitudes allant jusqu'à 2500 km [171].

### 3.1 Les modèles d'atmosphère principaux

Les modèles d'atmosphère peuvent être utilisés pour une large gamme d'applications telles que la reconstruction numérique d'une rentrée véhiculaire, l'estimation d'usure d'orbite et de la durée

de vie d'un satellite et parfois même la prédiction de la trajectoire de désorbitation d'un objet. Les modèles les plus connus se divisent en trois catégories : les modèles standards ou globaux qui sont moyennés en temps et en espace, les modèles de référence ou locaux qui, contrairement aux modèles globaux, dépendent du temps (généralement le temps universel) et de la position (altitude, longitude, latitude). La troisième catégorie correspond aux modèles intermédiaires tel que le Global Reference Atmospheric Model (GRAM) qui est local en espace mais mensuellement moyenné en temps. Etant donné que le comportement de ce genre de modèle est probablement compris entre les deux comportements limites, il n'a pas été considéré dans cette étude.

Dans le contexte d'une simulation de rentrée, les modèles standards les plus utilisés sont les modèles **US62**, **US76** et le modèle **Jacchia77**. Pour les modèles de référence, le plus connu est le modèle US Naval Research Laboratory Mass Spectrometer and Incoherent Scatter radar Extended (NRLMSISE) de l'année 2000 souvent abrégé **MSISE-00**. Ces modèles ont les caractéristiques suivantes :

- Le modèle **US62** est un modèle empirique basé sur des mesures de température obtenues par sondes (fusée, satellite, etc.). Il fournit une grande quantité de profils dont la température, la pression, la masse volumique, la vitesse du son ou encore la viscosité en fonction de l'altitude [131]. Son altitude varie entre -5 et 700 km et ses estimations correspondent à un modèle idéalisé pour une latitude moyenne de 45°, une moyenne annuelle en temps et une activité solaire comprise entre sunspot minima et maxima [170]. Entre 32 et 90 km, les estimations sont considérées modérément incertaines et peu fiables au-dessus de 90 km [170].
- Le modèle **US76** est lui aussi un modèle semi-empirique basé sur des mesures de température. Son altitude va jusqu'à 1000 km et ce modèle a été conçu de sorte à ce que les profils de pression verticale, de masse volumique et de composition obtenus à partir d'équations 1D approchent au mieux les données expérimentales. Bien que les conditions standards d'obtention de cette version soient les mêmes que celles du modèle **US62**, le modèle **US76** donne la composition chimique de l'air pour les altitudes supérieures ou égales à 86 km. La discussion à propos des variations saisonnières, latitudinales et longitudinales du rapport [50] permet d'estimer les éventuelles déviations par rapport aux conditions standards [170].
- Le modèle **Jacchia77** est une version révisée et mise à jour du modèle **Jacchia71**. Pour une température exosphérique donnée, il fournit les profils moyens de masse volumique, de température et de compositions chimiques entre 90 et 2500 km [37]. Le modèle est construit à partir de données obtenues par traînée-satellite, par spectrométrie de masse et par des données d'absorption [170]. Ses limitations sont inhérentes aux données satellites, mais la masse volumique totale moyenne s'accorde bien avec les valeurs observées [170]. Quelques versions plus récentes du modèle ont été proposées depuis 1977, la dernière étant le modèle **JB2008** (modèle Jacchia-Browman de 2008). Cependant, d'après [171], ce modèle n'est valide que pour des altitudes comprises entre 120 et 2500 km ce qui ne correspond pas aux altitudes auxquelles on s'intéresse ici.
- Le modèle **MSISE-00** [172] est la version de l'année 2000 de la famille des modèles **MSIS**. Il comprend la masse volumique totale obtenue à partir d'accéléromètres de satellites, la température issue de mesures radar et la densité numérique d'O<sub>2</sub> provenant d'une mission maximum solaire [170]. Sa particularité principale est qu'il prend en compte les dépendances au jour, à l'heure, à l'altitude, à la latitude, à la longitude, au temps solaire local, à l'indice magnétique et à l'indice de flux de radiation solaire 10.7 cm. Enfin, la confrontation de ce modèle aux modèles **Jacchia77** et **MSISE-90** a montré que le modèle **MSISE-00** était plus satisfaisant puisqu'il incorpore les avantages des modèles **Jacchia77** et **MSISE-90** [170].

En résumé, comme le modèle **US62** ne donne pas la composition chimique de l'air, il est principalement utilisé pour des altitudes inférieures à 90 km tandis que le modèle **Jacchia77** lui est préféré au-dessus. Ainsi, Moss a étudié les missions Apollo 6 [15, 130] et AFE [173] avec ces deux modèles. Le modèle **Jacchia77** a également servi à l'analyse post-flight de la capsule OREX [20]. Le modèle **US76** pour lequel d'importantes déviations (de plus de 50%) ont été observées par

rapport aux mesures effectuées dans le cadre du programme de la navette spatiale américaine [146], a été utilisé par Banyai *et al.* pour l'analyse aérodynamique pre-flight de l'IXV [8]. Pour la présente étude de l'IXV, le choix s'est donc porté sur le modèle **MSISE-00** dont les sources sont disponibles en ligne<sup>1</sup>.

### 3.2 Sensibilité et incertitude du modèle MSISE-00

Comme expliqué en introduction, l'objectif de ce chapitre est de confronter les flux de chaleur extraits des données de vol aux flux calculés par Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Dans ce contexte, l'utilisation d'un modèle local semble naturelle puisque quand les données de vol sont disponibles, un tel modèle est capable de prendre en compte plus d'informations, et de fournir des données atmosphériques, a priori, plus précises. Pour la rentrée de l'IXV, les paramètres de vol ont été enregistrés pendant la rentrée et communiqués à l'ONERA par TASI. Les données atmosphériques du Tableau 6.2 ont ainsi été obtenues.

Alt. (km)	$n_\infty$ ( $\cdot/m^3$ )	$\rho_\infty$ (kg/m <sup>3</sup> )	$T_\infty$ (K)	$X_{O_2}$	$X_{N_2}$	$X_O$	$Kn$
115	$6.97 \times 10^{17}$	$3.08 \times 10^{-8}$	306	0.1066	0.7309	0.1625	0.43
110	$1.58 \times 10^{18}$	$7.17 \times 10^{-8}$	235	0.1266	0.7517	0.1218	0.18
105	$4.29 \times 10^{18}$	$1.99 \times 10^{-7}$	183	0.149	0.7704	0.0807	0.061
100	$1.25 \times 10^{19}$	$5.91 \times 10^{-7}$	159	0.1703	0.7847	0.045	0.021
95	$3.37 \times 10^{19}$	$1.62 \times 10^{-6}$	161	0.1865	0.7949	0.0186	0.0077
90	$8.12 \times 10^{19}$	$3.92 \times 10^{-6}$	175	0.1966	0.7991	0.0043	0.0033

Le nombre de Knudsen  $Kn$  est basé sur le  $\lambda_\infty^{VHS}$  du  $N_2$  et la longueur du véhicule  $L_{ref} = 4.4$  m.

TABLEAU 6.2 – Conditions atmosphériques obtenues avec le modèle **MSISE-00**.

Compte tenu des relations entre le flux de chaleur et la masse volumique dans les régimes moléculaire libre ( $q_{fm} \propto \rho_\infty$ ) et continu ( $q_{cont} \propto \sqrt{\rho_\infty}$ ), la masse volumique est déterminante dans le contexte d'une étude aérothermodynamique. En considérant les conditions de référence suivantes équivalentes aux conditions de vol de l'IXV au point d'entrée [161] :

$$\{\text{jour, heure, longitude, latitude}\} = \{42, 15, 175^\circ, -5^\circ\}, \quad (6.6)$$

les Figures 6.9 et 6.10 montrent la sensibilité du modèle **MSISE-00** au jour de l'année et à l'heure du jour pour l'estimation de la masse volumique. On constate les larges variations illustrées par la valeur absolue des différences relatives par rapport aux conditions de référence. En effet, entre 85 et 120 km, les différences relatives en fonction du jour de l'année varient entre 15 et 30% tandis qu'elles restent en-dessous de 10% à 65 km. Par rapport à l'heure du jour, les différences relatives sont encore plus grandes et comprises entre 20 et 140% pour les altitudes entre 85 et 120 km. Là encore, pour l'altitude de 65 km, la différence relative est beaucoup plus faible (inférieure à 5%).

La Figure 6.11 montre l'influence de la longitude et de la masse volumique pour plusieurs latitudes autour de la valeur au point d'entrée<sup>2</sup> à 65, 90, 100 et 120 km. A 65 km, les variations de longitude par rapport au point d'entrée à 175° induisent des changements inférieurs à 2% et peuvent aller jusqu'à 15, 27 et 25% à 90, 100 et 120 km.

Ces résultats montrent dans quelle mesure la connaissance de l'historique des conditions de vol est nécessaire pour une estimation fiable de la masse volumique et tout particulièrement pour les plus hautes altitudes. Les résultats de la Figure 6.12 montrent que pour les conditions de vol de l'IXV (Tableau 6.2), le modèle **MISE-00** estime des masses volumiques très différentes de celles obtenues avec les modèles standards. En effet, les résultats montrent des différences relatives allant jusqu'à 40% pour le modèle **US62** et jusqu'à 30% pour les modèles **US76** et **Jacchia77**.

1. Sur le site : <https://ccmc.gsfc.nasa.gov>

2. La trajectoire de l'IXV a principalement suivi l'équateur terrestre. Par conséquent, entre 120 et 85 km, la latitude varie seulement entre -5 et -3°.

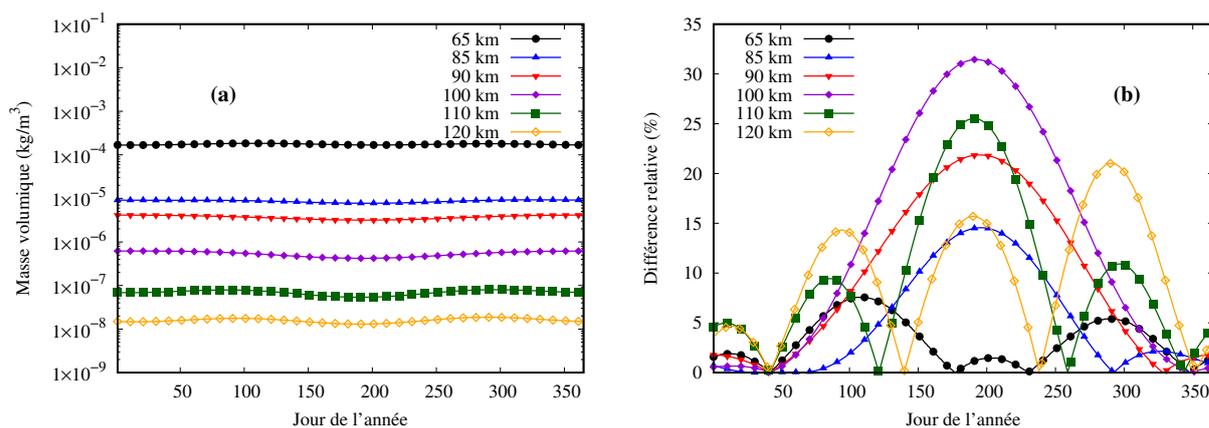


FIGURE 6.9 – Sensibilité de la masse volumique prédite par le modèle **MSISE-00** en fonction du jour de l'année à différentes altitudes.

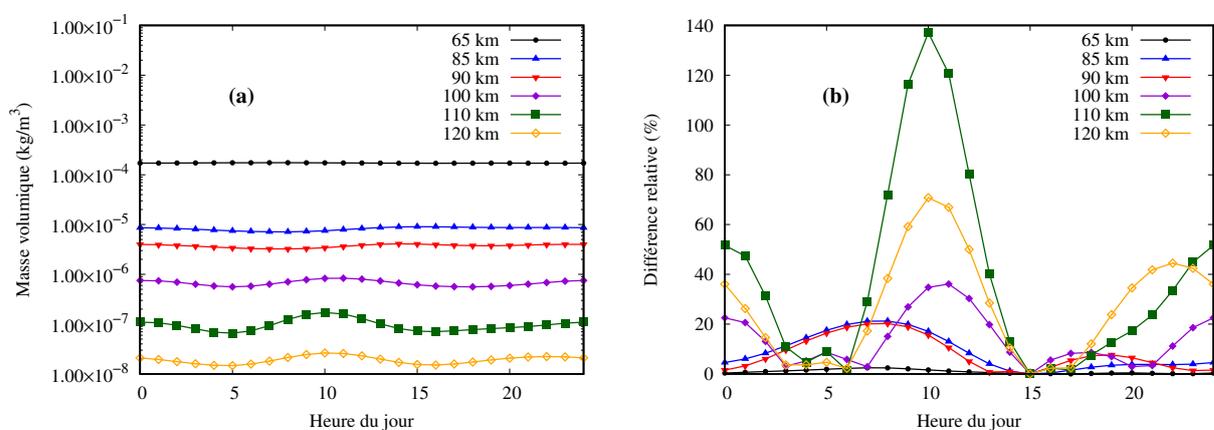


FIGURE 6.10 – Sensibilité de la masse volumique prédite par le modèle **MSISE-00** en fonction de l'heure du jour à différentes altitudes.

Bien que la structure du modèle suggère que les estimations du modèle **MSISE-00** sont plus précises que celles obtenues sans connaissance des conditions de vol, ce modèle n'en demeure pas moins semi-empirique et ses estimations restent sujettes à un niveau d'incertitude significatif. D'après Sagnières et Sharf [174], l'évaluation de l'incertitude sur la masse volumique pour différents modèles incluant le modèle **MSISE-00** indique qu'une incertitude minimale de 10 à 15% doit être supposée. Dans le cas de variations locales spontanées, elle peut même être plus grande. Dans le rapport CIRA [171], la même valeur de 15% d'incertitude est donnée et une valeur de 100% est suggérée en cas de variations locales.

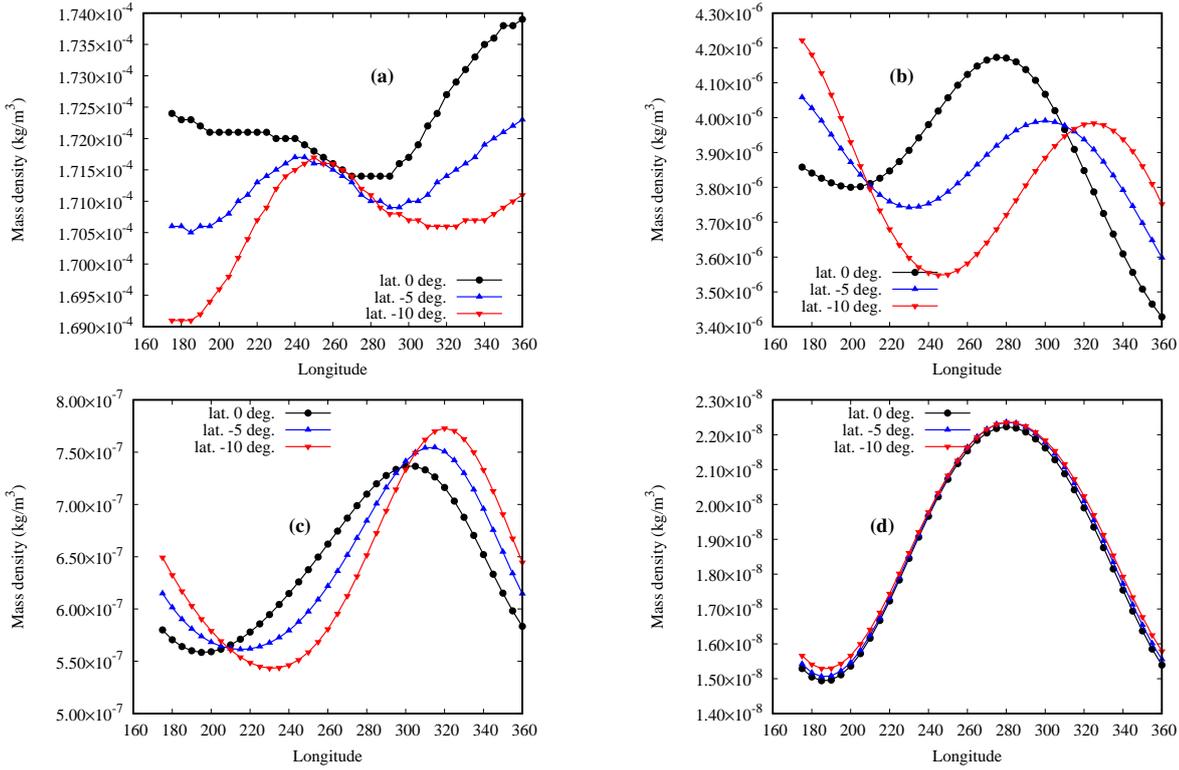


FIGURE 6.11 – Sensibilité de la masse volumique prédite par le modèle **MSISE-00** en fonction de la longitude à 65 (a), 90 (b), 100 (c) et 120 (d) km et pour différentes latitudes.

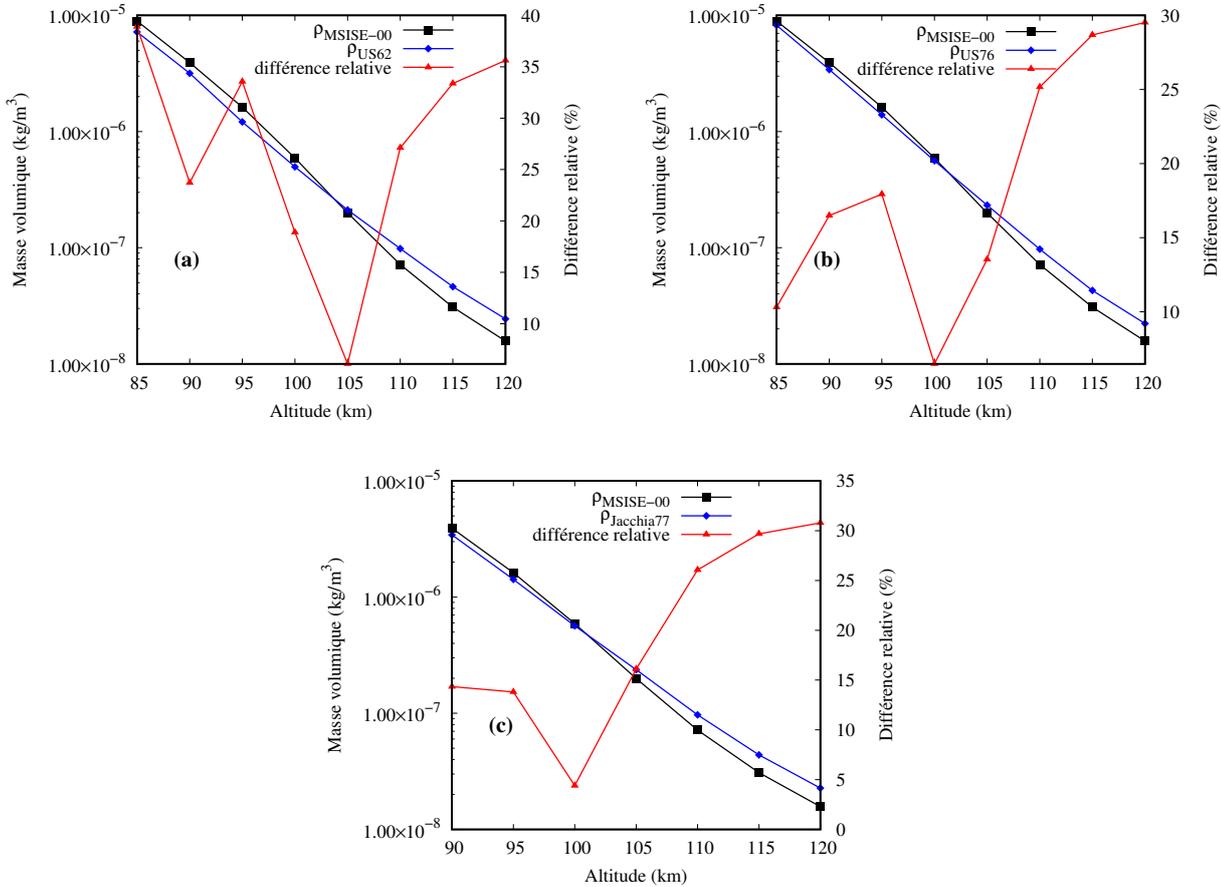


FIGURE 6.12 – Comparaison de la masse volumique estimée avec le modèle **MSISE-00** et les modèles **US62** (a), **US76** (b), **Jacchia77** (c).

## 4 Paramètres numériques pour la simulation de la rentrée de l'IXV en régime raréfié

Les points de vol du Tableau 6.2 ont été simulés avec le code DSMC **SPARTA**. De plus, afin de mieux comprendre les différences entre les résultats DSMC et les mesures, un calcul CFD a été réalisé avec le code **CEDRE** développé à l'ONERA pour le point de vol à 90 km. Cette section présente les méthodes et les paramètres utilisés pour ces simulations.

### 4.1 Simulations DSMC

#### 4.1.1 Paramètres numériques des simulations

Comme évoqué dans les chapitres 3 et 4, la fiabilité des simulations DSMC nécessite le respect de certaines métriques. Les simulations ont donc été construites de la manière suivante :

- Le pas de temps  $\Delta t$  est pris inférieur à la valeur minimale du temps intercollision moyen ( $\tau_{\text{coll}}$ ) dans le plan de symétrie du domaine de calcul.
- La taille initiale  $\Delta_{x,y,z}$  du maillage cartésien est prise inférieure au libre parcours moyen ( $\lambda_{\infty, \text{N}_2}^{\text{VHS}}$ ) de l'azote  $\text{N}_2$ . En complément, une procédure de raffinement adaptatif est définie afin de raffiner, au cours de la simulation, les mailles dont la taille devient supérieure au libre parcours moyen local ( $\lambda_{x,y,z}$ ). Cette procédure est illustrée dans la section suivante.
- Le nombre total de particules  $N_p$  est choisi de manière à ce que les cellules contiennent au moins 10 particules numériques dans les mailles à l'entrée du domaine. En pratique, le nombre total de particules n'est pas lié directement à la précision mais il donne une idée de la charge de calcul. Le critère critique est le nombre de particules par cellule  $N_{p/c}$  qui est discuté dans la prochaine section.
- Pour définir le temps de stationnarisation et la durée d'échantillonnage, une approche similaire à celle de Banyai *et al.* a été utilisée [175, 8]. Un temps caractéristique  $\tau_f$  est défini comme la durée que prend une particule voyageant à la vitesse moyenne  $U_\infty$  pour traverser le domaine. Ensuite, la procédure d'échantillonnage est appliquée après cinq à dix  $\tau_f$  et pendant cinq à dix  $\tau_f$ . Afin de réduire au mieux le bruit stochastique, le même échantillonnage que celui utilisé pour l'altitude de 100 km a été appliqué aux altitudes supérieures.

Finalement, le domaine de calcul est pris suffisamment grand pour garantir que les conditions infinies amont soient retrouvées aux entrées du domaine et que l'écoulement soit supersonique en sortie. Le maillage surfacique utilisé pour les calculs est représenté sur la Figure 6.13. Lors d'une simulation de rentrée sur une vaste plage d'altitudes, la finesse du maillage surfacique peut-être problématique car elle accentue le bruit statistique des grandeurs pariétales lorsque la taille des mailles volumiques est telle qu'elles englobent un trop grand nombre d'éléments surfaciques. Ici, le choix a été fait d'utiliser le même maillage très fin pour tous les points de vol ce qui explique l'importance des oscillations parfois visibles le long de la ligne centrale. Néanmoins, ces oscillations sont en réalité un artefact numérique dont l'amplitude peut être facilement réduite en utilisant un maillage plus grossier ou en filtrant la distribution pariétale (*i.e.* en moyennant la valeur d'un élément avec celles de ses voisins). La vérification des critères de convergence est abordée dans la section suivante.

Compte tenu de la vitesse suborbitale du véhicule (environ 7.5 km/s) ainsi que de la faible masse volumique aux altitudes considérées, un modèle d'air de 5 espèces a été choisi et les effets d'ionisation et de rayonnement du gaz ont été négligés. Parmi les modèles physiques disponibles dans **SPARTA**, le modèle Variable Hard Sphere (VHS) a été utilisé avec les paramètres de Bird (Annexe A de [43]) comme modèle standard pour l'étude et les effets du modèle de collision ont été analysés en profondeur avec des simulations complémentaires. L'algorithme No Time Counter (NTC) a été employé comme procédure de sélection (voir chapitre 3). Les modes internes de rotation et de vibration ont été considérés comme suit. Le mode de rotation est supposé continu avec  $Z_{\text{rot}} = 5$  et le modèle de vibration est considéré discret avec le modèle de Millikan-White de nombre de collisions  $Z_{\text{vib}}(T)$  variable. Les transferts d'énergie sont simulés avec la procédure de Borgnakke-Larsen et



FIGURE 6.13 – Maillage surfacique de l'IXV composé de 82726 éléments.

le modèle de chimie utilisé par défaut est le modèle TCE de Bird associé aux taux de réaction de Park [89]. Seules les réactions de dissociation et d'échange ont été considérées pour un total de 19 réactions possibles (15 réactions de dissociation et 2 réactions d'échange directes et inverses). De plus, comme les thermocouples considérés ne sont pas situés sur les patches catalytiques, la paroi est supposée non-catalytique. Finalement, le modèle d'interactions gaz-surface utilisé par défaut est celui de Maxwell en supposant la paroi partiellement diffuse avec une température de paroi obtenue pour chaque altitude comme une moyenne des valeurs reconstruites sur la partie intrados du véhicule. Pour chaque altitude, l'effet du coefficient d'accommodation a été évalué. Par ailleurs, plusieurs modèles de chimie ont été analysés à 90 km. L'influence de ces paramètres est discutée dans la section 5.

#### 4.1.2 Respect des critères de convergence

Les paramètres de simulation utilisés pour chaque point de vol sont résumés dans le tableau 6.3.

$t^a$ (s)	Alt. (km)	$\lambda_{\infty, N_2}^{VHS} / \Delta_{x,y,z}$	$\tau_{\text{coll}} / \Delta t$	$N_p \times 10^{-6}$	$T_w$ (K)
3933	115	11	10	550	315
3968	110	6	5.7	570	350
4005	105	2.7	5.8	615	430
4045	100	2.3	5	660	550
4087	95	1.7	3.2	910	680
4134	90	1	1.6	1400	870

<sup>a</sup>  $t$  désigne le temps écoulé à partir du lancement depuis le pas de tir de Kourou.

TABLEAU 6.3 – Paramètres des simulations DSMC **SPARTA**.

Les variables  $\lambda_{\infty, N_2}^{VHS} / \Delta_{x,y,z}$  et  $\tau_{\text{coll}} / \Delta t$  sont calculées le long de la ligne de contrôle (cf. Figure 6.14) et représentent respectivement le ratio du libre parcours moyen sur la taille de maille et le ratio du temps inter collision minimal sur le pas de temps. Compte tenu de la discussion menée au sujet du ratio  $\tau_{\text{coll}} / \Delta t$  dans la section 4.1.1, le tableau montre qu'il tombe parfois en-dessous de

la valeur critique de 5. Par conséquent, des simulations complémentaires ont été réalisées avec des pas de temps plus faibles pour les altitudes de 100, 95 et 90 km. Les résultats n'ont montré aucun changement sur le flux de chaleur confirmant ainsi que les résultats présentés ici sont bien résolus en temps. Par rapport à la convergence en espace, pour chaque altitude, un raffinement adaptatif permettait de réduire la taille des mailles si nécessaire. Une procédure de niveau 3 est illustrée sur la Figure 6.15. Cette procédure limite à 2 le nombre de raffinements binaires dans chaque direction (le premier niveau correspond au maillage de fond). La taille des cellules peut donc être divisée par 2 dans chaque direction à chaque niveau jusqu'à une taille  $\Delta_{x,y,z}/4$ .

Afin d'évaluer la pertinence des paramètres numériques choisis, les valeurs d'intérêt sont extraites le long d'une ligne de contrôle représentée sur la Figure 6.14. Les résultats le long de cette ligne sont exprimés en fonction de la distance au capteur NT3. Pour les altitudes entre 115 et 95 km, le nombre de particules numériques est supérieur à 7 dans chaque cellule et le ratio  $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$  atteint une valeur inférieure à 1 à 95 et 100 km, dans les dernières mailles adjacentes à la surface du véhicule. Entre 115 et 100 km, ce ratio est supérieur à 1 et le nombre de particules est largement supérieur à 10 tout le long de la ligne de contrôle.

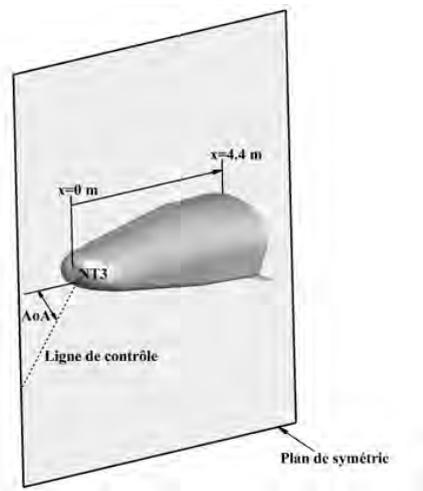


FIGURE 6.14 – Ligne de contrôle pour l'observation des grandeurs dans le champ.

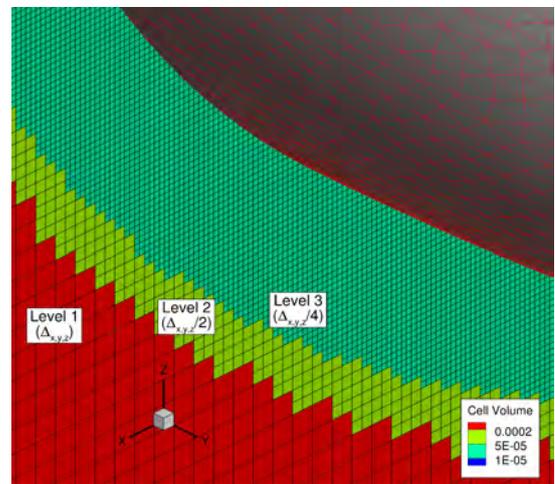


FIGURE 6.15 – Représentation d'une procédure SPARTA de raffinement à 3 niveaux à 90 km.

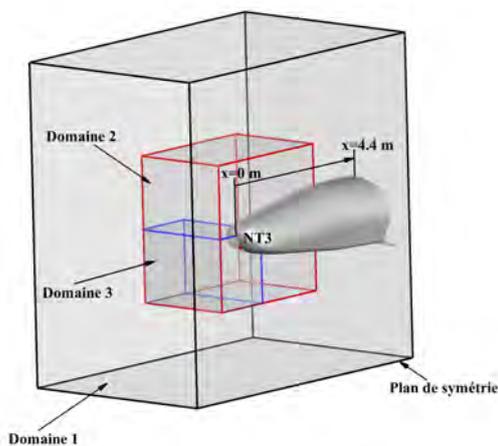


FIGURE 6.16 – Différents domaines de calcul pour l'étude de convergence à 90 km.

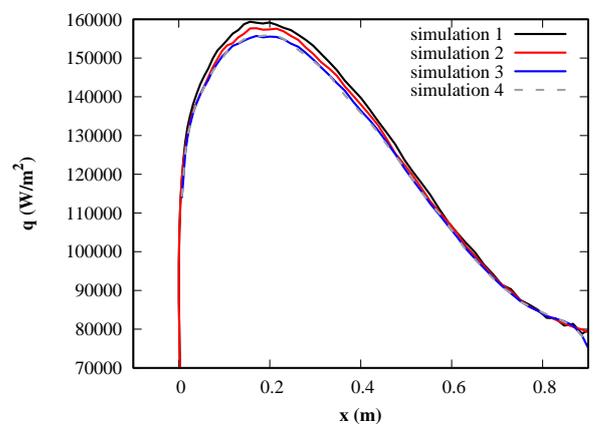


FIGURE 6.17 – Flux de chaleur au point d'arrêt pour quatre niveaux de raffinement à 90 km.

Pour le point de vol à 90 km d'altitude, les critères de temps et d'espace sont atteignables mais sont numériquement coûteux puisqu'ils nécessitent un grand nombre de particules numériques, un

maillage très fin et un pas de temps très faible. Par conséquent, afin d'assurer la validité du choix des paramètres, plusieurs configurations ont été testées avec différents niveaux de raffinement et un pas de temps plus faible. Les trois domaines de calculs à l'étude sont représentés sur la Figure 6.16. Pour chacun de ces domaines, les paramètres de simulation ainsi que les valeurs maximales de flux de chaleur le long de la ligne centrale sont donnés dans le Tableau 6.4. Les flux de chaleur le long de la ligne centrale du véhicule sont représentés sur la Figure 6.17 et plusieurs variables d'intérêt sont tracées le long de la ligne de contrôle sur la Figure 6.18. Sur la Figure 6.18a, on observe l'augmentation du nombre de particules numériques par cellule ( $N_{p/c}$ ) suite à la création de nouvelles particules par dissociation d'une part et conformément à l'augmentation de la densité numérique d'autre part. Sur la Figure 6.18b, on constate également une augmentation de la grandeur  $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$  jusqu'à une valeur maximale d'environ 2 pour les simulations 1 et 2, et le double pour la simulation 3 (maillage de fond deux fois plus fin). Pour comprendre la nature de l'augmentation du ratio  $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$ , il faut revenir à la définition du libre parcours moyen local  $\lambda_{x,y,z}$  utilisé dans cette étude et donné par l'expression :

$$\lambda_{x,y,z} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi} d_{\text{ref},N_2}^2 n}}_{(1)} \underbrace{\left( \frac{T}{T_{\text{ref},N_2}} \right)^{\omega_{N_2}-1/2}}_{(2)}, \quad (6.7)$$

où  $d_{\text{ref},N_2}$ ,  $T_{\text{ref},N_2}$  et  $\omega_{N_2}$  sont les paramètres du modèles VHS. L'analyse des termes (1) et (2) permet d'isoler respectivement le membre décroissant d'un côté, et le membre croissant de l'autre. Ainsi, la croissance de la température  $T$  à travers le choc est telle que l'augmentation du terme (2) surpasse la diminution du terme (1). Par conséquent, le ratio  $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$  augmente. Ensuite, en se rapprochant du véhicule, l'augmentation exponentielle de la densité  $n$  et la diminution progressive de la température  $T$  se traduisent par une chute du libre parcours moyen jusqu'à une valeur critique  $\lambda_{x,y,z} \leq \Delta_{x,y,z}$  qui déclenche le raffinement adaptatif. Sur la Figure 6.18b, entre  $x = 0$  et  $x = 0.1$  m, on note une oscillation importante de  $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$  avec l'apparition de 2 ou 3 minima locaux, correspondant aux différents niveaux de raffinement adaptatif. Comme la densité de mailles augmente et que le nombre total de particules numériques reste à peu près constant, les zones de raffinement correspondent également aux régions de décroissance forte de  $N_{p/c}$  sur la Figure 6.18a.

Finalement, d'après la faible variation du flux de chaleur le long de la ligne centrale (différence relative maximale inférieure à 3%), la configuration 1 est jugée acceptable et est utilisée pour le reste de l'étude.

Simulation	N.R.M	$\lambda_{\infty,N_2}^{\text{VHS}}/\Delta_{x,y,z}$	$\tau_{\text{coll}}/\Delta t$	$N_p \times 10^{-6}$	$N_c/V_{\text{num}}$	$q_{\text{max}}$ (kW/m <sup>2</sup> )
1	3	1	1.6	1400	$0.2 \times 10^6$	159
2	4	1	2.1	1000	$1.9 \times 10^6$	158
3	3	2	2.1	900	$3.9 \times 10^6$	156
4	3	2	8.5	900	$3.9 \times 10^6$	156

N.R.M désigne le niveau de raffinement maximal autorisé et  $N_c/V_{\text{num}}$  est le ratio entre le nombre de mailles et le volume du domaine de calcul.

TABLEAU 6.4 – Paramètres pour les différentes configurations numériques à 90 km.

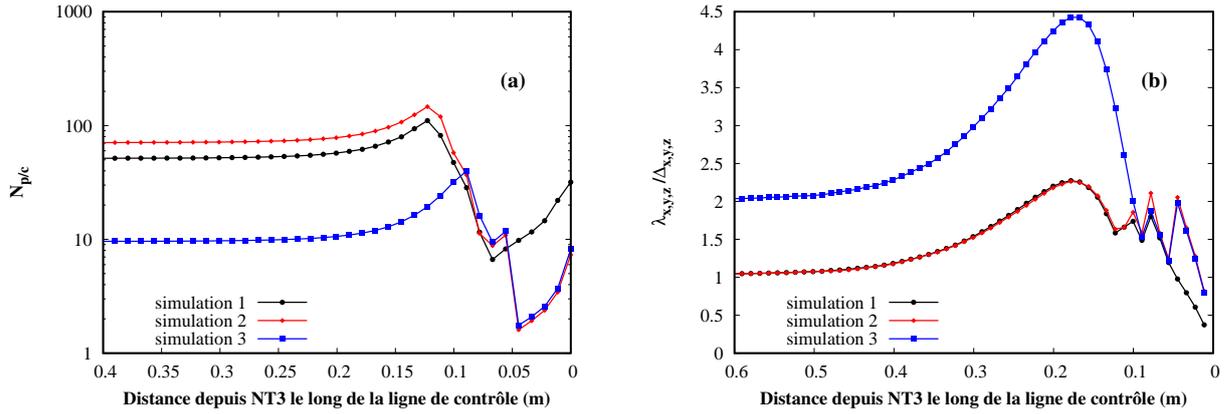


FIGURE 6.18 – Comparaison du nombre de particules par cellule (a) et du ratio  $\lambda_{x,y,z}/\Delta_{x,y,z}$  (b) le long de la ligne de contrôle pour trois configurations numériques à 90 km.

## 4.2 Simulations CFD

### 4.2.1 Description du maillage

Les calculs CFD ont été réalisés avec un maillage non structuré de 12.6 millions d'éléments (prismes et tétraèdres) représenté sur la Figure 6.19. Afin d'assurer une comparaison immédiate des grandeurs pariétales obtenues par simulations CFD et DSMC, le même maillage surfacique a été utilisé pour les deux types de simulation. Ainsi, pour le calcul **CEDRE**, le maillage volumique est construit à partir du maillage surfacique utilisé pour la simulation DSMC de la façon suivante. La couche limite est d'abord maillée avec des prismes. La première couche a une épaisseur de 1  $\mu\text{m}$  et un facteur de croissance de 1.2 est utilisé pour extraire un total de 50 couches partout sauf au niveau des gouvernes. Pour ces dernières, seulement 45 couches sont extraites afin d'éviter leur interpénétration. Ensuite, l'enveloppe de choc est extraite des contours de Mach de la solution DSMC. De part et d'autre de l'enveloppe, des couches de prismes sont construites. Dans la direction du véhicule, 15 couches sont créées avec une taille minimale de 0.5 mm, un taux de croissance de 1.2. Dans la direction opposée, 10 couches de prismes sont créées avec des tailles comprises entre 0.5 et 2.15 mm (facteur de croissance de 1.2) puis des couches de prismes de taille homogène de 2.15 mm sont ensuite extraites jusqu'à atteindre une hauteur finale totale de 50 mm. La dernière étape consiste à remplir le domaine de calcul avec des tétraèdres selon une procédure de Delaunay. Comme la position du choc calculée par DSMC n'est pas la même que celle obtenue par CFD, la procédure est itérée plusieurs fois jusqu'à ce que le choc soit bien capturé à l'intérieur de la zone la plus fine des couches de prismes.

### 4.2.2 Paramètres numériques du calcul

Les simulations CFD ont été faites avec le code multi-physique **CEDRE** [176] de l'ONERA qui comporte un certain nombre de solveurs. Cette étude a été réalisée avec le solveur non-structuré CHARME. Les équations de Navier-Stokes sont discrétisées par une méthode de type volumes finis à l'ordre 2 en espace avec le schéma de flux AUSM+ associé à un limiteur Van Leer.

CHARME est un solveur mono-température qui suppose l'équilibre thermique. Conformément aux hypothèses DSMC, l'écoulement est supposé en déséquilibre chimique et la cinétique chimique de Park est utilisée avec un écoulement d'air à 5 espèces et 17 réactions. Par défaut, les simulations directes et inverses sont considérées, ce qui donne un total de 34 réactions chimiques possibles. Toutefois, l'état du gaz (parfait ou réel, à l'équilibre chimique ou pas) n'est pas fixé par l'utilisateur mais est une conséquence des conditions locales de l'écoulement. De la même manière, utiliser un modèle d'air à 5 espèces avec 17 réactions directes et inverses n'implique pas nécessairement que toutes les espèces soient présentes dans l'écoulement ni que toutes les réactions se produisent. L'influence des réactions chimiques est discutée dans la section 6. Par ailleurs, en raison du faible

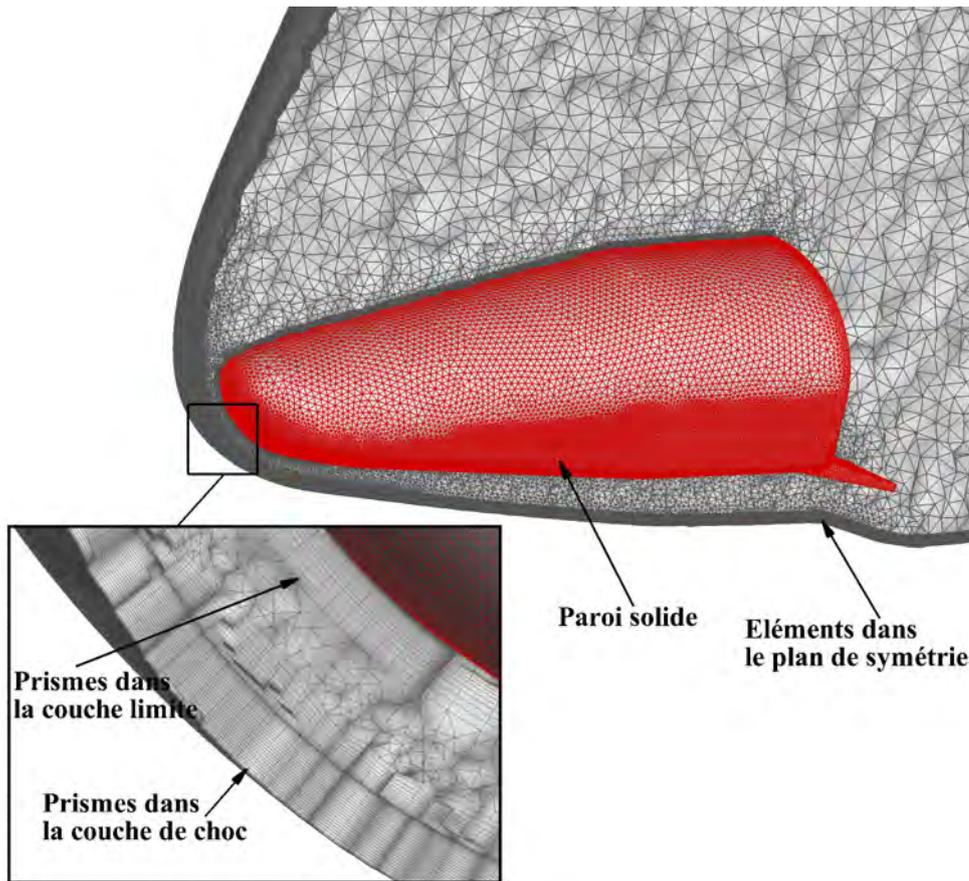


FIGURE 6.19 – Vue 3D du maillage 3D dans le plan de symétrie du domaine de calcul CFD.

nombre de Reynolds à 90 km ( $Re = 12\,600$ ), l'écoulement est supposé laminaire. Finalement, la paroi est supposée non-catalytique et les propriétés de transport sont calculées comme suit. La conductivité des espèces est calculée à partir d'un nombre de Prandtl constant et la viscosité des espèces est obtenue avec le modèle de Blottner. Les viscosités et conductivités de mélange sont quant à elles calculées par moyennes arithmétiques des fractions d'espèces.

## 5 Analyse des résultats DSMC

Dans cette section, les résultats numériques obtenus sont analysés et confrontés aux mesures en vol. Par ailleurs, une étude d'influence de différents paramètres numériques, comme le coefficient d'accommodation, le modèle de cinétique chimique ou encore le modèle de collision, est réalisée afin d'identifier les sources potentielles d'écarts entre les mesures et les résultats numériques.

### 5.1 Analyse de l'écoulement

Lors d'une rentrée atmosphérique véhiculaire, l'écoulement passe d'un régime moléculaire libre à un régime continu. Entre les deux, plusieurs régimes se succèdent et la nature de l'écoulement amont perturbé change radicalement. L'étude de la rentrée raréfiée de l'IXV constitue donc une illustration de la topologie des écoulements raréfiés dans ses différents sous-régimes décrits dans le chapitre 1. Lorsque l'altitude décroît, les effets de raréfaction s'atténuent. La première conséquence de ce phénomène est une réduction de l'épaisseur du choc qui passe d'un choc très faible épais à un choc plus fort et plus fin. La deuxième conséquence est l'augmentation de la masse volumique ainsi que de la température à travers ce dernier. Ce phénomène est clairement visible sur la Figure 6.20 où l'utilisation d'une échelle similaire à celle employée par Banyai *et al.* [175, 8] facilite la comparaison des contours DSMC avec ceux des auteurs. Les résultats DSMC obtenus avec **SPARTA** sont en bon

accord avec ceux de Banyai. Pour des altitudes inférieures à 105 km, la différence principale observée est une modification locale de la forme du choc due à une inclinaison différente des gouvernes<sup>3</sup> qui brise la structure convexe de l'enveloppe de choc.

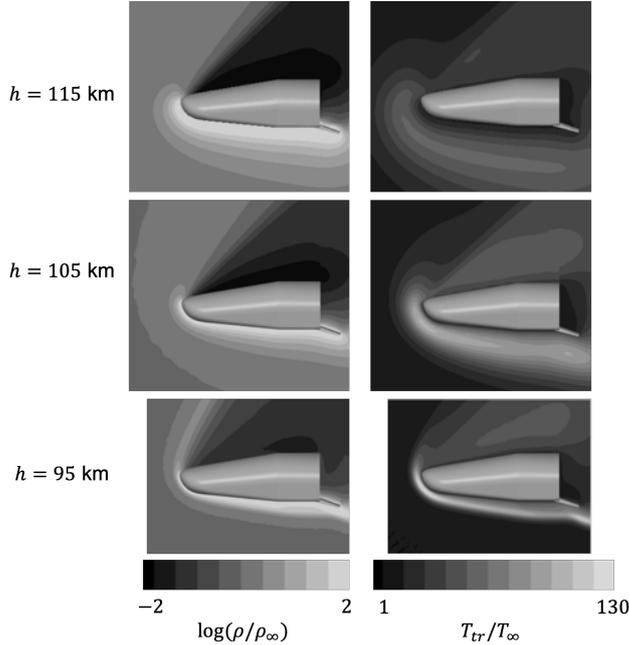


FIGURE 6.20 – Contours normalisés de la masse volumique (gauche) et de la température de translation (droite) entre 115 et 95 km.

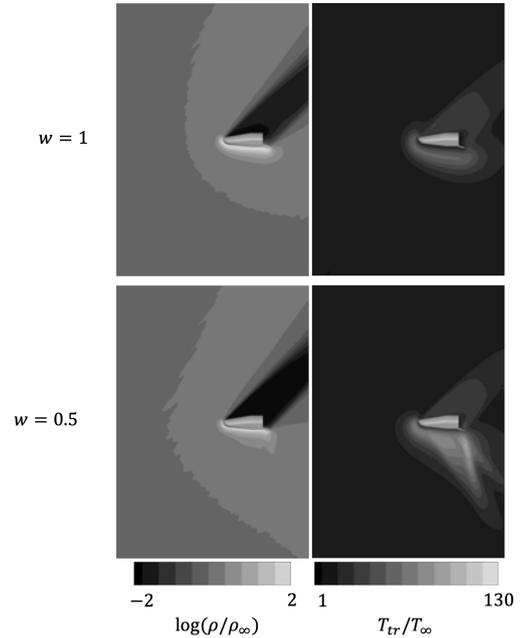


FIGURE 6.21 – Contours normalisés de la masse volumique (gauche) et de la température de translation (droite) pour plusieurs coefficients d'accommodation  $w$  à 115 km.

Un autre aspect des écoulements à haute altitude concerne l'effet du coefficient d'accommodation sur les propriétés de l'écoulement et sur les grandeurs surfaciques. Le code **SPARTA** a récemment été pourvu de plusieurs modèles d'interactions gaz-surface comprenant entre autres les modèles de Maxwell et de Cercignani, Lampis et Lord (CLL). Comme cela a été vu dans le chapitre 3, section 6, ces modèles sont les plus couramment utilisés pour la simulation d'écoulements hypersoniques raréfiés. Comme l'étude détaillée de ces deux modèles ne fait pas partie des objectifs de ce travail de thèse, une étude d'influence du coefficient d'accommodation du modèle de Maxwell seul a été réalisée.

Conformément à la discussion sur les modèles d'interactions gaz-surface présentée dans la section 6 du chapitre 3, pour le TPS d'un véhicule tel que l'IXV, une valeur du coefficient d'accommodation proche de l'unité ( $w \simeq 0.8 - 1$ ) serait attendue. Néanmoins, compte tenu de l'étude de la navette spatiale américaine faite par Moss et Bird [38] (voir section 3 du chapitre 5) dans laquelle des valeurs jusqu'à 0.5 ont été considérées physiquement réalistes, une étude d'influence similaire a été conduite pour l'IXV.

Les contours représentés sur la Figure 6.21 illustrent l'influence du coefficient d'accommodation ( $w = 1, 0.65$  et  $0.5$ ) sur la topologie de l'écoulement à 115 km d'altitude. Pour un tel niveau de raréfaction, les interactions particulières sont principalement dominées par les interactions gaz-surface. En effet, lorsque le libre parcours moyen est suffisamment important, les particules réfléchies peuvent voyager sur de larges distances avant d'interagir avec une particule incidente. Ainsi, lorsqu'une particule  $i$  d'énergie  $\epsilon_i$  est réfléchiée de façon spéculaire, elle peut retourner dans l'écoulement perturbé tout en conservant une grande quantité d'énergie qui est ensuite communiquée aux particules environnantes. En revanche, lorsque la même particule  $i$  est réfléchiée de façon diffuse, une partie de son énergie est transférée à la paroi et son énergie  $\epsilon_i^*$  est donc inférieure à  $\epsilon_i$ . Cette particule transmet donc moins d'énergie à la couche de choc, ce qui se traduit finalement

3. Dans leur étude, l'inclinaison des gouvernes est supposée nulle pour tous les points de vol considérés.

par des amplitudes de température plus faibles à travers le choc. Lorsqu'en plus l'angle d'attaque n'est pas nul, les particules réfléchies spéculairement sont renvoyées dans une région particulière ce qui entraîne une modification des propriétés de l'écoulement (Figure 6.21). A mesure que le niveau de raréfaction diminue avec l'altitude, le libre parcours moyen décroît fortement et les particules incidentes arrivent à la paroi avec moins d'énergie. Ainsi, les particules s'y trouvent piégées suffisamment longtemps pour que l'équilibre thermique soit atteint. L'excès d'énergie est donc dissipé proche de la paroi et la couche de choc est quasiment identique au cas d'une paroi totalement diffuse. A 100 km par exemple, seule la zone proche du point d'arrêt est légèrement plus énergétique que dans le cas d'une accommodation complète et cette tendance diminue encore avec l'altitude. Dans l'écoulement situé au niveau de l'extrados, la masse volumique et la température sont beaucoup plus faibles ce qui explique pourquoi ces effets sont moins visibles.

En DSMC, le modèle de collision joue un rôle important et peut influencer le résultat de façon significative. En effet, les propriétés de transport ne sont pas calculées explicitement mais sont plutôt une conséquence du modèle de collision qui est généralement ajusté de façon à reproduire des données expérimentales de diffusion et de viscosité (voir chapitre 3, section 2.3).

Comme l'expliquent Gimelshein et Wysong [65], le potentiel intermoléculaire VHS fait partie des trois améliorations majeures de la DSMC. Ce modèle offre plusieurs avantages dont l'introduction d'une dépendance de la viscosité à la température, de manière similaire à un modèle Inverse Power Law (IPL), tout en utilisant la diffusion (« scattering ») du modèle Hard Sphere (HS) qui garantit une grande facilité d'implémentation et une bonne efficacité numérique. Pour une espèce donnée, le modèle VHS se définit à partir de deux coefficients déterminés expérimentalement : le diamètre de référence  $d_{\text{ref}}^{\text{VHS}}$  et la loi de puissance  $\omega^{\text{VHS}}$  liée à la viscosité par la relation  $\mu \propto T^\omega$ . Comme indiqué plus tôt, le modèle VHS configuré avec les paramètres de Bird est le modèle de collision standard pour les calculs présentés ici. Cependant, comme indiqué dans [43], ces paramètres ont été obtenus dans des conditions expérimentales spécifiques. En effet, la viscosité de référence  $\mu_{\text{ref}}$  a été mesurée en conditions atmosphériques standards ( $T_{\text{ref}} = 273$  K et  $P = 101.325 \times 10^3$  Pa), la puissance  $\omega$  a été estimée à partir de mesures de viscosité pour  $T \in [293; 373]$  K et  $d_{\text{ref}}$  a été obtenu à partir de la relation entre  $\mu_{\text{ref}}$  et les paramètres VHS. Comme ces conditions de température ne correspondent pas du tout à celles considérées ici, ces paramètres peuvent donc être légitimement remis en question. De plus, comme discuté dans la section 2.4 du chapitre 3, le modèle VHS ne permet pas de reproduire simultanément les données de viscosité et de diffusion. Le modèle Variable Soft Sphere (VSS) est capable de pallier cette défaillance grâce à l'ajout d'un paramètre supplémentaire. Il existe alors deux manières d'implémenter ces modèles de collision dans un code DSMC. Soit les paramètres d'un modèle donné sont renseignés pour chaque espèce, auquel cas lors d'une collision, impliquant deux espèces, les paramètres de collision de la paire sont obtenus par une moyenne des paramètres des deux espèces. Soit, le modèle lit directement pour chaque paire de collisions possible les paramètres associés. Dans le premier cas on parle de procédure collision-moyennée, c'est celle de **SPARTA**, dans le deuxième cas, on parle de procédure collision-spécifique comme pour le code **MAP** [177]. Cette dernière est plus précise et physiquement pertinente pour les collisions entre des paires d'espèces distinctes.

Toujours d'après Gimelshein et Wysong [65], le modèle VSS doit être préféré lorsque des données de diffusion sont disponibles. Ainsi, afin d'évaluer l'influence d'utiliser un jeu de paramètres optimal et l'effet d'utiliser le modèle VSS plutôt que le modèle VHS, plusieurs simulations **SPARTA** ont été réalisées avec les modèles VHS et VSS et les paramètres collision-moyennée obtenus par Stephani (Tableau 1 dans [178]). Ces paramètres ( $d_{\text{ref}}$ ,  $\omega$  et  $\alpha$ ) ont été calculés par approximation de potentiels intermoléculaires réalistes à température de référence constante  $T_{\text{ref}} = 2880$  K et en faisant varier  $T$  entre 1000 et 5000 K. Les températures et vitesses obtenues à 90 km sont données sur la Figure 6.22.

D'après les profils de température de translation (Figure 6.22a) et de vitesse (Figure 6.22b), pour le modèle VHS optimisé, une couche de choc légèrement moins épaisse est obtenue. Ce résultat est cohérent avec le fait que la procédure d'ajustement décrite dans [178] vise à améliorer la cohérence

entre les propriétés de transport de solveurs DSMC et CFD. En effet, en ajustant les paramètres du modèle de collision pour approcher les propriétés de transport calculées par CFD, le comportement du solveur DSMC devrait tendre vers celui d'un solveur CFD qui a une tendance à prédire des chocs plus fins. On observe également que dans ces conditions, les modèles VHS et VSS optimisés donnent des résultats presque identiques ce qui pourrait indiquer le rôle négligeable des phénomènes de diffusion dans ces conditions.

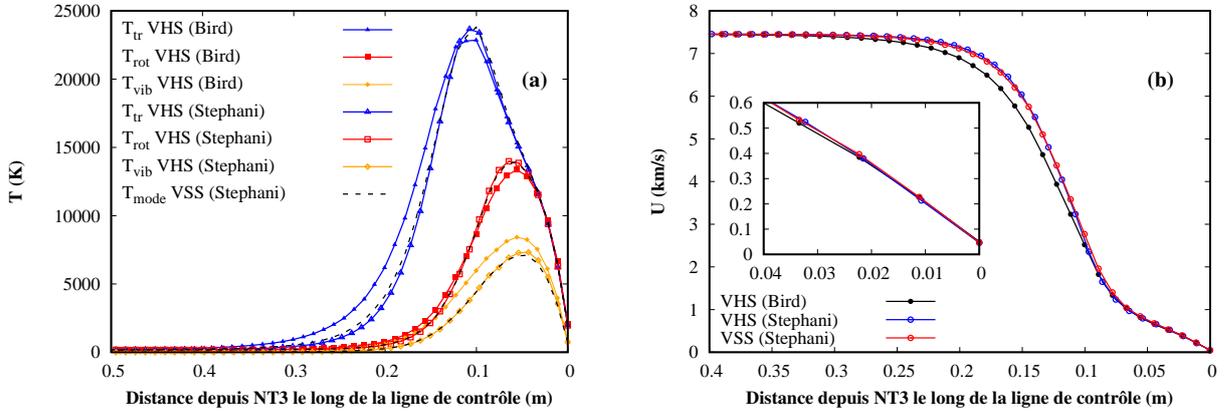


FIGURE 6.22 – Influence du modèle de collision sur les profils de température (a) et de vitesse (b) le long de la ligne de contrôle à 90 km.

Les deux sections suivantes portent sur l'analyse des résultats aérodynamiques puis la comparaison des flux numériques aux données de vol.

## 5.2 Analyse des résultats aérodynamiques

Banyai *et al.* [175, 8] ont étudié en détails l'aérodynamique de l'IXV entre 120 et 85 km en vue de la préparation de la mission. Dans cette partie, les résultats **SPARTA** sont comparés aux résultats DSMC disponibles dans la littérature. En l'absence de mesures en vol, les performances aérodynamiques théoriques du véhicule sont analysées pour les différentes conditions de vol rencontrées.

### 5.2.1 Analyse générale

Le système de coordonnées du véhicule est donné sur la Figure 6.23. La Figure 6.24 montre quant à elle l'évolution des coefficients aérodynamiques en fonction de l'altitude et pour différents coefficients d'accommodation. La Figure 6.25 montre finalement l'évolution des distributions des coefficients de pression ( $C_p$ ) et de frottement ( $C_f$ ) le long de la ligne centrale du véhicule à 115, 100 et 90 km.

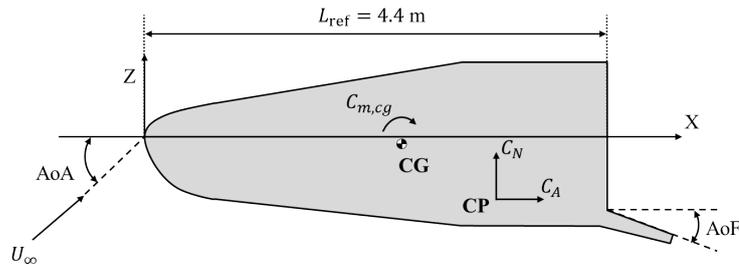


FIGURE 6.23 – Système de coordonnées de l'IXV avec le centre de gravité (**CG**) de coordonnées  $(x; y; z) = (2.575; 0; -0.079)$  m.

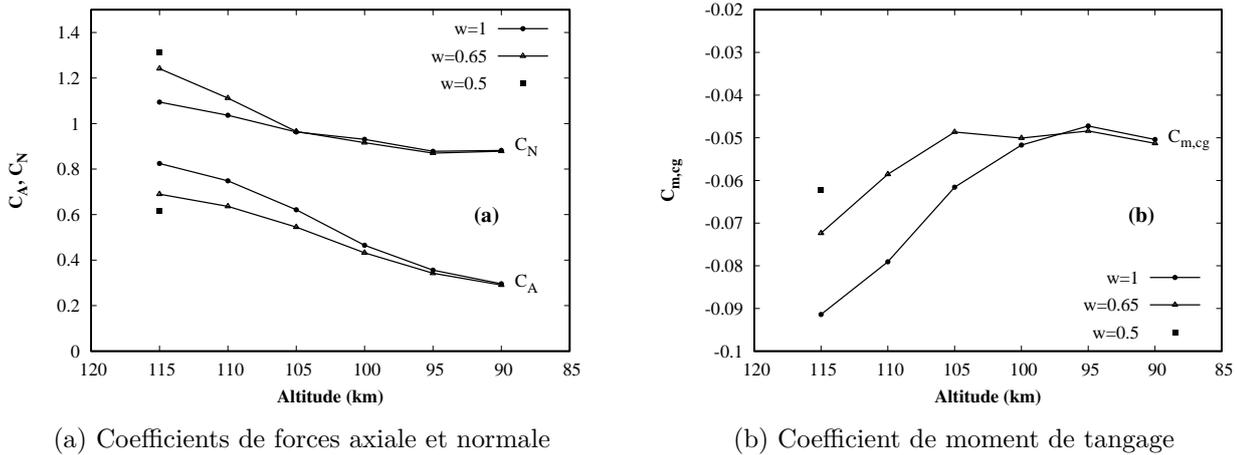


FIGURE 6.24 – Evolution des coefficients de forces axiale et normale (a) et de moment de tangage (b) entre 115 et 90 km, et pour différentes valeurs du coefficient d'accommodation  $w$ .

La première conséquence de la densification de l'air est l'accroissement rapide de la pression surfacique qui augmente d'un facteur supérieur à 2 tous les 5 km. La distribution du coefficient de pression diminue progressivement et la valeur au point d'arrêt se situe dans l'intervalle prévu par la formule analytique du régime hypersonique continu basée sur la formule de Pitot Rayleigh ( $C_{p,stag} = 1.84$  pour  $\gamma = 1.4$  et  $C_{p,stag} = 1.9$  pour  $\gamma = 1.1$ ). La distribution du coefficient de frottement chute d'une valeur moyenne autour de 0.7 à 115 km jusqu'à une valeur de 0.1 à 90 km (Figure 6.25). Comme expliqué dans la section 5.1, la réduction du frottement pariétal s'explique par la diminution des effets de viscosité à l'approche du régime continu.

En termes de forces et moments aérodynamiques, l'augmentation de la pression se traduit par une augmentation des coefficients de force axiale ( $C_A$ ) et de moment ( $C_{m, cg}$ ) ainsi qu'une diminution du coefficient de force normale ( $C_N$ ). Comme indiqué dans [8], les faibles valeurs de  $C_{m, cg}$  (Figure 6.24b) montrent la stabilité du véhicule pendant la partie transitionnelle de sa rentrée et l'augmentation progressive vers une valeur nulle à l'approche du régime continu assure une transition stable vers les couches plus denses de l'atmosphère. Enfin, comme l'indiquent Banyiai *et al.*, pour les altitudes supérieures à 100 km, le moment résultant des forces aérodynamiques pourrait être incapable de contrebalancer un éventuel mouvement inertiel dû à des perturbations quelconques. Toutefois, la stabilité des données de vol et le comportement nominal du véhicule montrent que de telles perturbations n'ont pas eu lieu pendant la portion transitionnelle de rentrée.

### 5.2.2 Analyse de sensibilité au coefficient d'accommodation

Concernant le coefficient d'accommodation, la Figure 6.24 montre que pour les altitudes les plus hautes, la diminution du coefficient d'accommodation entraîne l'augmentation des coefficients aérodynamiques. Comme l'explique Padilla [95], une diminution du coefficient d'accommodation induit une augmentation de l'énergie du gaz autour du véhicule dont bénéficie la pression pariétale. Ce comportement est illustré sur la Figure 6.25a où une augmentation significative de la pression pariétale est observée à 115 km lorsque le coefficient d'accommodation est réduit. On notera que le comportement est inverse pour le frottement pariétal (Figure 6.25b) mais avec une influence moindre sur l'évolution des forces aérodynamiques. Conformément aux observations de la section précédente, les Figures 6.24 et 6.25 montrent que la sensibilité au coefficient d'accommodation décroît fortement avec l'altitude.

### 5.2.3 Analyse de sensibilité aux autres paramètres

En DSMC, les quantités surfaciques de pression se calculent à partir du bilan de quantité de mouvement à la surface. Lorsqu'une particule  $i$  percute un élément de surface  $\delta s$ , le bilan de quantité

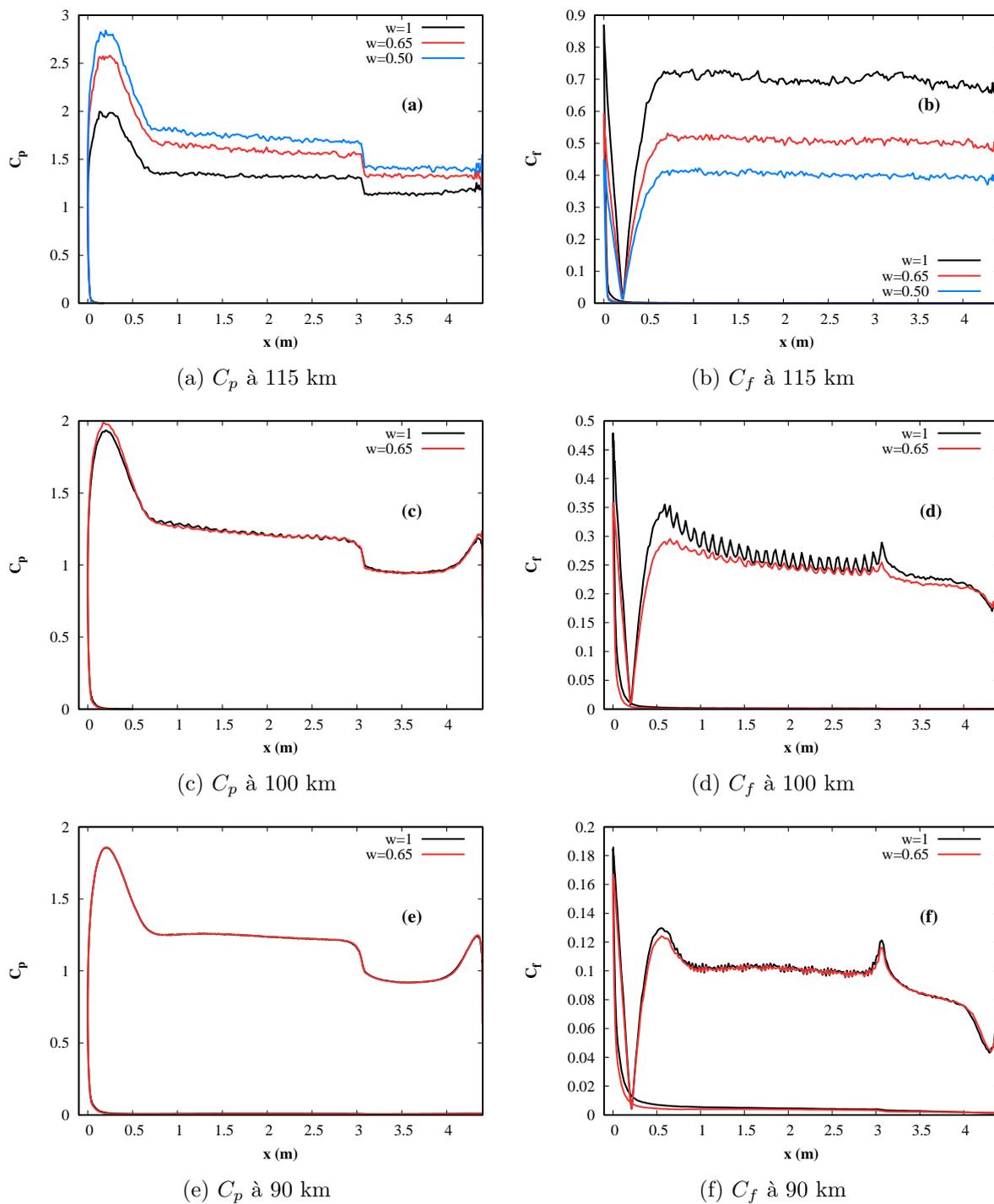


FIGURE 6.25 – Influence du coefficient d’accommodation sur les distributions des coefficients de pression (gauche) et de frottement (droite) le long de la ligne centrale à l’intrados à 115 (a-b), 100 (c-d) et 90 (e-f) km.

de mouvement  $\delta\vec{p}_i$  s'écrit :

$$\delta\vec{p}_i = m_i (\vec{v}_i' - \vec{v}_i), \quad (6.8)$$

où  $m_i$  est la masse de la particule et,  $\vec{v}_i'$  et  $\vec{v}_i$  désignent respectivement les vitesses post et pré-collision de la particule. A chaque pas de temps  $\Delta t$ , les composantes de pression se calculent alors à partir du changement cumulé de quantité de mouvement. Si l'on considère la pression normale  $P_s$  appliquée à l'élément  $\delta s$  pour un pas de temps donné, sa valeur est donnée par l'expression suivante :

$$P_s = - \sum_i^{n_t} \frac{\delta\vec{p}_i \cdot \vec{n}_s}{\delta s \Delta t f_{\text{num}}}, \quad (6.9)$$

avec  $n_t$  le nombre de particules impactantes pendant le pas de temps,  $\vec{n}_s$  la normale sortante à l'élément de surface et  $f_{\text{num}}$  le ratio entre le nombre de particules réelles et le nombre de particules numériques.

La relation (6.8) montre que, puisque le changement de quantité de mouvement est proportionnel à la différence de vitesses post et pré-collision, les composantes de pression qui en résultent sont faiblement sensibles au modèle de collision intermoléculaire, à la composition chimique du gaz et aux modes internes. Sur la Figure 6.26 sont tracées les distributions de  $C_p$  et  $C_f$  le long de la ligne centrale à l'intrados du véhicule à 115 et 90 km avec une incertitude de 15% sur la masse volumique. Cette figure montre que, comme la pression surfacique est proportionnelle à la masse volumique, une incertitude sur cette dernière se traduit par une incertitude d'un niveau similaire sur les coefficients de pression et de frottement.

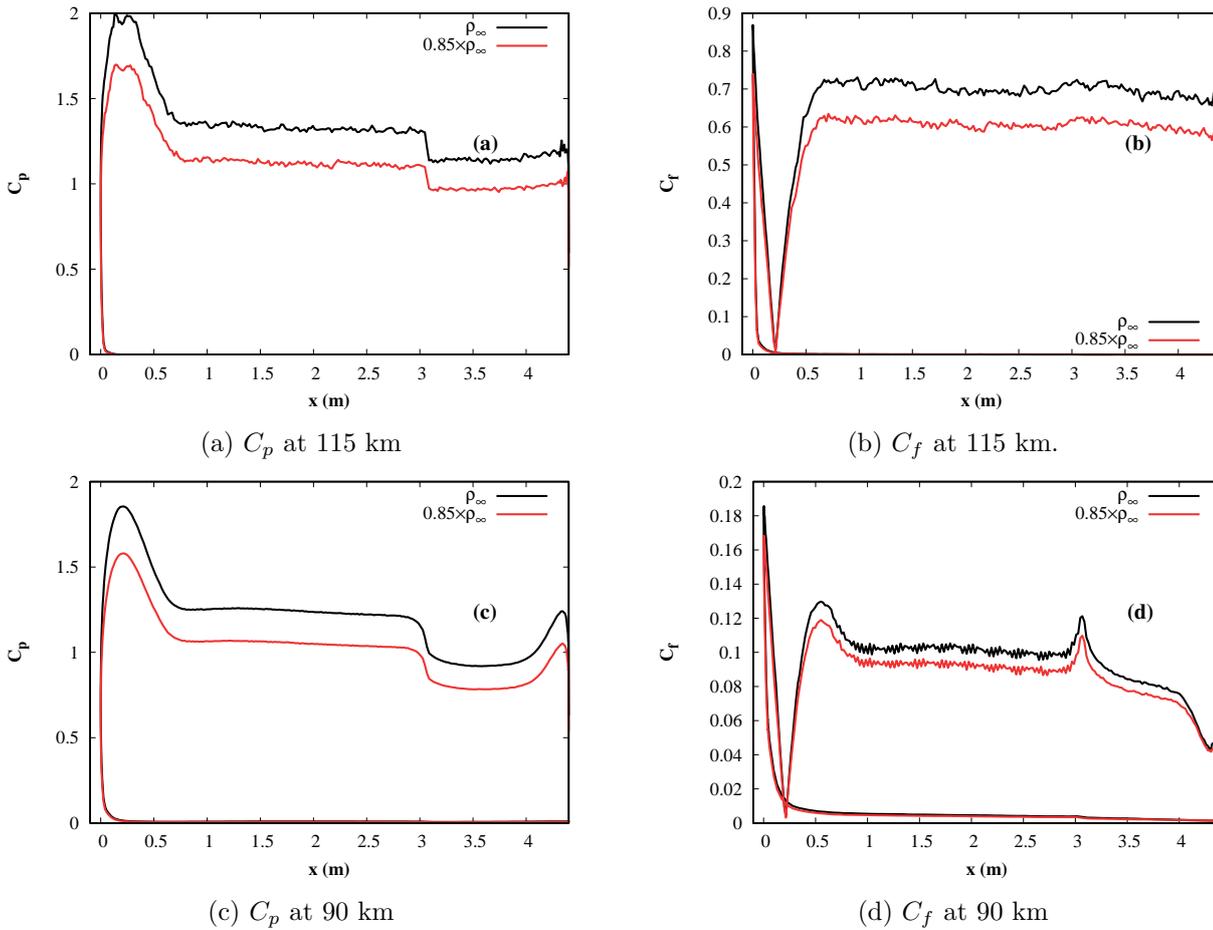


FIGURE 6.26 – Influence d'une incertitude de 15% sur la masse volumique sur les distributions des coefficients de pression (gauche) et de frottement (droite) le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (a-b) et 90 (c-d) km.

### 5.3 Analyse des résultats aérothermodynamiques

#### 5.3.1 Analyse générale

Les données de vol et les flux de chaleur obtenus par DSMC pour différents points de vol et avec différents coefficients d'accommodation sont visibles sur les Figures 6.27, 6.28, 6.29 et 6.30. Conformément à la demande de TASI, les figures comportant des données de vol sont représentées dans un format adimensionné (toutes les valeurs ont été divisées par le même flux de référence  $q_{\text{ref}}$ ). Toutefois, parmi les vingt thermocouples considérés ici, les flux de chaleur de onze d'entre eux sont disponibles en Annexe E.3 (pages 268-271) du manuscrit de thèse [47].

Si l'on se concentre tout d'abord sur les données de vol uniquement, la Figure 6.27 montre qu'entre 115 et 100 km, les thermocouples **WT62**, **WT48** et **WT12** situés sur l'intrados du véhicule semblent se « réveiller » progressivement. En effet, pour ces TC, les flux de chaleur reconstruits à partir des mesures de température sont anormalement bas jusqu'à 110 km. Pour les altitudes plus basses, les flux de chaleur s'alignent finalement avec les valeurs obtenues pour les capteurs environnants. Cette tendance peut être due au fait que pour les altitudes les plus hautes, la température pariétale sur l'intrados est trop proche de la valeur minimale mesurable par les thermocouples. Quelles que soient les altitudes considérées, les valeurs des thermocouples **WT12** et **NT2** ne sont pas cohérentes avec les valeurs des thermocouples voisins ce qui indique qu'ils n'ont vraisemblablement pas fonctionné correctement.

Sur les Figures 6.28, 6.29 et 6.30, on constate une tendance similaire. Pour les altitudes comprises entre 115 et 105 km, les flux de chaleur expérimentaux suivent l'allure attendue. Toutefois, pour les altitudes inférieures à 105 km, les thermocouples **WT41**, **WT66** et **WT80** situés au niveau de l'« épaulement latéral » (*i.e.* pour  $\theta \in [30^\circ; 50^\circ]$  sur les Figures 6.28 à 6.30) captent le pic de chaleur mais avec une amplitude considérablement plus faible que celle des résultats numériques.

L'analyse comparative des flux de chaleur numériques et expérimentaux montre que, quelle que soit l'altitude, les résultats DSMC standards (*i.e.* obtenus avec  $w = 1$ ) sont considérablement plus élevés que les données de vol. Le Tableau 6.5 résume les différences relatives entre les résultats expérimentaux et numériques obtenus au niveau de certains des capteurs visibles sur la Figure 6.27. La différence étonnamment grande pour les altitudes de 100 et 95 km par rapport à celles des points de vol voisins suggère la présence d'anomalies atmosphériques qui auraient pu se produire pour ces altitudes et impacter les conditions atmosphériques.

Par ailleurs, les résultats montrent, comme attendu, que la densification de l'atmosphère se traduit par une forte augmentation du flux de chaleur. Afin d'évaluer les potentielles sources d'écarts entre les résultats numériques et les données de vol, une étude de sensibilité à plusieurs paramètres a été entreprise. Ces paramètres incluent le coefficient d'accommodation, le modèle de relaxation chimique et le modèle de cinétique chimique, le modèle de collision et l'incertitude sur les données atmosphériques.

Altitude (km)	$(q_{\text{num}} - q_{\text{exp}})/q_{\text{exp}}$ (%)				
	<b>WT62</b>	<b>WT36</b>	<b>WT14</b>	<b>NT1</b>	<b>NT3</b>
115	207	109	109	95	92
110	104	47	40	46	43
105	75	60	45	47	42
100	130	86	70	106	96
95	107	83	82	104	96
90	47	29	27	50	43

TABLEAU 6.5 – Résumé des différences relatives entre les résultats DSMC et les données de vol pour différents capteurs le long de la ligne centrale.

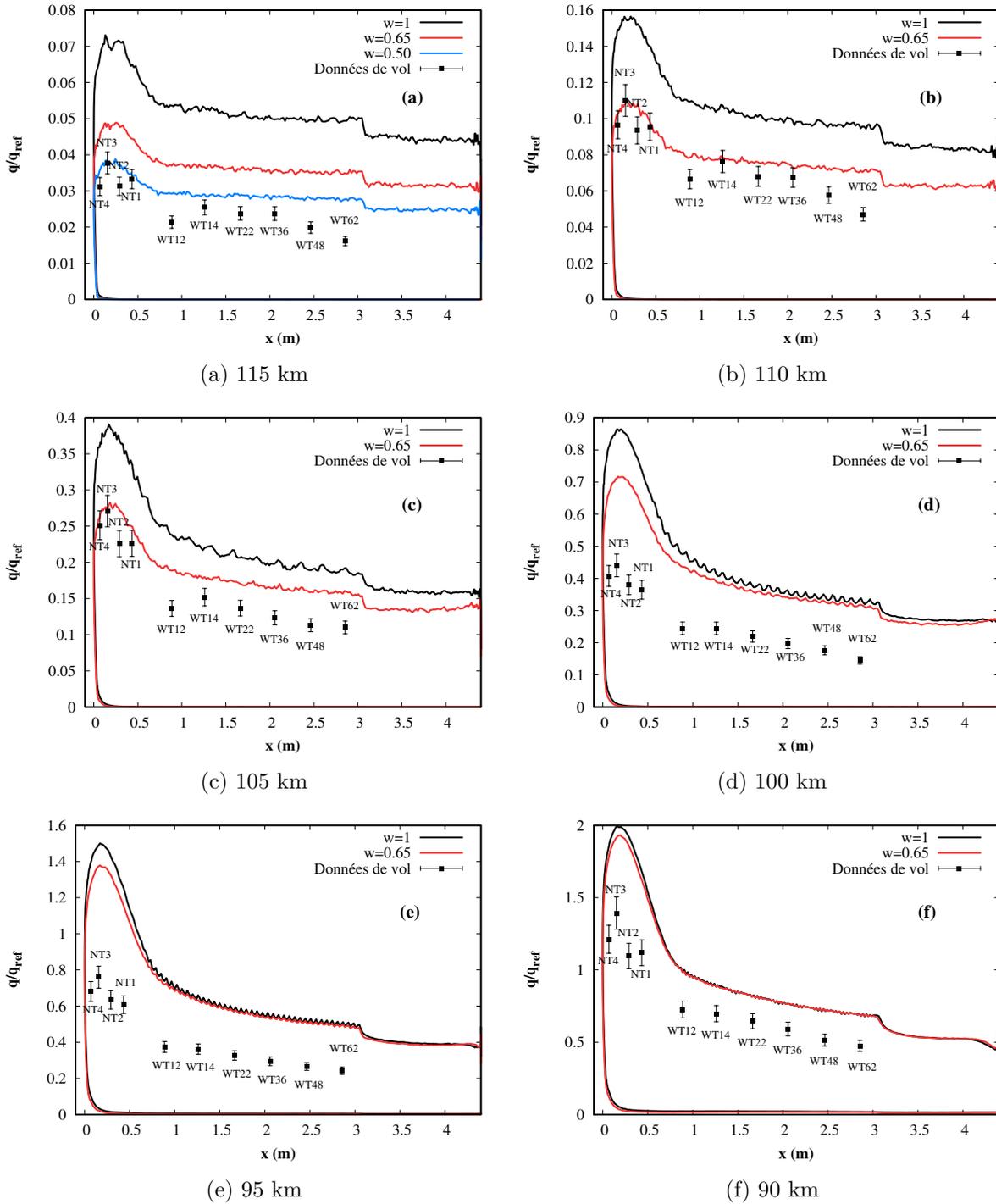


FIGURE 6.27 – Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne centrale à l'intrados pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km.

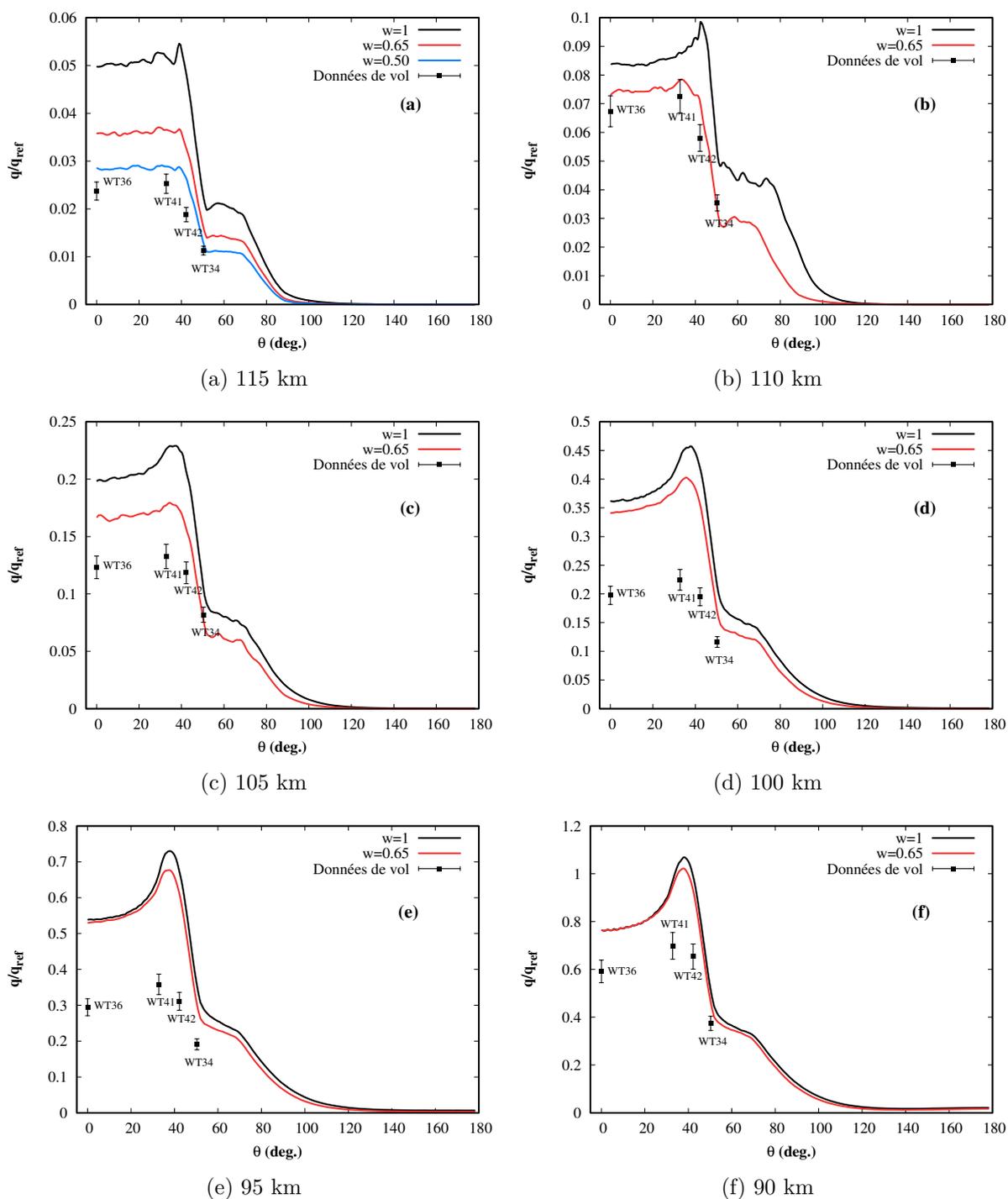


FIGURE 6.28 – Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne  $x = 2.06$  m pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km.

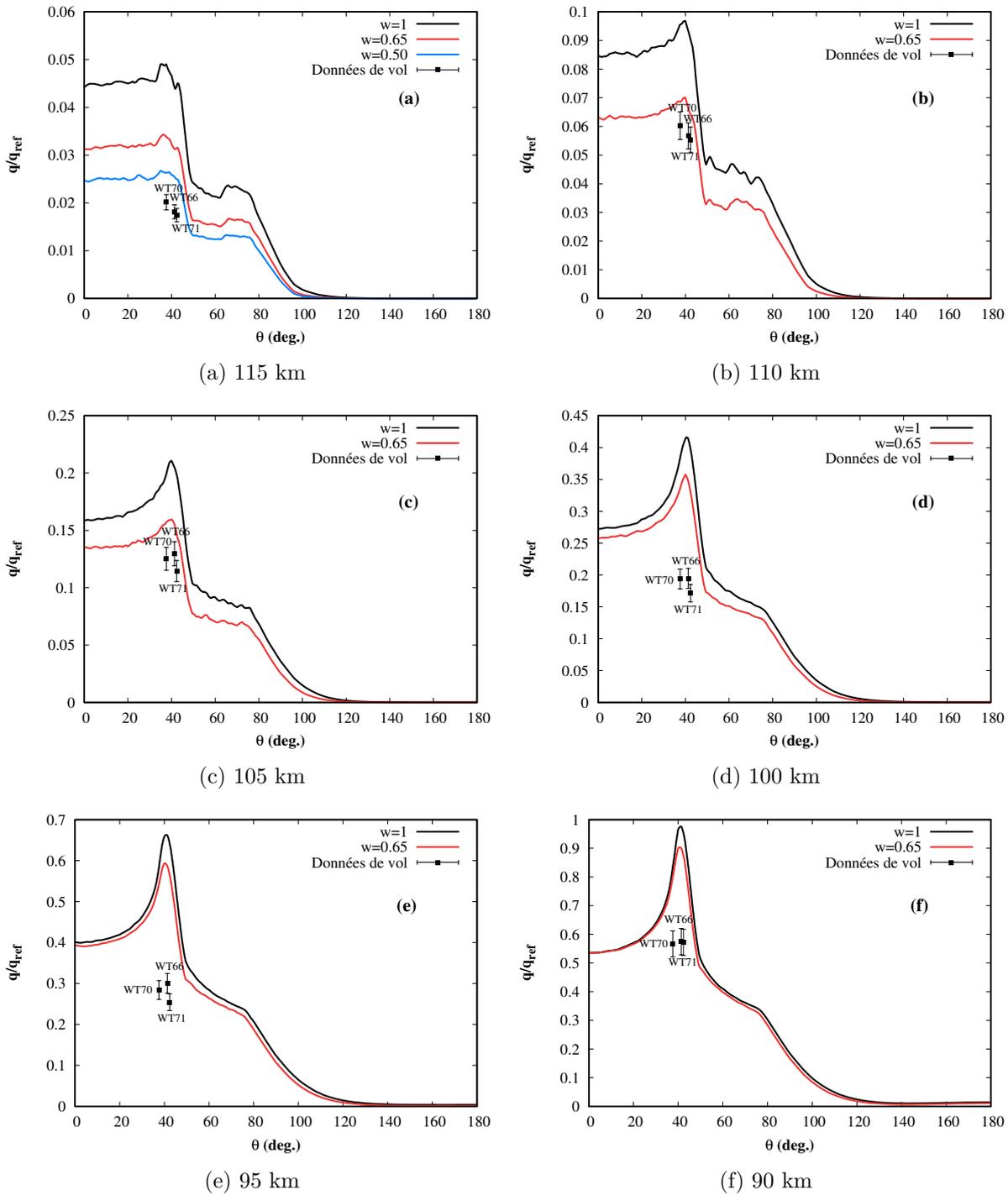


FIGURE 6.29 – Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne  $x = 3.52$  m pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km.

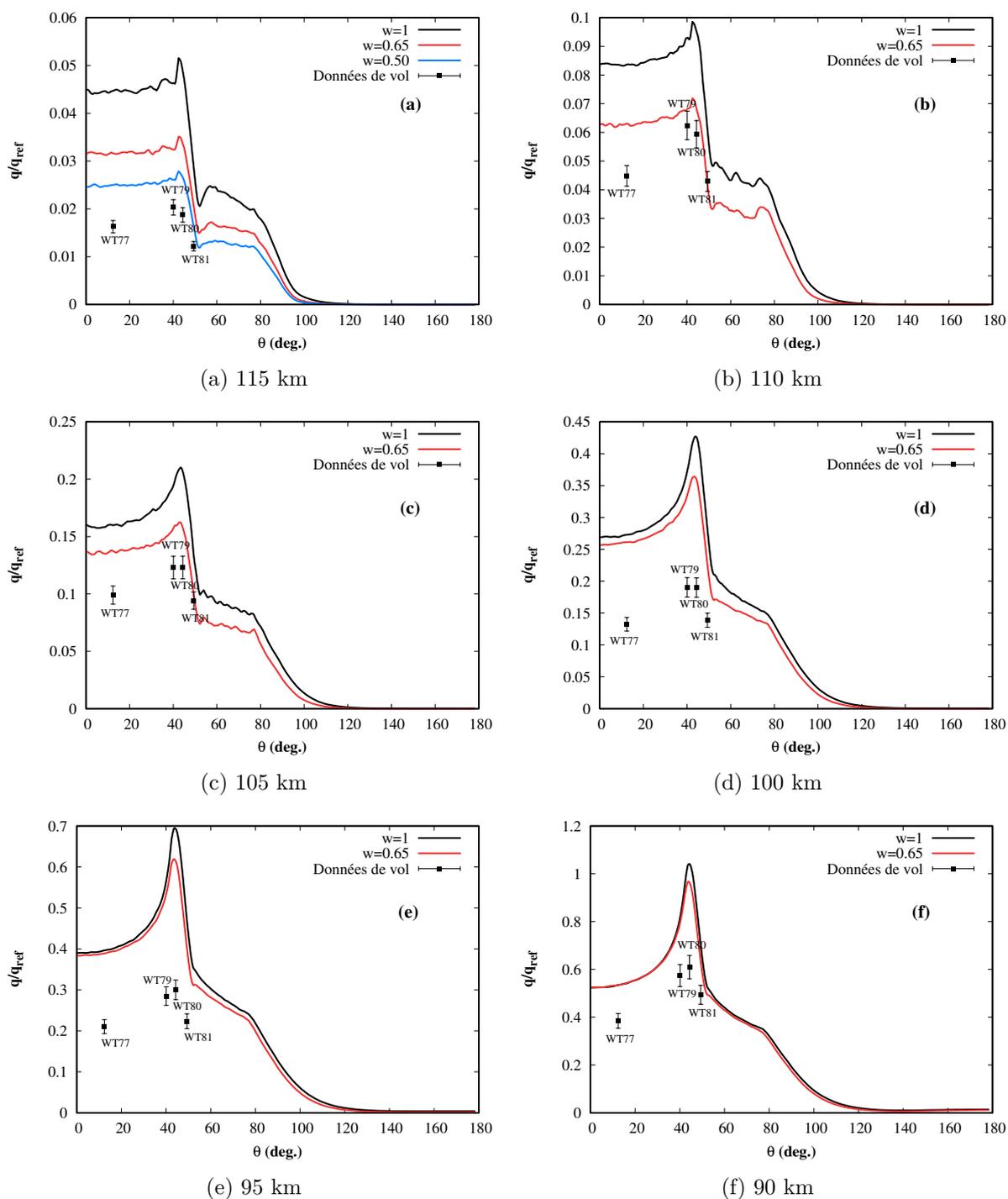


FIGURE 6.30 – Comparaison des données de vol et de la distribution du flux de chaleur DSMC le long de la ligne  $x = 3.99$  m pour plusieurs valeurs du coefficient d'accommodation à 115 (a), 110 (b), 105 (c), 100 (d), 95 (e) et 90 (f) km.

### 5.3.2 Analyse de sensibilité au coefficient d'accommodation

Afin d'étudier l'influence du coefficient d'accommodation sur le flux de chaleur calculé, les simulations **SPARTA** ont été réalisées pour deux valeurs de coefficient différentes,  $w = 1$  et  $w = 0.65$ , pour l'ensemble des points de vol considérés.

Comme le montrent les Figures 6.27 à 6.30, entre 115 et 105 km, l'influence du coefficient d'accommodation sur le flux de chaleur numérique est assez importante pour qu'un bon accord soit atteint en faisant varier ce paramètre. Ainsi à 110 km, les résultats numériques obtenus avec  $w = 0.65$  sont en bon accord avec les données de vol, en particulier dans la région du nez. Cependant, cet aspect n'est pas entièrement satisfaisant puisque, pour approcher les données de vol, un coefficient d'accommodation différent serait nécessaire par point de vol mais également par zone du véhicule (nez et ventre). De plus, la densification de l'atmosphère se traduit par une diminution de la sensibilité au coefficient d'accommodation. Ainsi, en dessous de 100 km, l'effet du coefficient d'accommodation sur le flux de chaleur est négligeable et limité à la région du nez.

Comme cela a été vu dans la section 5.1, les réflexions spéculaires privent la paroi d'une certaine partie de l'énergie des particules impactantes. Pour une altitude donnée où le niveau de raréfaction est suffisamment élevé, il en résulte un flux de chaleur considérablement plus faible que pour une paroi supposée totalement accommodante. Cette diminution du flux de chaleur est quasiment proportionnelle au coefficient d'accommodation<sup>4</sup> (Figures 6.27a-6.27c). Cela vient du fait que plus le coefficient d'accommodation est faible, moins il y a d'énergie qui est transférée à la paroi pour accommoder l'énergie thermique du gaz à celle de la paroi [95]. A mesure que l'altitude décroît, ici en dessous de 100 km, l'influence du coefficient d'accommodation s'atténue jusqu'à ce que les effets deviennent notables uniquement dans la région du nez du véhicule. Ce phénomène peut être expliqué par le mouvement des particules guidé par les lignes de courant qui les éloignent du nez avant que l'équilibre thermique ne soit atteint. Toutefois, comme les particules restent proches de la paroi, les particules réfléchies se meuvent le long de la paroi et se mélangent avec les particules incidentes. Ainsi, lorsque l'équilibre thermique n'est pas déjà atteint, les particules précédemment réfléchies spéculairement continuent d'interagir avec la paroi parfois en transférant une quantité d'énergie supplémentaire, supérieure à celle des particules venant de l'écoulement amont. Ce supplément d'énergie permet alors de compenser la part de réflexion spéculaire. Au final, un flux identique est obtenu en aval du nez (Figures 6.27d à 6.27f) et de part et d'autre de l'épaule (*i.e.* pour  $\theta < 40^\circ$  et  $\theta > 50^\circ$  - Figures 6.28d à 6.28f, 6.29d à 6.29f, 6.30d à 6.30f).

Compte tenu des similarités entre les vols STS et celui de l'IXV, ces résultats peuvent être analysés en parallèle des travaux de Moss et Bird [38] (section 3 du chapitre précédent) dont les résultats numériques ne sont pas parvenus à reproduire les mesures du vol STS-2 à 110 km même avec un coefficient d'accommodation de 0.5. Cette inhabilité peut s'expliquer par une connaissance approximative des conditions atmosphériques. En effet, la masse volumique utilisée pour les simulations de l'IXV à 110 km est supérieure de 60% à celle utilisée par Moss et Bird empêchant probablement la reproduction des données de vol, même avec un faible coefficient d'accommodation. Cependant, comme discuté dans la section 5.1, l'utilisation d'une telle condition de paroi n'est a priori pas justifiée et la faible valeur des mesures STS à 110 km pourrait venir, comme dans le cas de l'IXV, de l'utilisation d'une instrumentation inappropriée pour le régime raréfié.

En DSMC, le flux de chaleur pariétal se calcule à partir d'un bilan énergétique à la paroi. Pour une particule  $i$  interagissant avec la paroi, l'énergie cinétique transférée  $\delta\epsilon_{k,i}$  s'écrit :

$$\delta\epsilon_{k,i} = \frac{1}{2}m_i (v_i'^2 - v_i^2). \quad (6.10)$$

La perte d'énergie  $\delta\epsilon_{\text{mode},i}$  associée à un mode interne quelconque est donnée par :

$$\delta\epsilon_{\text{mode},i} = \begin{cases} \epsilon'_{\text{mode},i} - \epsilon_{\text{mode},i} & \text{si } i \text{ est polyatomique,} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (6.11)$$

4. L'expression du flux de chaleur en régime moléculaire libre obtenue à partir de la théorie cinétique des gaz donne un flux de chaleur proportionnel au coefficient d'accommodation [1].

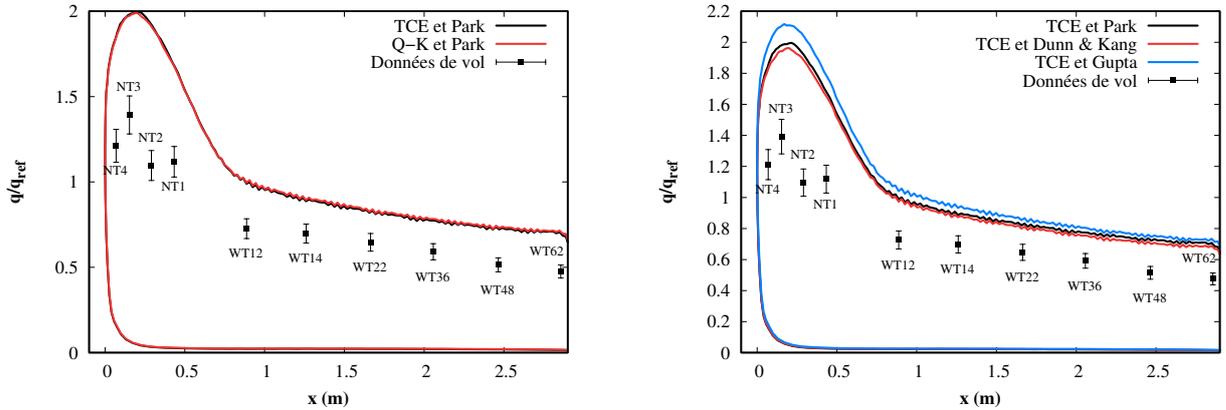
où  $\epsilon'_{\text{mode},i}$  et  $\epsilon_{\text{mode},i}$  désignent respectivement l'énergie post et pré-collision d'un mode d'énergie interne donné. Finalement, le flux de chaleur total  $q_s$  transmis à l'élément de surface  $\delta s$  pendant un pas de temps donné s'écrit :

$$q_s = - \sum_i^{n_i} \frac{\delta \epsilon_{k,i} + \delta \epsilon_{\text{rot},i} + \delta \epsilon_{\text{vib},i}}{\delta s \Delta t f_{\text{num}}}. \quad (6.12)$$

Cette fois, l'équation (6.10) montre que le flux de chaleur n'est pas fonction d'une simple différence entre les vitesses post et pré-collision mais une différence à l'ordre 2. Par conséquent, on s'attend à une dépendance plus forte du flux de chaleur à certains facteurs mentionnés précédemment (modèle de collision intermoléculaire et composition chimique). L'évaluation de la sensibilité à ces paramètres ainsi qu'à la masse volumique s'est effectuée en réalisant des simulations complémentaires présentées ci-dessous.

### 5.3.3 Sensibilité aux modèles de relaxation et de cinétique chimique

Comme discuté dans la section 5 du chapitre 3, il existe plusieurs modèles de relaxation chimique pour la DSMC. Bien que les modèles *ab initio* soient toujours en développement et ont récemment été utilisés pour la simulation d'un écoulement d'air complexe à 5 espèces [6], ce type de modèle n'est pas encore implémenté dans la majorité des codes DSMC. Les modèles les plus utilisés sont les modèles Total Collision Energy (TCE) et Quantum Kinetic (Q-K) introduits respectivement dans les parties 5.1 et 5.2 du chapitre 3. La Figure 6.31a montre les flux de chaleur obtenus avec les modèles TCE et Q-K le long de la ligne centrale à 90 km avec la cinétique de Park et dans les conditions de simulation standards.



(a) Flux de chaleur DSMC obtenus avec la cinétique chimique de Park et les modèles TCE et Q-K.

(b) Flux de chaleur DSMC obtenus avec les cinétiques chimiques de Park, Gupta et Dunn & Kang.

FIGURE 6.31 – Influence des modèles de relaxation chimique (a) et de cinétique chimique (b) sur la distribution du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados de l'IXV à 90 km. Comparaison avec des données de vol.

Bien que les fichiers résultats de **SPARTA** indiquent des nombres d'occurrence des réactions chimiques bien différents avec les deux modèles, aucune différence n'est visible entre les deux flux de chaleur obtenus. Compte tenu des conditions thermiques de l'écoulement ( $T_{\text{tr}} < 25\,000$  K), ce résultat s'accorde avec le commentaire de Bird sur la concordance des modèles lorsqu'ils sont employés avec des données fiables [86]. Ce résultat atteste également de la précision du modèle TCE près de 40 ans après son apparition [65].

En plus de sa simplicité et de son efficacité, le modèle TCE est capable de reproduire n'importe quel taux de réaction à l'équilibre, tout en étant applicable à des écoulements en déséquilibre chimique [65], à condition de connaître les coefficients de la loi d'Arrhenius des vitesses de réactions. Comme il existe plusieurs jeux de coefficients de cinétique chimique, le modèle TCE peut fournir

autant de solutions qu'il existe de modèles de cinétique chimique. Déterminer l'influence d'un modèle de cinétique chimique, plus ou moins rapide, n'est pas chose aisée. A priori, plus la cinétique chimique serait rapide, plus il devrait y avoir de dissociations et de recombinaisons. Toutefois, en régime raréfié, les conditions de pression ne permettent pas d'apporter suffisamment d'énergie aux réactions de recombinaison pour qu'elles se produisent. A contrario, les réactions endothermiques de dissociation se produisent et consomment une partie de l'énergie de l'écoulement ce qui se traduit finalement par une diminution du flux de chaleur. Pour un modèle de cinétique plus lente, moins de dissociation entraînerait alors un flux de chaleur plus élevé. En pratique, des réactions endothermiques sont en compétition avec des réactions d'échange inverse exothermiques et les taux de réaction d'un modèle à l'autre ne varient pas nécessairement tous dans le même sens. Par conséquent, les modèles cinétiques ne sont pas aussi facilement classifiables. En effet, Wang *et al.* [179] ont étudié les performances de quatre modèles de cinétique chimique (Dunn & Kang, Park de 1987, Park de 1991 et Gupta) pour la simulation du flux de chaleur appliqué à trois véhicules hypersoniques (ELECTRE, Apollo, et la navette spatiale américaine). Leurs résultats montrent que pour les véhicules étudiés, les modèles de cinétique chimique produisent des flux de chaleur similaires et en bon accord avec les données de vol disponibles pour les géométries « simples » (*i.e.* ELECTRE et la ligne centrale de la navette). Pour les régions plus complexes (*i.e.* au niveau de l'épaule à l'intrados d'Apollo et du bord d'attaque de l'aile de la navette) les modèles présentent des différences plus marquées. Une autre conclusion des auteurs est qu'à l'heure actuelle, la cinétique chimique est un processus complexe pour lequel tous les phénomènes ne sont pas encore bien compris [179].

La Figure 6.31b représente les flux de chaleur obtenus par DSMC avec les cinétiques de Park, Gupta et Dunn & Kang. L'influence des modèles se situe principalement dans la région du nez où les températures dans le gaz sont les plus sévères et donc où les différences de taux de réaction ont les conséquences les plus marquées sur le flux de chaleur. Un très bon accord est observé entre les modèles de Park et Dunn & Kang puisque la différence relative entre les deux flux de chaleur obtenus est inférieure à 2%. Avec le modèle de Gupta, l'écart est plus important (environ 6% par rapport au modèle de Park) mais il reste tout de même très faible.

En résumé, la comparaison des modèles de relaxation et de cinétique chimique a mis en évidence des différences modérées qui ne permettent pas d'expliquer l'écart entre les résultats numériques et les données de vol.

### 5.3.4 Sensibilité au modèle de collision

La partie 5.1 de ce chapitre a mis en évidence des différences entre le champ calculé à 90 km avec le modèle VHS de Bird et les modèles VHS/VSS configurés avec les paramètres de Stephani [178]. Par ailleurs, Moss et Bird [38] avaient déjà pointé l'importance du modèle de collision pour la reconstruction du flux de chaleur. Leur article fait mention de différences pouvant aller jusqu'à 10% selon le paramétrage du modèle VHS.

Les résultats reportés sur la Figure 6.32b montrent qu'à 90 km, en comparaison au modèle VHS standard, le modèle VHS optimisé induit une diminution du flux de chaleur comprise entre 10 et 20 kW/m<sup>2</sup>, respectivement dans les régions de l'intrados et du nez. En termes de différences relatives, cela équivaut à une diminution du flux de chaleur de 20 et 13% respectivement. Conformément aux observations concernant les champs de température et de vitesse, les deux modèles optimisés donnent des résultats très similaires pour le flux de chaleur. A 115 km, l'ensemble des modèles de collision donne des résultats équivalents (Figure 6.32a) ce qui indique que contrairement au coefficient d'accommodation, l'influence du modèle de collision semble décroître lorsque l'altitude augmente. Cette observation est cohérente avec le fait qu'à haute altitude, les collisions gaz-surface sont prépondérantes par rapport aux collisions intermoléculaires.

Bien que le flux de chaleur obtenu à 90 km avec les paramètres de Stephani soit bien plus proche des mesures que celui obtenu avec le modèle VHS standard, le modèle de collision ne permet pas d'expliquer à lui seul les différences entre les résultats numériques et les données de vol. En effet, le modèle de collision a peu d'influence à 115 km, et même à 90 km, les écarts relatifs aux mesures se situent entre 15% (**WT36**) et 23% (**NT3**). De plus, la procédure de détermination des paramètres

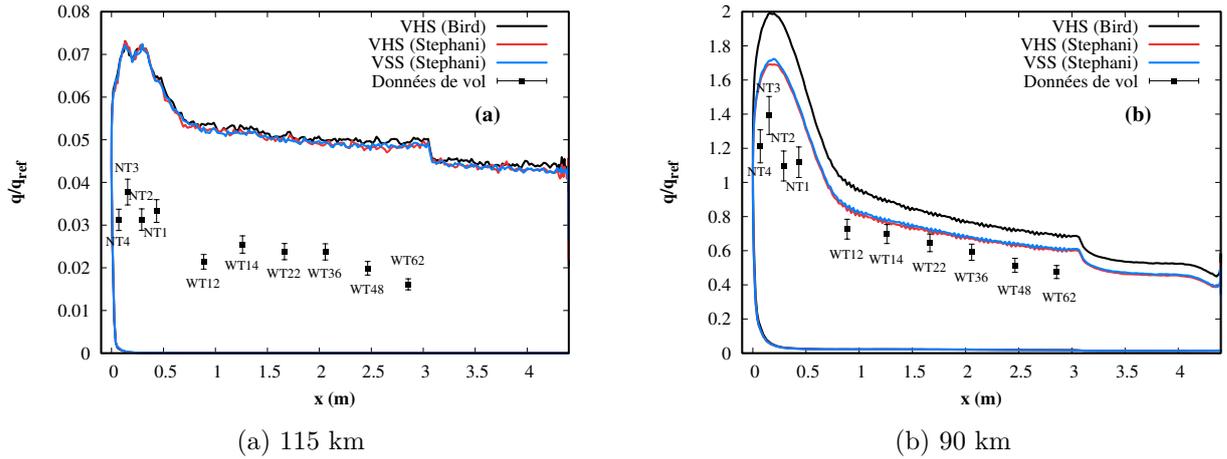


FIGURE 6.32 – Influence du modèle de collision sur la distribution du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (ab) et 90 (c) km. Comparaison avec des données de vol.

présentée par Stephani [178] est effectuée entre 1000 et 5000 K à 2300 Pa ce qui ne correspond pas exactement aux conditions considérées. Cet aspect suggère que l'obtention de meilleurs résultats serait envisageable avec un jeu de paramètres plus approprié. L'approximation des paramètres de collision sur une plage de température plus large pourrait toutefois s'avérer difficile puisque les paramètres des modèles VHS et VSS ne dépendent pas de la température [1]. Higdon *et al.* [180] ont proposé une autre méthode pour calculer les paramètres d'un modèle VHS pour un mélange d'hydrogène  $H_2$  et d'hélium He en utilisant les paramètres d'intégrales de collisions sur des plages de température comprises entre 100 et 10 000 K. Une telle procédure présuppose néanmoins d'avoir accès aux données nécessaires au calcul des intégrales de collision pour les espèces considérées.

### 5.3.5 Sensibilité aux conditions atmosphériques

Le dernier facteur de sensibilité étudié est la masse volumique de l'air au point de vol considéré. Les résultats de ces calculs sont donnés sur la Figure 6.33.

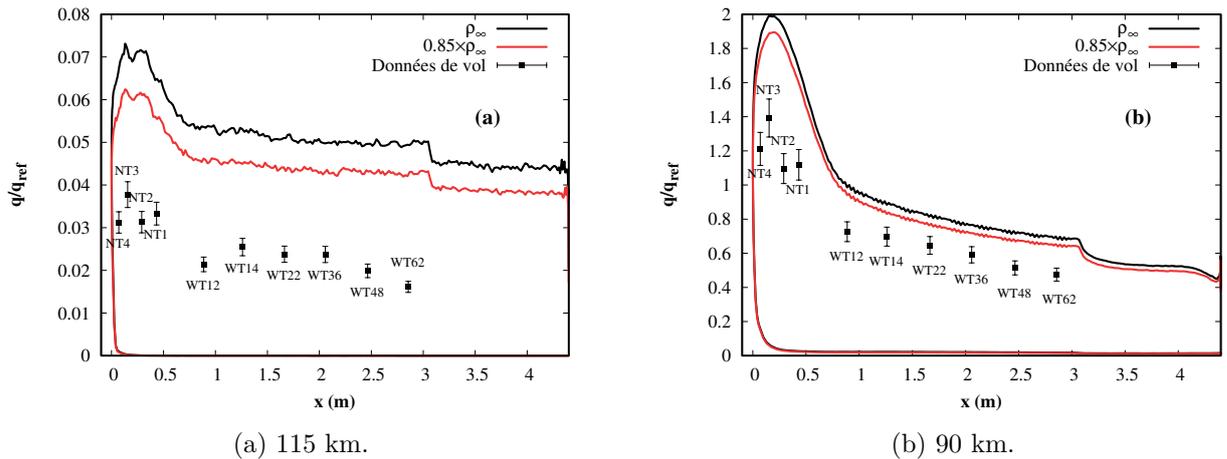


FIGURE 6.33 – Influence d'une incertitude de 15% sur la masse volumique sur la distribution du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados à 115 (ab) et 90 (c) km. Comparaison avec des données de vol.

A haute altitude, le flux de chaleur prévu par la théorie moléculaire libre est directement proportionnel à la masse volumique [43, 1]. Ainsi, à 115 km, le flux de chaleur obtenu avec une diminution de 15% de la masse volumique est 13% plus faible. Pour l'altitude la plus basse, le flux de chaleur

varie proportionnellement à la racine carrée de la masse volumique [181] (cf. section 2 du chapitre 5). A 90 km, une diminution de 15% de la masse volumique se traduit par un flux de chaleur 5% plus faible. Ainsi, de façon similaire au coefficient d'accommodation, la masse volumique joue un rôle prépondérant dans la prévision du flux de chaleur à haute altitude. Toutefois, bien que l'influence de la masse volumique et l'incertitude sur sa valeur diminuent toutes deux à mesure que l'on descend en altitude, l'écart entre la masse volumique estimée et sa valeur réelle au-dessus de 85 km est probablement supérieure à 15%. Ceci pourrait induire une surestimation significative du flux réel.

L'analyse des résultats DSMC a mis en évidence des différences importantes avec les données de vol. Parmi les sources possibles d'écart, le coefficient d'accommodation et la masse volumique se sont imposés comme les sources les plus influentes sur le flux de chaleur à haute altitude. Les résultats DSMC ont également montré que les modèles de relaxation et de cinétique chimique ont une influence plus faible et dans la région du nez uniquement. A basse altitude, l'utilisation de modèles de collision avec des paramètres optimisés semble rapprocher le flux de chaleur numérique des données de vol tandis qu'à 115 km, les différents modèles donnent des résultats équivalents. Une incertitude supérieure à 15% sur la masse volumique combinée à l'utilisation d'un modèle adéquatement paramétré pourrait conduire à une meilleure correspondance pour les altitudes les plus basses.

## 6 Analyse des résultats CFD versus DSMC

Afin de mieux comprendre les différences entre les résultats DSMC et les mesures, une simulation CFD a été réalisée à 90 km. A cette altitude, le nombre de Knudsen atteint une valeur de  $3.3 \times 10^{-3}$  qui semble suffisamment proche de la limite du régime continu pour que des résultats DSMC et CFD puissent être comparés.

### 6.1 Comparaison des champs DSMC et CFD à 90km

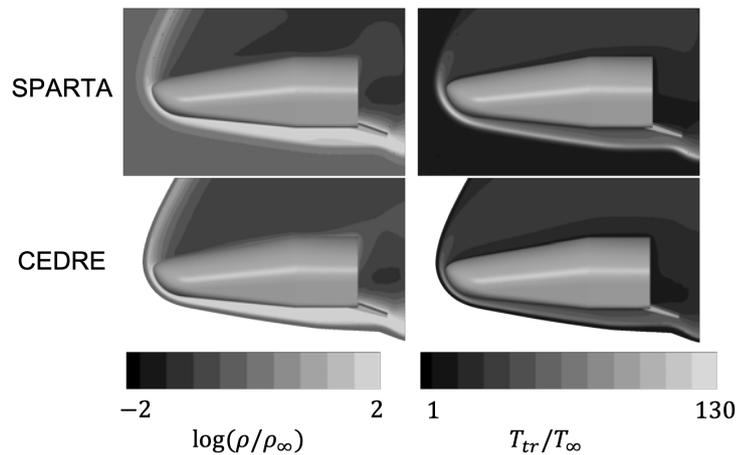


FIGURE 6.34 – Contours normalisés de nombre de Mach (gauche), de la masse volumique (milieu) et de la température (droite) obtenus par DSMC et CFD à 90 km.

La comparaison des contours CFD et DSMC à 90 km est donnée sur la Figure 6.34. A partir de ces résultats, plusieurs points importants sont notés :

- La position du choc obtenue par le calcul CFD est plus proche de la paroi que celle prévue par les calculs DSMC.
- L'épaisseur de choc prévue par le calcul CFD est considérablement plus faible que celle des résultats DSMC.

- Le pic de température dans le choc est plus faible pour la solution CFD que pour la solution DSMC.
- A l'extrados du véhicule, les contours sont assez cohérents malgré le niveau de raréfaction important de cette région de l'écoulement.

En raison de l'hypothèse d'équilibre thermique et de l'unique température  $T$  utilisée par **CEDRE**, la pertinence de comparer cette température à la température de translation  $T_{tr}$  de la DSMC peut être remise en question. En définissant pour la DSMC la température globale  $T_{ov}$  comme suit :

$$T_{ov} = \frac{3T_{tr} + 2T_{rot} + 2T_{vib}}{7}, \quad (6.13)$$

il est alors possible de comparer  $T$  à  $T_{ov}$ . La comparaison de ces deux températures est illustrée sur la Figure 6.35b qui met en évidence une différence relative d'environ 14% entre les valeurs maximales des deux températures. Cette valeur semble assez satisfaisante mais la comparaison des profils met également en évidence une différence relative de position et d'épaisseur de choc de respectivement 30 et 50%.

Concernant la composition chimique de l'écoulement, la Figure 6.35c montre que, même si les fractions massiques des espèces obtenues par CFD et DSMC sont relativement proches à proximité de la paroi, des écarts significatifs sont visibles le long de la ligne de contrôle. Afin de s'assurer que ce résultat n'est pas la conséquence du fait qu'un plus grand nombre de réactions chimiques soit autorisé dans **CEDRE**, la même simulation a été faite en considérant les mêmes réactions chimiques que dans le calcul **SPARTA** (*i.e.* sans les réactions de recombinaison). Exactement les mêmes résultats ont été obtenus, confirmant l'hypothèse qu'aux conditions rencontrées à 90 km, les réactions de recombinaison ne se produisent pas. Les différences dans la composition chimique du gaz sont le résultat des différences du niveau de température dans la couche de choc, de la position et de l'épaisseur du choc (Figures 6.35b et 6.35d). Enfin, Morsa *et al.* [182] ont également observé des différences importantes entre les compositions chimiques obtenues par DSMC et CFD en utilisant le même modèle de cinétique chimique. Cependant, les auteurs ont attribué ces écarts aux méthodologies de gestion des processus chimiques qui sont très différentes d'une approche à l'autre.

Finalement, la Figure 6.35a montre la présence d'un déséquilibre thermique fort au niveau des résultats DSMC puisque les températures des modes internes ( $T_{vib}$ ,  $T_{rot}$ ) restent faibles par rapport à la température de translation à travers le choc. La simulation CFD ayant été réalisée à l'équilibre thermique, il est important d'identifier les zones où cette hypothèse est mise en défaut. Les zones de rupture du régime continu (*continuum breakdown*) sont identifiées sur la Figure 6.36, où le contour CFD du nombre de Knudsen local  $Kn_{GLL-\rho}$  basé sur la masse volumique (cf. chapitres 1 et 2), atteint dans trois régions des valeurs plus grandes que la limite de 0.05 : à travers le choc, près de la paroi et dans la zone d'ombre du véhicule. Cette observation va à l'encontre de l'hypothèse d'équilibre thermique et remet en question la fiabilité de la solution du solveur CFD. En effet, l'incapacité des méthodes CFD à simuler l'écoulement dans les zones de *continuum breakdown* pourrait expliquer les différences importantes au niveau de l'épaisseur et de la position du choc.

Beaucoup d'auteurs ont étudié la consistance des solutions CFD et DSMC en présence de zone de *continuum breakdown*. Plusieurs exemples de travaux de ce type sont donnés dans le Tableau 6.6. La première référence [183] montre qu'avec des conditions aux limites de glissement appropriées et dans le cas d'un écoulement non-réactif mono-espèce autour d'un objet simple (sphère ou cylindre infini), un bon accord peut être obtenu entre les deux solutions pour une grande plage de nombres de Knudsen. Dans la référence [177], les auteurs simulent un écoulement hypersonique autour d'un cylindre 2D. Ils montrent que pour un nombre de Knudsen suffisamment faible et lorsque les paramètres du modèle de collision du code DSMC sont calibrés de manière consistante avec les modèles de transport du code CFD, les solutions s'accordent relativement bien. De la même manière, pour un nombre de Knudsen plus élevé, le travail de Casseau [72] montre que pour un écoulement réactif simple autour d'un cylindre, les deux solutions s'accordent de manière satisfaisante. Toutefois, la

considération d'un écoulement réactif à 5 espèces autour d'une géométrie plus complexe (capsule axi-symétrique) [60] a mis en évidence des écarts beaucoup plus marqués entre les champs calculés par les deux méthodes (au niveau de l'épaisseur de choc notamment) mais avec un bon accord dans la région proche paroi.

Auteurs	Solveur CFD	Solveur DSMC	Écoulement	$M_\infty$	$Kn$	Ref.
Holman & Boyd	LeMANS	MONACO	$N_2$ non réactif	10 à 45	0.002 à 0.25	[183]
Votta <i>et al.</i>	H3NS	DS2V	air à 5 espèces réactif	28	0.002 et 0.01	[60]
Casseau <i>et al.</i>	hy2Foam	dsmcFoam	$N_2$ réactif	20	0.002	[72]
Liechty <i>et al.</i>	LAURA	MAP	air à 2, 5 et 11 espèces chimiquement figé	10-25	0.0005	[177]

TABLEAU 6.6 – Travaux dédiés à la comparaison DSMC-CFD.

En résumé, ces études montrent que la CFD et la DSMC peuvent fournir des solutions similaires pour des nombres de Knudsen suffisamment faibles et pour des écoulements et des géométries suffisamment simples (cylindre infini et sphère). Dans le cas d'un écoulement réactif avec plus d'espèces et pour des géométries plus complexes (capsule axi-symétrique), la solution CFD converge par essence vers une solution faussement continue avec une épaisseur de choc fine située près de la paroi.

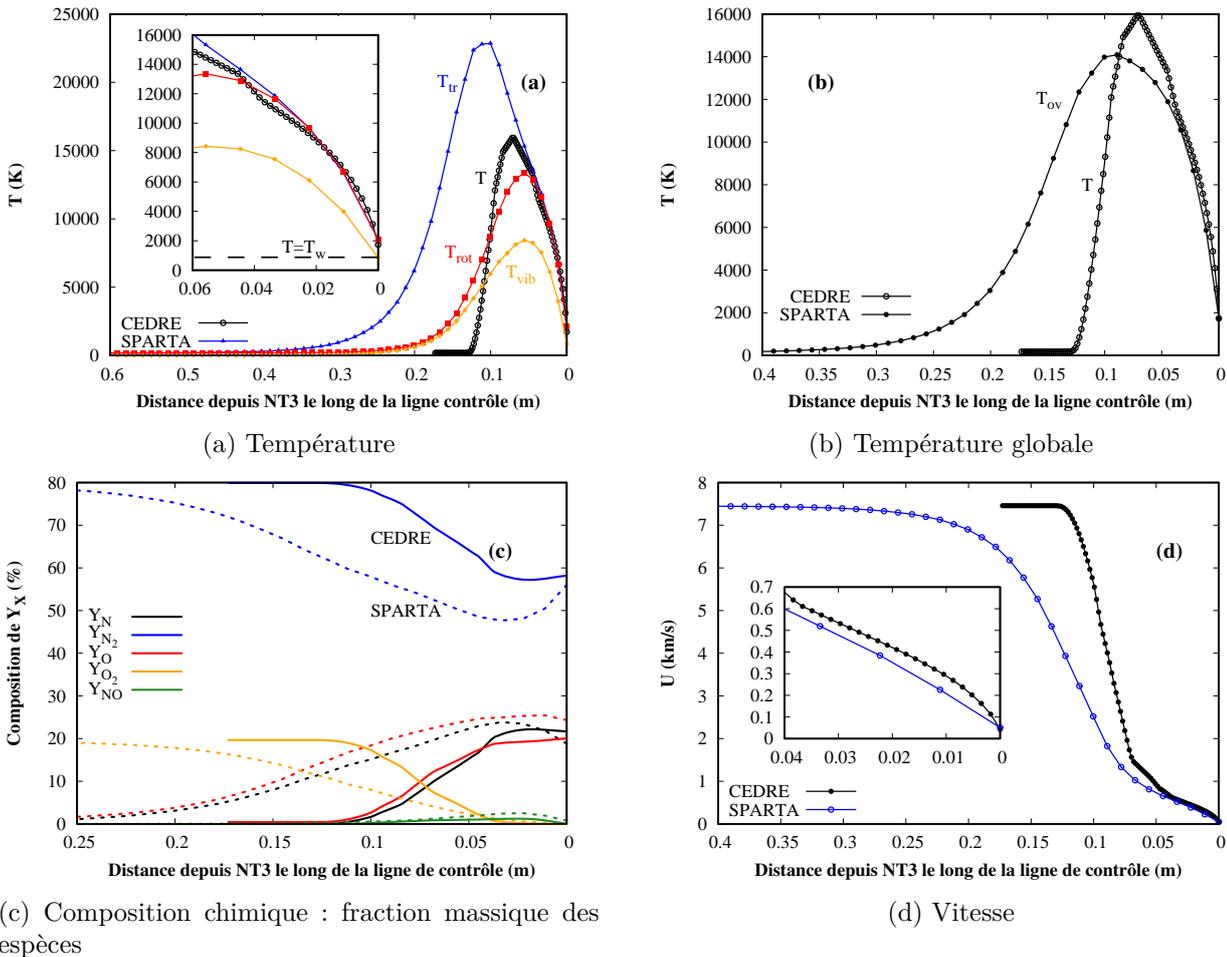


FIGURE 6.35 – Comparaison des profils de température (a)-(b), de composition chimique (c) et de vitesse (d) le long de la ligne de contrôle obtenus par DSMC et CFD à 90 km.

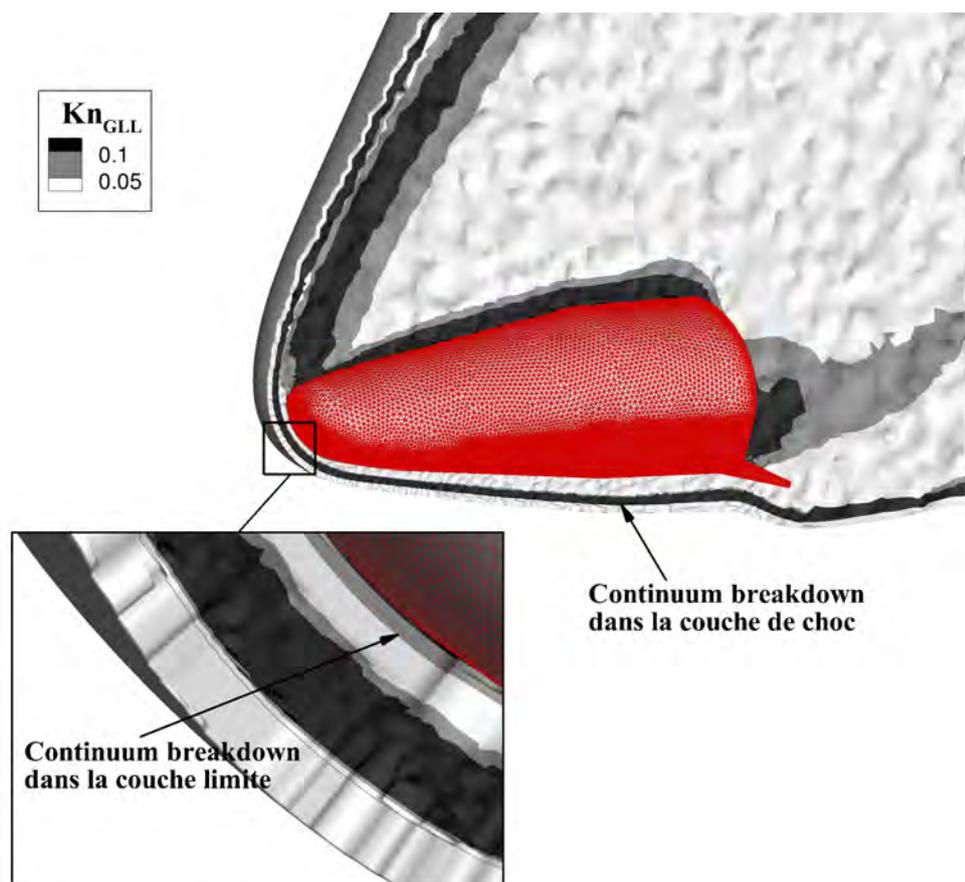


FIGURE 6.36 – Contours de  $Kn_{GLL}$  obtenus pour la simulation CFD. Les zones en gris clair correspondent à  $Kn_{GLL} < 0.05$ , en gris à  $0.05 < Kn_{GLL} < 0.1$  et en noir à  $Kn_{GLL} > 0.1$ .

## 6.2 Analyse des résultats aérodynamiques

Dans cette partie, les grandeurs aérodynamiques obtenues par simulation CFD et DSMC sont comparées. Dans un second temps, l'influence du modèle de collision et du choix de ses paramètres sont évalués sur les résultats DSMC.

Malgré les différences évoquées précédemment, la Figure 6.37 montre un excellent accord entre les distributions du coefficient de pression le long de la ligne centrale. Pour le coefficient de frottement, une différence relative comprise entre 20 et 30% est observée le long de l'intrados mais un très bon accord est constaté au niveau du nez.

Comme la contribution du frottement aux forces aérodynamiques axiale ( $C_A$ ) et normale ( $C_N$ ) est faible par rapport à la pression, un très bon accord est tout de même obtenu. En effet, pour les coefficients de forces normale et axiale, les différences relatives par rapport aux résultats DSMC standards (modèle VHS de Bird) sont d'environ 2% seulement. Pour le coefficient de moment ( $C_{m,cg}$ ), une différence relative d'environ 10% est obtenue (Tableau 6.7). En plus du fait que le coefficient de moment est une quantité plus sensible, cette différence peut aussi s'expliquer par les écarts entre les distributions de pression sur la seconde moitié de l'intrados et au niveau des gouvernes (Figure 6.38). Avec les modèles de collision basés sur les paramètres de Stephani, les coefficients de moment et de force normale ont aussi été extraits. Par rapport aux résultats CFD, le modèle VHS donne un meilleur accord pour le coefficient de force axiale que le modèle VSS. Malheureusement, il n'est pas possible de conclure quant à la justesse des résultats CFD et DSMC car aucune donnée expérimentale n'a été obtenue pour les quantités aérodynamiques.

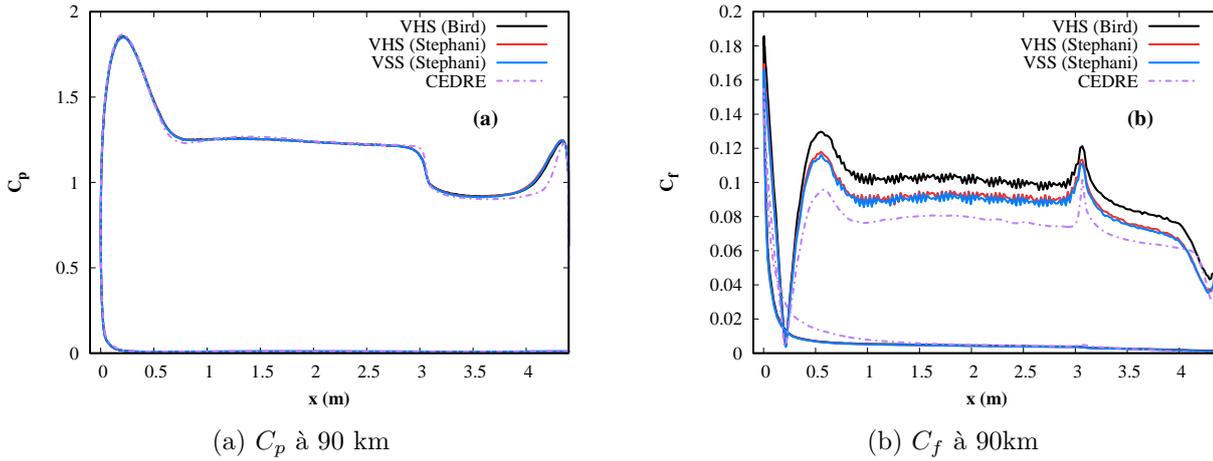


FIGURE 6.37 – Comparaison des distributions des coefficients de pression (a) et de frottement (b) le long de la ligne centrale à l'intrados obtenues par simulations CFD et DSMC à 90 km.

Solver	$C_A$	$C_N$	$C_{m,cg}$
<b>SPARTA</b> VHS (Bird)	-0.296	0.882	-0.05
<b>SPARTA</b> VHS (Stephani)	-0.284	0.877	-0.05
<b>SPARTA</b> VSS (Stephani)	-0.309	0.877	-0.051
<b>CEDRE</b>	-0.290	0.896	-0.055

TABLEAU 6.7 – Coefficients aérodynamiques obtenus par simulations CFD et DSMC à 90 km.

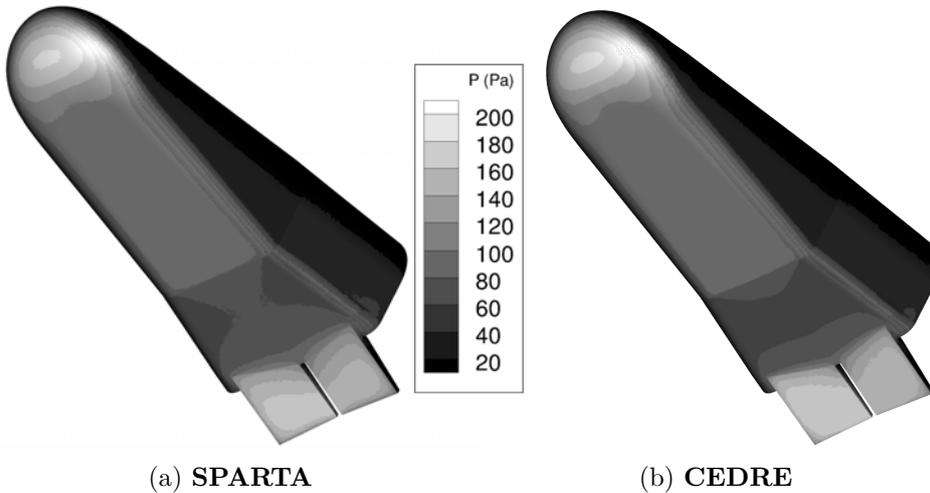


FIGURE 6.38 – Comparaison des contours de pression sur l'intrados obtenus par simulations DSMC (a) et CFD (b) à 90 km.

### 6.3 Analyse des résultats aérothermodynamiques

La Figure 6.39 montre la comparaison entre les données de vol et les résultats numériques obtenus par DSMC et CFD à 90 km. Dans la région du nez (Figure 6.39a), la différence relative entre les données de vol et les résultats CFD est de 10% tandis que la différence relative entre les résultats **CEDRE** et **SPARTA** standards (modèle VHS de Bird) est d'environ 30%. Les résultats DSMC obtenus avec les paramètres de Stephani sont en bien meilleur accord avec les résultats CFD avec lesquels une différence d'environ 14% seulement est relevée au niveau du nez. En s'éloignant de la ligne centrale (Figures 6.39b à 6.39d), l'écart entre les deux méthodes décroît de façon significative et un bon accord est observé sur les côtés du véhicule ( $\theta > 50^\circ$ ).

La confrontation des résultats CFD aux données de vol est étonnamment bonne compte tenu des limitations évoquées dans la section 6.1. L'objet de cette partie est donc de comprendre l'origine des divergences entre les deux méthodes et de savoir si un tel comportement est attendu ou pas.

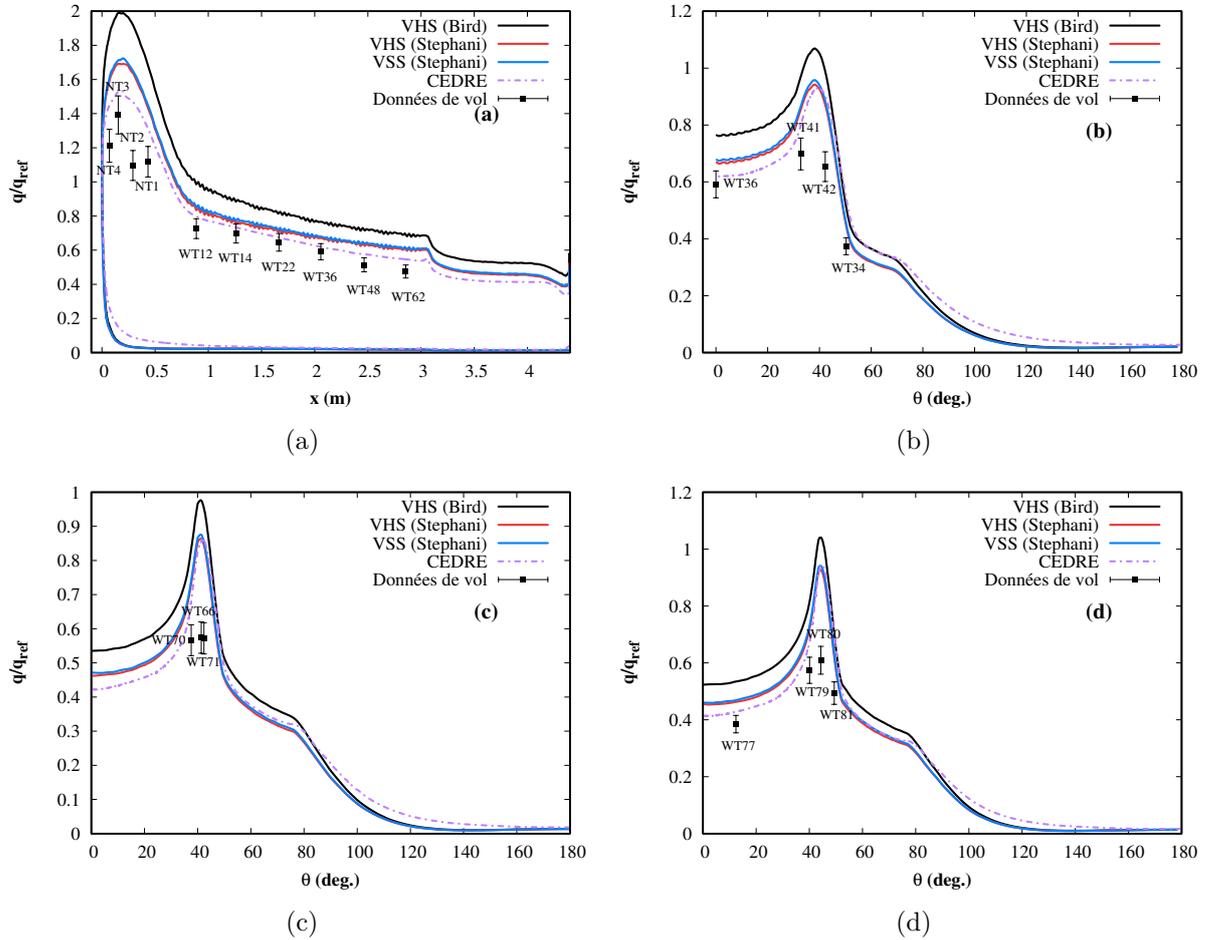


FIGURE 6.39 – Comparaison des distributions du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados (a), en  $x = 2.06$  m (b),  $x = 3.52$  m (c) et  $x = 3.99$  m (d) obtenues par simulations CFD et DSMC à 90 km.

En termes de différences de modèles entre les deux solveurs, le défaut majeur de **CEDRE** est qu'il suppose l'équilibre thermique. Il est assez difficile d'évaluer a priori comment l'ajout de cette fonctionnalité affecterait les résultats CFD mais compte tenu du principe de conservation de l'énergie, l'addition du mode de vibration devrait avoir une influence assez faible sur le flux de chaleur. Cette hypothèse a été confirmée en réalisant une simulation DSMC sans considérer le mode de vibration. À 90 km, cette simulation a mis en évidence une diminution de l'ordre de 3% du flux de chaleur par rapport au flux obtenu dans les conditions standards. Ainsi, l'hypothèse d'équilibre thermique du code CFD n'explique pas les différences entre les deux flux de chaleur mais la modélisation du mode de vibration pourrait tout de même améliorer légèrement l'accord entre les deux méthodes.

Par ailleurs, les solveurs CFD calculent le flux de chaleur convecto-diffusif à partir de la loi de Fourier pour la partie conductive et la loi de Fick pour la partie diffusive. Mathématiquement, le flux convecto-diffusif  $q$  s'écrit :

$$q_{\text{conv-diff}} = \underbrace{(\kappa_{\text{mix}} \partial_x T)_w}_{\text{partie conductive}} + \underbrace{\left( \sum_i \rho D_i h_i \partial_x C_i \right)_w}_{\text{partie diffusive}}, \quad (6.14)$$

où  $\kappa_{\text{mix}}$  désigne la conductivité de mélange,  $\partial_x T$  est le gradient de température,  $D_i$  correspond à la  $i^{\text{ème}}$  composante du coefficient de diffusion moléculaire du mélange,  $h_i$  est l'enthalpie de l'espèce  $i$  et  $\partial_x C_i$  est le gradient de fraction massique de l'espèce  $i$ .

Pour une paroi non-catalytique, la partie diffusive s'annule et le flux convecto-diffusif est entièrement déterminé par sa partie conductive. L'équation (6.14) suggère donc que pour un gradient thermique donné, le flux conductif dépend de la conductivité de mélange qui dépend généralement des conductivités et viscosités d'espèce ainsi que de la viscosité de mélange. Toutes ces propriétés sont alors calculées à partir de différentes approximations.

Dans l'étude de Holman et Boyd [183], les auteurs ont modifié le solveur CFD selon les équations suivantes :

$$\mu = \mu_{\text{ref}} \left( \frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^\omega, \quad (6.15)$$

$$\mu_{\text{ref}} = \frac{15\sqrt{\pi m k T_{\text{ref}}}}{2\pi d_{\text{ref}}^2 (5 - 2\omega)(7 - 2\omega)}, \quad (6.16)$$

où  $\omega$ ,  $T_{\text{ref}}$  et  $d_{\text{ref}}$  sont les paramètres du modèle VHS utilisés pour les calculs DSMC. Cette modification force le solveur CFD à utiliser une viscosité équivalente à celle des calculs DSMC ce qui explique probablement l'excellent accord obtenu entre **LeMans** et **MONACO** en termes de flux de chaleur pour des nombres de Knudsen allant de 0.002 à 0.05.

Dans l'article de Liechty *et al.* [177], la viscosité et la conductivité de mélange sont comparées dans le cadre de la théorie de Chapman-Enskog. Ainsi, pour leurs calculs, les modèles de transport des calculs CFD sont basés sur des données *ab initio* tandis que deux calculs DSMC basés respectivement sur le modèle VHS et VSS sont réalisés. La comparaison des résultats met en évidence un flux de chaleur plus important de 5% pour le modèle VSS et de 10% pour le modèle VHS, par rapport au flux de chaleur obtenu par CFD pour le cas à Mach 25.

Pour les calculs de Casseau *et al.* [72], les viscosités et conductivités d'espèces sont respectivement calculées avec les approximations de Blottner et d'Eucken tandis que les propriétés de mélange sont obtenues avec le modèle d'Armaly-Sutton. Avec ces modèles, les différents calculs CFD produisent des flux de chaleur entre 20 et 30% plus faibles que le flux de chaleur obtenu par DSMC.

Finalement, dans l'article de Votta *et al.* [60], la méthode CFD utilise les intégrales de collision de Yun et Mason pour le calcul des viscosités d'espèce et la formule d'Eucken pour les conductivités d'espèces tandis que les grandeurs de mélange sont obtenues avec la formule de Wilke. Pour leurs calculs à 85 km en considérant la paroi non catalytique, le flux de chaleur calculé par leur solveur CFD est 60% plus faible que celui obtenu par DSMC. Sous l'hypothèse d'une paroi totalement catalytique, la différence relative entre les deux méthodes est de 10% seulement. Cependant, dans deux cas, les auteurs constatent que la différence absolue de flux de chaleur est la même (entre 30 et 40 kW/m<sup>2</sup>) ce qui confirme que l'écart entre les deux méthodes provient de la partie conductive du flux de chaleur.

En CFD, il existe une grande variété de modèles pour calculer les propriétés de transport d'espèces et de mélange. Ces modèles supposent différents types de relations entre les grandeurs de mélange et d'espèces qui jouent un rôle déterminant dans le calcul de la conductivité de mélange et donc dans le calcul du flux de chaleur. Reddy et Sinha [184] se sont intéressés à l'influence du modèle de viscosité d'espèce sur le flux de chaleur appliqué au véhicule Fire II à 35 km. Leurs résultats ont mis en évidence une légère augmentation de la distance corps-choc et une augmentation de 10% du flux de chaleur lorsqu'un modèle basé sur les intégrales de collision est utilisé à la place du modèle de Blottner. De la même manière, Palmer et Wright [185] ont étudié plusieurs modèles de viscosité de mélange à une pression fixe de 100 kPa et pour une température croissante. Pour certaines températures, leurs résultats ont mis en évidence de larges variations entre les viscosités. En utilisant la formule de Eucken par exemple, la conductivité de mélange est directement proportionnelle à la viscosité de mélange. Dans ce cas, une fluctuation significative de la viscosité de mélange implique la même fluctuation au niveau de la conductivité et donc au niveau du flux de chaleur. Par ailleurs, Boyd et Schwartzentruber [1] expliquent dans leur ouvrage qu'à la limite proche équilibre, la formule

d'Eucken gagne en précision. Dans les conditions de *continuum breakdown* qui correspondent au point de vol à 90 km, l'applicabilité des différents modèles mentionnés est donc discutable.

En conclusion, parmi les différentes méthodes d'approximation des propriétés de transport, leur applicabilité à des simulations en régime raréfié constitue une interrogation de taille pour assurer la consistance des flux de chaleur numériques obtenus par CFD et DSMC. De plus, un examen rapide des ressources bibliographiques sur la question montre la sensibilité des propriétés de transport et du flux de chaleur aux approximations choisies. Ce constat mène à penser que pour un point de vol donné, un solveur CFD pourrait fournir une gamme de flux de chaleur relativement large selon les modèles de calcul des propriétés de transport utilisés.

## 7 Influence du modèle d'atmosphère sur les grandeurs aérodynamiques

L'influence de la masse volumique sur le calcul du flux de chaleur a largement été mise en évidence dans les sections précédentes. Suite à la récente mise à disposition d'une nouvelle version du modèle **MSIS**, on se propose ici d'évaluer l'impact des modifications des conditions atmosphériques sur les résultats CFD et DSMC. Ceci permettra également d'évaluer l'importance d'approfondir notre connaissance des conditions atmosphériques à haute altitude.

### 7.1 Le modèle MSIS 2.0

Le modèle **MSIS 2.0** est disponible en ligne<sup>5</sup> depuis juin 2020 et est présenté en détails dans l'article [186]. D'après cette référence, cette nouvelle version a été développée à partir d'une grande quantité de nouvelles données collectées entre 1986 et 2005 pour les plus anciennes et entre 2007 et 2018 pour les plus récentes. Cette reformulation majeure se traduit principalement par des modifications propres aux altitudes comprises entre le sol et 100 km. Relativement à son prédécesseur, les changements principaux de cette nouvelle version sont les suivants :

- Le nouveau modèle est plus chaud dans la troposphère (jusqu'à 8-15 km), plus froid dans la stratosphère (entre 10-12 et 50 km) et dans la mésosphère (de 50 à 90 km).
- Les masses volumiques d'oxygène monoatomique et d'azote sont plus faibles dans la thermosphère (entre 90 et 400-600 km).
- La masse volumique d'oxygène monoatomique descend désormais jusqu'à 50 km.
- Une amélioration supplémentaire du modèle nécessite de nouvelles mesures entre 100 et 200 km.

En d'autres termes, le nouveau modèle permet d'estimer la masse volumique de façon plus précise pour des altitudes inférieures à 100 km comme indiqué dans le Tableau 6.8. En effet, en comparant ces nouvelles conditions atmosphériques avec celles du modèle **MSISE-00**, on constate une importante diminution de la masse volumique estimée à certaines altitudes. Comme attendu, la diminution est de seulement 3, 1 et 6% à 115, 110 et 105 km. Cependant, les diminutions valent respectivement 22, 36 et 36% à 100, 95 et 90 km. En conséquence, l'effet de tels changements sur la masse volumique a été évalué sur la reconstruction du flux de chaleur pour les points de vol situés à 100, 95 et 90 km.

### 7.2 Simulation du flux de chaleur avec le modèle MSIS 2.0

Hormis la masse volumique, les sections 5 et 6 ont montré que le coefficient d'accommodation et le paramétrage du modèle de collision sont les facteurs les plus importants pour la reconstruction du flux de chaleur. L'analyse de la rentrée de la capsule OREX (chapitre 5) a toutefois montré que pour un coefficient d'accommodation de 0.8, son effet sur le flux de chaleur est négligeable en-dessous de 105 km. Cette valeur étant la plus probable pour l'IXV et comme les deux véhicules ont un rayon de nez du même ordre de grandeur, la même conclusion a été anticipée et les effets

5. A l'adresse <https://map.nrl.navy.mil/map/pub/nrl/NRLMSIS/NRLMSIS2.0/>.

Alt. (km)	$n_\infty$ ( $\cdot/m^3$ )	$\rho_\infty$ (kg/m <sup>3</sup> )	$T_\infty$ (K)	$X_{O_2}$	$X_{N_2}$	$X_O$	$\Delta E$ (%)
115	$6.59 \times 10^{17}$	$3.00 \times 10^{-8}$	303	0.1288	0.764	0.1071	-3
110	$1.54 \times 10^{18}$	$7.13 \times 10^{-8}$	234	0.1496	0.7723	0.0781	-1
105	$3.98 \times 10^{18}$	$1.87 \times 10^{-7}$	193	0.171	0.7731	0.056	-6
100	$1.02 \times 10^{19}$	$4.85 \times 10^{-7}$	180	0.1887	0.7677	0.044	-22
95	$2.48 \times 10^{19}$	$1.19 \times 10^{-6}$	181	0.2025	0.7753	0.0222	-36
90	$5.95 \times 10^{19}$	$2.88 \times 10^{-6}$	182	0.2095	0.7856	0.0049	-36

La dernière colonne indique la différence relative entre la masse volumique obtenue avec les deux modèles. Le signe négatif indique une diminution de la masse volumique prédite par le modèle **MSIS 2.0**.

TABLEAU 6.8 – Conditions atmosphériques calculées avec le modèle **MSIS 2.0**.

d'accommodation n'ont pas été étudiés ici. En revanche, le modèle VHS de Stephani a été utilisé pour l'ensemble des calculs considérés dans cette partie. Pour ce qui est des simulations CFD, seul l'effet de masse volumique a été analysé.

### 7.2.1 Résultats DSMC

Les Figures 6.40 à 6.43 illustrent les résultats résumés dans le Tableau 6.9 qui compile les différences relatives entre le flux de chaleur mesuré par plusieurs thermocouples et le flux de chaleur simulé par DSMC en considérant différents jeux de paramètres numériques. A 100 et 95 km, bien que les modifications de la masse volumique induisent une diminution significative du flux de chaleur numérique, les résultats surestiment tout de même grandement les données de vol pour tous les thermocouples et pour toutes les configurations numériques. A 90 km par contre, un très bon accord est obtenu entre le flux de chaleur calculé avec les paramètres du modèle de Stephani et pour les conditions atmosphériques fournies par le modèle **MSIS 2.0**.

En particulier, les résultats montrent qu'à 100 km, l'utilisation des paramètres de Stephani à la place de ceux de Bird se traduit par une diminution d'environ 6% pour le flux de chaleur dans la région du nez (TC **NT3**) et de 10% plus loin le long de la ligne centrale (TC **WT48**). Avec les paramètres de Stephani, les nouvelles conditions atmosphériques conduisent à une diminution de 14 et 10% respectivement dans la région du nez et plus loin le long de la ligne centrale. A 95 km, la modification du modèle VHS se traduit par une réduction de 11 et 6% dans la région du nez et plus loin le long de la ligne centrale tandis que l'utilisation de la nouvelle version du modèle **MSIS** entraîne une diminution du flux de chaleur de respectivement 15 et 14% pour ces mêmes régions. A 90 km, la mise à jour du modèle VHS produit une diminution de 18 et 14 % tandis que le changement de modèle d'atmosphère est responsable d'une diminution de 9 et 13%.

Globalement, on remarque que l'utilisation des paramètres de Stephani pour le modèle VHS a un impact important pour les trois altitudes considérées et, comme attendu, plus l'altitude est basse, plus l'influence est importante du fait de l'intensification des collisions inter-moléculaires. En parallèle, la mise à jour du modèle d'atmosphère améliore considérablement les résultats mais le changement pour le flux de chaleur est plus faible que celui suggéré par les relations de proportionnalité entre le flux de chaleur et la masse volumique en conditions proches continu ( $q_{stag} \propto \sqrt{\rho_\infty}$ ). Cela peut s'expliquer par le fait que la diminution de la masse volumique réduit par la même occasion l'effet du modèle de collision.

### 7.2.2 Résultats CFD et cohérence CFD/DSMC

Dans un premier temps, si l'on considère uniquement les simulations CFD, on peut constater l'influence du modèle **MSIS 2.0** sur les résultats obtenus (Figures 6.40d, 6.41d, 6.42d et 6.43d). Un comportement surprenant est observé pour le flux de chaleur qui diminue de 5% seulement dans la région du nez et de 10% plus loin le long de la ligne centrale (Figure 6.40d). Encore une fois, la relation entre la masse volumique et le flux de chaleur suggère une diminution plus

Altitude (km)	Paramètres numériques	$(q_{\text{num}} - q_{\text{exp}})/q_{\text{exp}}$ (%)		
		<b>NT3</b>	<b>WT14</b>	<b>WT62</b>
100	VHS (Bird) + <b>MSISE-00</b>	96	70	130
	VHS (Stephani) + <b>MSISE-00</b>	85	55	111
	VHS (Stephani) + <b>MSIS 2.0</b>	62	41	93
95	VHS (Bird) + <b>MSISE-00</b>	96	82	107
	VHS (Stephani) + <b>MSISE-00</b>	76	82	83
	VHS (Stephani) + <b>MSIS 2.0</b>	53	42	63
90	VHS (Bird) + <b>MSISE-00</b>	43	27	47
	VHS (Stephani) + <b>MSISE-00</b>	21	9	28
	VHS (Stephani) + <b>MSIS 2.0</b>	11	2	8

TABLEAU 6.9 – Résumé des différences relatives entre les calculs DSMC et les mesures du flux de chaleur pour plusieurs thermocouples situés le long de la ligne centrale.

importante (de l'ordre de 15%) dans la région d'arrêt. Ce résultat peut s'expliquer par le fait que la diminution de la masse volumique conduit à une augmentation du niveau de déséquilibre. En effet, une diminution de 36% de la masse volumique est à l'origine d'une augmentation importante du niveau de déséquilibre à travers la couche de choc et à travers la couche limite compromettant ainsi la précision du flux de chaleur calculé. Cette explication est soutenue par la considération du paramètre de *non-equilibrium breakdown*  $Kn_{GLL-\rho}$  basé sur la masse volumique (cf. chapitre 1). La Figure 6.44 illustre la comparaison entre les profils de  $Kn_{GLL-\rho}$  obtenus avec les deux calculs CFD le long de la ligne de contrôle représentée sur la Figure 6.45. Ce résultat montre une augmentation de près de 33% du Knudsen local à proximité du thermocouple **NT3** confirmant ainsi l'importante augmentation du niveau de déséquilibre jusque dans la couche limite.

Étonnamment, l'accord entre les résultats CFD et DSMC (Figure 6.40c) se trouve amélioré avec une différence relative comprise entre 5% (TC **NT3**) et 6% (TC **WT48**) contre respectivement 11 et 10% avec le modèle **MSISE-00**. L'utilisation de conditions aux limites de saut de température et de vitesse de glissement pourrait être requise dans ces conditions et la littérature [36, 183, 60] suggère qu'un flux de chaleur plus faible serait obtenu, augmentant par conséquent la différence relative entre les deux solutions (CFD et DSMC).

Par rapport aux données de vol, les résultats CFD sont en très bon accord avec le flux de chaleur expérimental. En effet, pour la plupart des thermocouples, les résultats CFD obtenus avec la nouvelle version du modèle **MSIS** se situe dans l'incertitude de 8% des données de vol (différence relative  $< 6\%$  en **NT3** et  $< 2\%$  en **WT48**). On peut encore souligner le fait que ces calculs ont été faits sous hypothèse de paroi non catalytique tandis qu'en conditions réelles, un faible niveau de catalycité est attendu. Le bon accord entre les résultats CFD et les données de vol n'est donc pas totalement satisfaisant puisqu'une légère sous-estimation des données de vol aurait été plus cohérente.

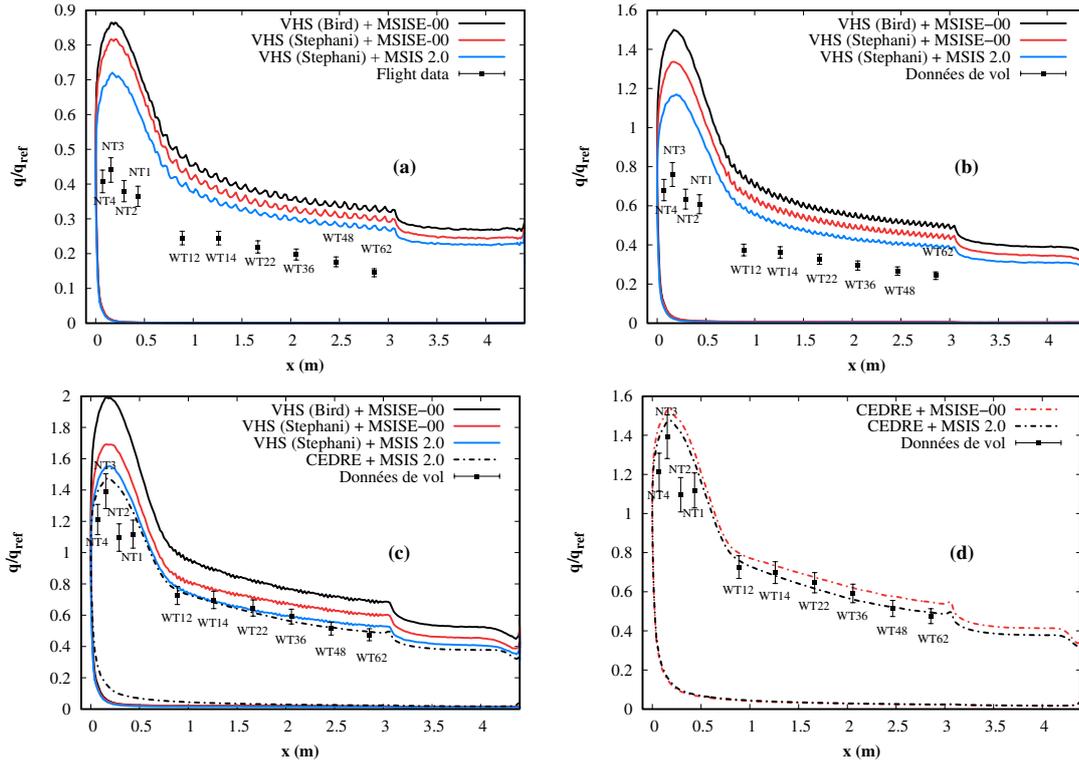


FIGURE 6.40 – Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne centrale à l'intrados à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km.

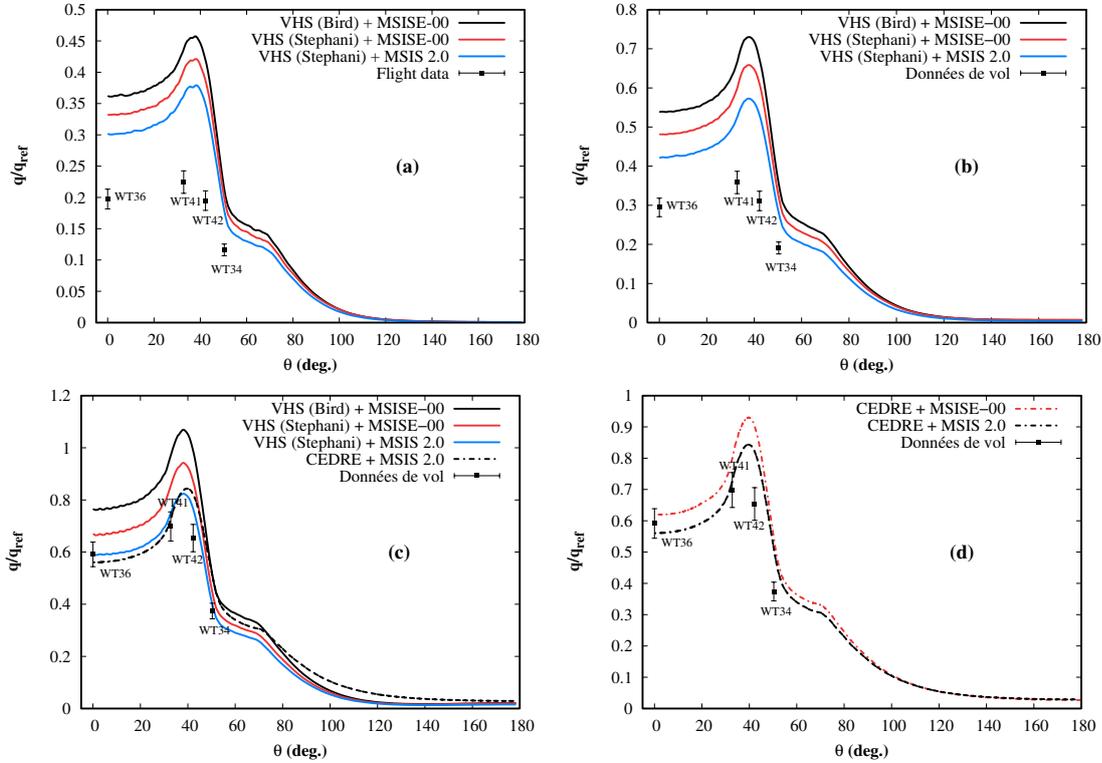


FIGURE 6.41 – Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne  $x = 2.06$  m à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km.

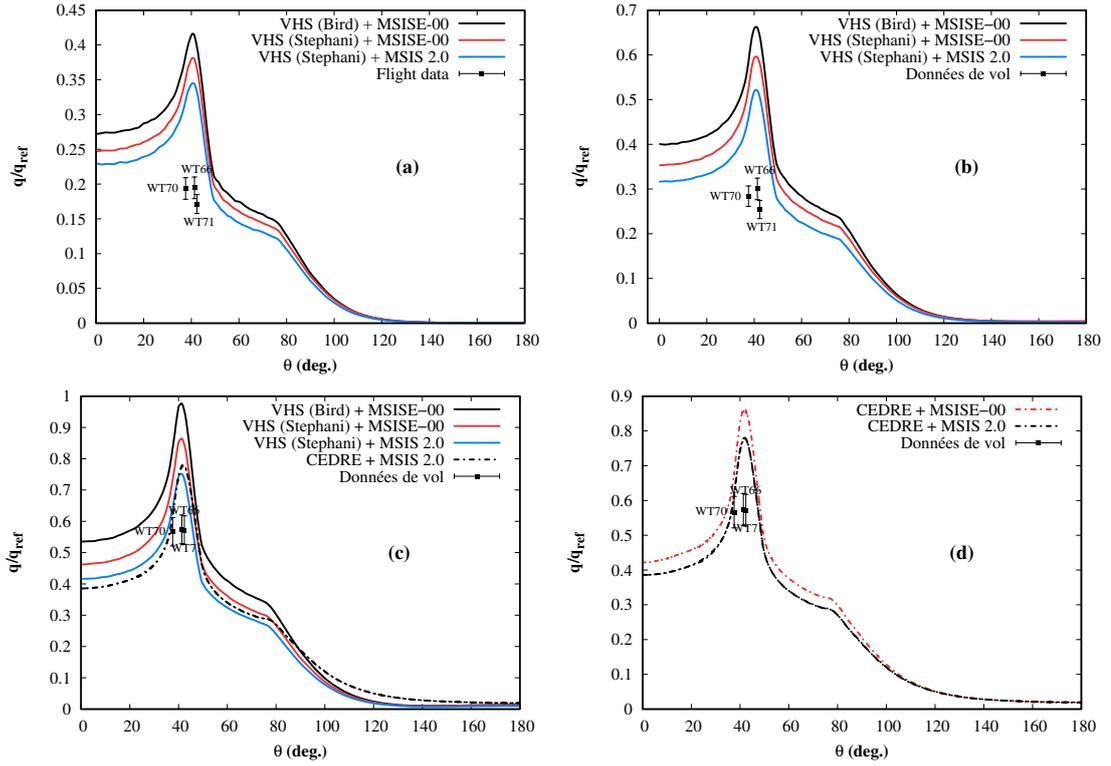


FIGURE 6.42 – Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne  $x = 3.52$  m à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km.

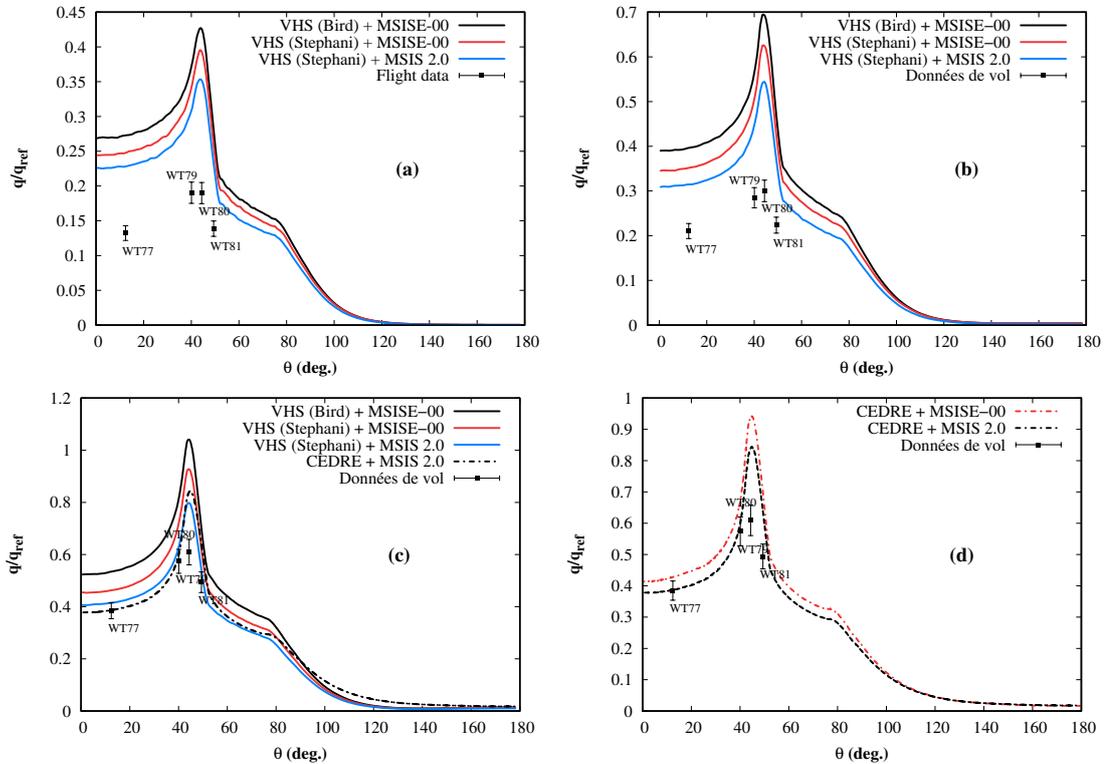


FIGURE 6.43 – Comparaison des données de vol et des distributions numériques du flux de chaleur le long de la ligne  $x = 3.99$  m à 100 (a), 95 (b) et 90 (c-d) km.

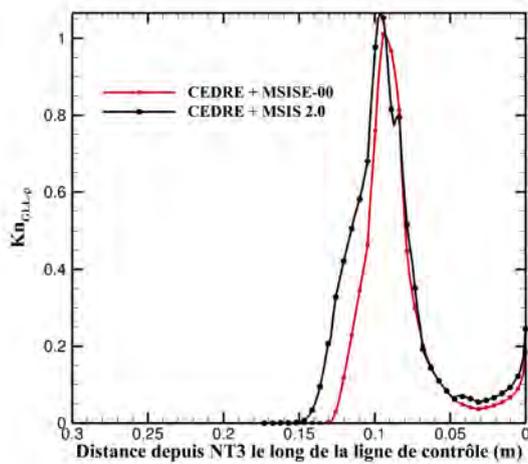


FIGURE 6.44 – Profils de  $Kn_{GLL-\rho}$  le long de la ligne de contrôle pour les deux résultats CFD.

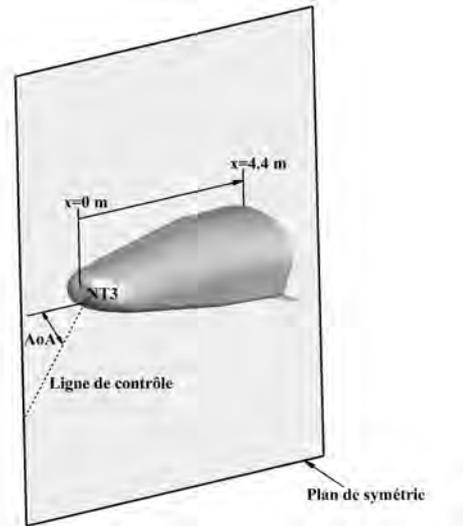


FIGURE 6.45 – Ligne de contrôle pour l'observation du critère de déséquilibre.

## 8 Résumé

Pour la première fois, une reconstruction *post-flight* de la portion raréfiée de la rentrée de l'IXV a été entreprise avec le code DSMC **SPARTA** entre 115 et 90 km. A 90 km, des calculs CFD ont également été réalisés avec le code **CEDRE** afin de comparer les deux méthodes dans la limite proche équilibre. Les mesures de l'IXV constituent un moyen unique de validation numérique en considérant les données obtenues par 20 thermocouples sur le véhicule.

La première partie de ce chapitre, a donné un aperçu de la mission IXV comprenant la présentation du véhicule, de sa trajectoire, de son instrumentation et de la méthode inverse utilisée pour en extraire l'historique du flux de chaleur à la paroi. Ensuite, les résultats obtenus avec deux approches numériques ont été analysés et comparés aux flux de chaleur reconstruits. Dans ce cadre, l'impact de plusieurs paramètres numériques a été évalué. Parmi eux, le coefficient d'accommodation, le paramétrage des modèles de collision et différents modèles de relaxation et de cinétique chimique ont été considérés. Pour finir, les effets de l'incertitude de la masse volumique infinie amont sur les grandeurs pariétales ont été quantifiés et l'effet de la mise à jour récente du modèle d'atmosphère utilisé a été observée.

L'étude du champ volumique autour de l'IXV a mis en évidence plusieurs aspects importants comme les effets de raréfaction et d'accommodation sur la structure du choc à haute altitude. Lorsque l'altitude décroît, une diminution de l'influence du coefficient d'accommodation a été constatée. A 90 km, des différences significatives dans le champ ont été observées avec les approches CFD et DSMC (épaisseur et position du choc) mais des résultats cohérents ont été obtenus en proche paroi. Les différences principales entre les deux méthodes sont probablement dues à l'important niveau de *continuum breakdown* toujours présent à 90 km ainsi qu'aux différences de conductivité et de diffusivité thermique.

Concernant les données de vol, certains thermocouples présentent des anomalies qui remettent en question leur fiabilité. En effet, sur l'intrados, certains thermocouples (**WT62** et **WT48**) semblent s'activer progressivement, ce qui vient probablement du fait qu'à ces altitudes la température pariétale est trop proche de la limite des températures mesurables par les thermocouples. Pour d'autres capteurs (**NT2** et **WT12**), les flux reconstruits sont absurdes quelle que soit l'altitude considérée, ce qui indique un possible dysfonctionnement. De manière générale, la capacité des capteurs à mesurer correctement les températures en régime raréfié n'est pas garantie.

D'un point de vue numérique, les résultats DSMC montrent la capacité de la méthode à retrouver une partie des mesures au-dessus de 105 km en utilisant une condition de paroi partiellement diffuse

mais avec des coefficients d'accommodation qui varient en fonction de l'altitude et de la zone du véhicule considérées. Ce qui est difficilement explicable. De plus, l'influence de ce paramètre décroît lorsque l'altitude diminue et ne peut expliquer la surestimation globale des données de vol par la DSMC. A 115, 100 et 95 km, les différences relatives dans la région du nez sont de 90 et 110% et entre 40 et 50% à 110, 105 et 90 km. Pour les altitudes les plus élevées, l'analyse de sensibilité a montré qu'une partie de ces différences peut s'expliquer par une incertitude significative sur la masse volumique infinie amont tandis que l'utilisation de paramètres adéquats pour le modèle de collision a permis d'améliorer les résultats à 100, 95 et 90 km. Ainsi, la combinaison des paramètres de Stephani pour le modèle VHS avec le modèle d'atmosphère **MSIS 2.0** permet de réduire l'écart relatif dans la région du nez à une valeur de 11% à 90 km. En revanche, les modèles de relaxation et de cinétique chimique se sont avérés faiblement influents.

A 90 km, un très bon accord est observé entre la CFD et la DSMC pour les coefficients de force et de moment aérodynamiques mais malheureusement, aucune donnée de vol n'est disponible pour ces grandeurs. Concernant le flux de chaleur, des écarts relatifs respectivement de l'ordre de 30% (VHS avec les paramètres de Bird) et de 15% (VHS/VSS avec les paramètres de Stephani) sont observés entre les deux méthodes. Cette différence relative chute même à 5% avec le modèle **MSIS 2.0**. Un bon accord est également constaté entre **CEDRE** et les mesures. Néanmoins, comme en réalité, la paroi du véhicule est à minima faiblement catalytique, le flux de chaleur calculé sous l'hypothèse de paroi non-catalytique constitue la limite théorique basse. Le calcul devrait donc être inférieur aux mesures tandis qu'ici, même la solution CFD produisant le flux de chaleur le plus faible surestime les mesures. De plus, l'analyse des modèles pour le calcul des propriétés de transport suggère que la méthode CFD pourrait fournir des résultats en meilleur accord avec les résultats DSMC pour un choix spécifique des modèles de transport. Dans le cas présent, un meilleur accord entre les résultats des deux méthodes écarterait nécessairement la solution CFD des données de vol. En l'état actuel, la méthode DSMC semble donner une solution plus conservative.

Pour finir, l'analyse de la rentrée de l'IXV est un cas d'étude complexe qui ouvre un certain nombre de perspectives. Premièrement, l'instrumentation semble inappropriée pour des conditions de hautes altitudes. Ces résultats soulignent une fois encore la nécessité de concevoir des expériences en vol dédiées au régime raréfié avec des capteurs spécialement prévus pour ces conditions. Ensuite, l'analyse de sensibilité à la masse volumique et le fait de mettre à jour le modèle d'atmosphère avec de nouvelles données ont montré la nécessité de bien connaître les conditions atmosphériques pour pouvoir éliminer ces paramètres comme source possible d'incertitude et se concentrer uniquement sur les incertitudes associées aux modèles numériques. Enfin, des efforts supplémentaires doivent être réalisés pour assurer la consistance entre les solutions obtenues par CFD et DSMC dans la limite proche continu.



---

## Troisième partie

# Développement de modèles réduits pour le régime hypersonique raréfié



# Chapitre

# 7

## Etat de l'art des modèles analytiques pour le calcul des grandeurs pariétales durant la rentrée

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Typologie des codes de rentrée</b>	<b>185</b>
<b>2</b>	<b>Modèles simplifiés pour le calcul des grandeurs pariétales : méthodes par panneaux</b>	<b>186</b>
2.1	Méthodes par panneaux : grandeurs et conventions	186
2.2	Formulations pour le régime transitionnel	187
2.3	Formulations pour le régime moléculaire libre	191
2.4	Modèles en régime continu	194
2.5	Limites des méthodes par panneaux en régime transitionnel	197
<b>3</b>	<b>Méthodes avancées pour le calcul des grandeurs pariétales</b>	<b>200</b>
3.1	Méthodes géométriques	200
3.2	Méthodes de Falchi	201
3.3	Méthodes basées sur l'apprentissage statistique	202
<b>4</b>	<b>Résumé</b>	<b>207</b>

---

**Introduction :** L'objectif de ce chapitre est d'expliquer en quoi consiste un code de rentrée et quels en sont les éléments constitutifs. Après une présentation succincte des deux types de codes de rentrée existants, les méthodes pour les régimes transitionnel, moléculaire libre et continu sont passées en revue. Ainsi, pour le régime transitionnel, plusieurs fonctions de raccord locales et globales sont présentées. Les défauts de ces fonctions sont également discutés en détails. Pour le régime moléculaire libre, les formules analytiques les plus connues sont rappelées avec une courte description du raisonnement permettant leur obtention. Pour le régime continu, plusieurs méthodes pour le calcul du flux de chaleur et de la pression au point d'arrêt sont explicitées. Quelques formulations pour les distributions sont aussi introduites. Les limites des méthodes par panneaux pour le calcul du flux de chaleur sont ensuite illustrées avec la rentrée de la capsule Apollo 6. Dans une dernière partie, différentes méthodes avancées pour le calcul de grandeurs aérodynamiques et aérothermodynamiques sont finalement décrites.

## 1 Typologie des codes de rentrée

Qu'il s'agisse d'estimer les risques au sol lors de la rentrée d'un satellite ou que l'on souhaite étudier l'optimisation de géométrie et de trajectoire d'un véhicule, les codes de rentrée constituent des outils précieux pour les acteurs du secteur spatial. Selon les hypothèses et les applications, ces moyens de calcul à faible temps de réponse se divisent en deux familles [187] :

- (i) **Les codes orientés objet** sont utilisés pour simuler la rentrée atmosphérique d'un débris. Leur spécificité est de considérer qu'à partir d'une certaine altitude, le débris (satellite, lanceur ou autre) se fragmente massivement et l'analyse se réduit à la simulation de la rentrée des éléments principaux de formes simples (sphère, cylindre, cube, etc.) préalablement renseignés par l'utilisateur.

- (ii) **Les codes orientés véhicule** ont pour objectif de simuler l'objet complet, de la façon la plus réaliste possible. A ce titre, la trajectoire, la dégradation des matériaux et la fragmentation sont modélisées conjointement.

D'un point de vue structurel, une différence de taille entre ces deux approches se situe au niveau de l'estimation des grandeurs aérodynamiques et aérothermodynamiques. En effet, les codes orientés objet associent directement à chaque élément de géométrie les coefficients aérodynamiques et le flux de chaleur intégrés sur la surface et sur toutes les attitudes de l'objet supposé en *random tumbling*. Un code orienté véhicule est, quant à lui, capable d'estimer les distributions pariétales de pression, de frottement et de flux de chaleur à chaque instant pour en déduire les coefficients nécessaires au calcul de la trajectoire à 6 degrés de liberté et le cas échéant, de la dégradation thermique et mécanique du matériau.

Des exemples de codes et leur description détaillée sont disponibles dans les manuscrits de thèse de Vincent Drouet [48], d'Ysolde Prévereaud [188] et d'Alessandro Falchi [189]. Ici, on s'intéressera plus particulièrement à la catégorie des codes orientés véhicule avec pour objectif de proposer une alternative aux modèles de distribution utilisés dans la chaîne de calcul **ARES** de l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales (ONERA) présenté dans [28] et dont voici les codes constitutifs :

- **ATMOS** regroupe plusieurs modèles d'atmosphère terrestre et martienne.
- **FAST** est le code contenant les modèles aérodynamiques et aérothermodynamiques.
- **MODETHEC** permet de modéliser les transferts de chaleur au sein des matériaux ainsi que leur dégradation.
- **MUSIC** est le code de mécanique du vol capable de modéliser des phases de vol orbital ainsi que de rentrée atmosphérique.

Les modèles développés dans le cadre de ce travail serviront donc à alimenter **FAST**. Lorsque nécessaire, certains aspects d'autres codes de rentrée seront présentés au fil de la discussion afin d'illustrer des particularités d'implémentations et de servir d'éléments de comparaison.

## 2 Modèles simplifiés pour le calcul des grandeurs pariétales : méthodes par panneaux

Les codes de rentrée sont généralement basés sur des *méthodes par panneaux* (en anglais *panel methods*) qui considèrent n'importe quel objet comme une géométrie idéalisée faite d'un certain nombre de panneaux discrets assimilables à des éléments plans dont une face est exposée à l'écoulement [190]. Ainsi, en tout point de la géométrie considérée, la méthode permet de calculer les coefficients de pression, de frottement et de flux de chaleur à partir des conditions de vol (vitesse,  $\rho_\infty$ ,  $T_\infty$ ,  $P_\infty$ ), de l'attitude (incidence, dérapage, roulis) et de variables géométriques locales (inclinaison, courbure, etc.). Pour chaque point de la trajectoire discrétisée en temps, le code évalue d'abord un critère de raréfaction donné. Selon que le régime soit moléculaire libre, transitionnel ou continu, une formulation particulière est alors utilisée pour chaque grandeur simulée.

### 2.1 Méthodes par panneaux : grandeurs et conventions

Une méthode par panneaux est une méthode locale, c'est-à-dire que pour un maillage surfacique d'une géométrie quelconque, elle calcule en chaque élément les grandeurs voulues. L'aspect local de la méthode provient du fait que les formulations utilisées pour le calcul des distributions utilisent des variables géométriques locales. Dans ce contexte, une variable fondamentale est l'*angle d'inclinaison locale*  $\theta$  entre la vitesse et la normale intérieure à l'élément (Figure 7.1). Comme l'indique Bird [43], il est parfois plus commode d'utiliser l'angle d'incidence locale  $\alpha = \frac{\pi}{2} - \theta$ .

Comme on le verra par la suite, certaines formulations considèrent que, pour un élément à l'ombre, *i.e.* qui n'est pas directement impacté par l'écoulement (Figure 7.2), certains coefficients aérodynamiques et aérothermodynamiques sont supposés nuls. La détection des éléments à l'ombre est donc cruciale. La *méthode des angles* est la méthode de détection la plus élémentaire. A partir de

l'angle d'inclinaison locale, un élément est considéré au vent si  $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$  (i.e.  $-\vec{n} \cdot \vec{U}_\infty \geq 0$ ) et à l'ombre si  $\pi/2 < \theta < 3\pi/2$  (i.e.  $-\vec{n} \cdot \vec{U}_\infty < 0$ ). Dans le cas d'une géométrie complexe comme l'IXV ou un satellite de grande envergure, cette méthode est incapable de détecter les éléments à l'ombre d'autres éléments géométriques. Dans ce cas, la *méthode par projection* présentée dans le chapitre 4 du manuscrit de thèse d'Ysolde Prévereaud [188] permet de pallier les limites de la méthode des angles. Dans **ARES**, la méthode des angles est utilisée pour détecter les éléments au vent puis la méthode par projection est utilisée sur ces éléments, pour détecter parmi eux les éléments qui sont en réalité à l'ombre.

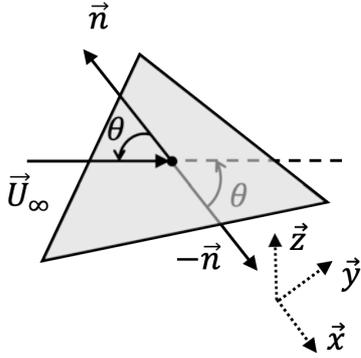


FIGURE 7.1 – Angle d'inclinaison locale sur un élément discret.

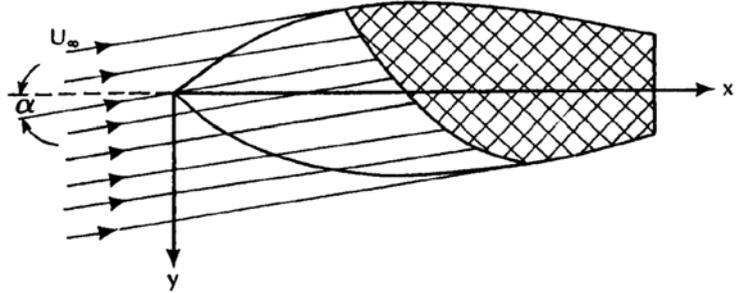


FIGURE 7.2 – Parties au vent (blanc) et à l'ombre (hachuré) d'une géométrie simple (extrait de [2]).

Le *rayon de courbure locale* est un autre paramètre géométrique déterminant pour certaines formulations. Pour le calculer, plusieurs méthodes sont disponibles dans **ARES** (voir chapitre 4 [188]). Dans ce travail, la *méthode « finale »* a été utilisée. Son principe est d'approcher localement la surface par une fonction quadratique d'expression :

$$f(x, y, z) = ax^2 + bx^2 + cz^2 + dxy + exz + fyz + gx + hy + iz + l = 0, \quad (7.1)$$

où  $(x, y, z)$  sont les coordonnées cartésiennes de la surface et les coefficients  $a$  à  $l$  sont les inconnues de la quadratique. En écrivant cette équation pour les voisins de 1<sup>er</sup> et 2<sup>ième</sup> ordres d'un nœud  $n_i$ , l'obtention d'un système à 10 inconnues surdéterminé permet d'exprimer  $f$  dans le voisinage du nœud. En ce point, la normale locale  $\vec{n}_f$  est donnée par l'équation :

$$\vec{n}_f = \frac{\vec{\nabla} f(x, y, z)}{|f(x, y, z)|}, \quad (7.2)$$

et la courbure s'obtient par la relation :

$$C = \vec{\nabla} \cdot \vec{n}_f. \quad (7.3)$$

Finalement, le rayon de courbure locale  $R_{n,loc}$  du nœud  $n_i$  s'écrit :

$$R_{n,loc} = \frac{1}{C}. \quad (7.4)$$

On remarque que, par construction, la courbure d'un élément appartenant à une portion plane de la géométrie est nulle et donc que le rayon de courbure locale est infini. Selon la géométrie et la formulation considérées, ce paramètre peut donc compromettre la stabilité numérique de la solution. Cet aspect est discuté de façon plus approfondie dans la suite du manuscrit.

## 2.2 Formulations pour le régime transitionnel

En raison d'une connaissance trop approximative du régime transitionnel<sup>1</sup>, dès la fin des années 50, les besoins d'ingénierie ont conduit au développement de corrélations empiriques pour ce

1. Ce régime désigne ici le régime intermédiaire entre les régimes moléculaire libre et continu.

régime. De telles corrélations sont appelées *fonctions de raccord* (en anglais *bridging functions*) et tirent profit de l'évolution remarquable des grandeurs aérodynamiques et aérothermodynamiques en fonction du degré de raréfaction. Locales ou globales, les fonctions de raccord permettent de déterminer, en tout point du régime transitionnel, la valeur d'une grandeur locale ( $C_p, C_f, q, \dots$ ) ou intégrée ( $C_D, C_L, C_m, \dots$ ) à partir de leurs valeurs connues en régimes continu et moléculaire libre.

La plus ancienne référence sur le sujet remonte à l'année 1955 et au rapport de Martino [191]. La formulation proposée par Martino avait initialement pour but d'exprimer la variation du facteur d'efficacité thermométrique (en anglais *recovery factor*) d'un cylindre, en fonction de la probabilité  $P$  qu'une molécule impacte la paroi de l'objet avant d'interagir avec une autre molécule. Pour une grandeur  $C_x$  quelconque, la formule généralisée de Martino s'écrit :

$$C_{x,\text{trans}} = P C_{x,\text{fm}} + (1 - P) C_{x,\text{cont}}, \quad (7.5)$$

où  $C_{x,\text{trans}}$  correspond à la valeur de  $C_x$  au point du régime transitionnel où est calculée la probabilité  $P$ .  $C_{x,\text{fm}}$  et  $C_{x,\text{cont}}$  désignent respectivement les valeurs limites de  $C_x$  en régimes moléculaire libre et continu. L'analyse asymptotique de l'équation (7.5) montre que l'expression :

$$P = \frac{Kn}{1 + Kn}, \quad (7.6)$$

permet d'assurer la cohérence de la relation de Martino dans les régimes limites continu et moléculaire libre. Comme cette formulation non paramétrique ne dépend que de  $Kn$ , pour garantir une bonne correspondance entre cette corrélation et les données expérimentales disponibles, une attention particulière a été portée à la forme du paramètre de raréfaction. Ainsi, en reprenant la classification habituelle des régimes raréfiés, un  $Kn$  basé sur la relation de Tsien [53] est préconisé pour le régime de glissement ( $Kn \propto M_\infty / \sqrt{Re}$ ) tandis qu'en régime transitionnel, une formulation plus globale convient ( $Kn \propto \lambda / L_{\text{ref}}$ ) [192]. L'application de cette formule au calcul de coefficients aérodynamiques intégrés pour différentes géométries a été étudiée par Blick [193]. L'application au calcul du flux de chaleur à la surface d'une sphère a, quant à elle, été étudiée par Nomura [194].

Dans un souci d'améliorer la précision de telles corrélations, et en utilisant un unique paramètre de raréfaction, une nouvelle formulation s'est progressivement imposée selon l'expression :

$$C_{x,\text{trans}} = C_{x,\text{cont}} + (C_{x,\text{fm}} - C_{x,\text{cont}})f(Kn), \quad (7.7)$$

où  $f(Kn)$  est une fonction paramétrique plus ou moins complexe qui dépend généralement des Knudsen limites  $Kn_{\text{fm}}$  et  $Kn_{\text{cont}}$  de la façon suivante :

$$\begin{aligned} f(Kn_{\text{fm}}) &= 1, \\ f(Kn_{\text{cont}}) &= 0. \end{aligned} \quad (7.8)$$

La plus ancienne formulation de ce type repose sur une fonction exponentielle introduite par Masson [195] pour le calcul du coefficient de traînée d'une sphère de diamètre  $D$  :

$$f(Kn) = \exp\left(-\frac{1}{10} \frac{\rho_\infty D}{\rho_s \lambda_s}\right), \quad (7.9)$$

où  $\rho_s$  et  $\lambda_s$  sont respectivement la masse volumique et le libre parcours moyen après le choc. Une expression similaire a ensuite été introduite par Matting [196] pour le calcul des coefficients de pression, portance et traînée  $C_{p,L,D}$  d'un corps émoussé :

$$f(Kn) = \exp\left(-15 \times 10^7 R_n \rho_\infty (1 + E_{p,L,D})\right), \quad (7.10)$$

où  $R_n$  est le rayon de nez de l'objet (m),  $\rho_\infty$  la masse volumique de l'écoulement non perturbé ( $\text{kg/m}^3$ ) et  $E_{p,L,D}$  est un paramètre d'ajustement sans dimension propre à la grandeur d'intérêt.

Blanchard a utilisé une autre fonction exponentielle dans le cadre de l'exploitation des données de vol aérodynamiques de la navette spatiale américaine [197] :

$$f(Kn) = \exp\left(-K_{1,i}|K_{2,i} - \log(Kn)|^{K_{3,i}}\right), \quad (7.11)$$

avec  $(K_{1,i}, K_{2,i}, K_{3,i})_{i=A,N}$ , six coefficients d'ajustement pour calculer les coefficients de force axiale  $C_A$  et normale  $C_N$ .

Toujours dans le cadre de l'étude de la navette spatiale américaine, Blanchard [197] a introduit une fonction  $\sin^2$  pour les calculs pré-vol. Dans sa forme générale, cette fonction s'écrit :

$$f(Kn) = \sin^2(\pi[a_1 + a_2 \log(Kn)]), \quad (7.12)$$

où  $a_1$  et  $a_2$  sont des paramètres liés aux nombres de Knudsen limites  $Kn_{\text{fm}}$  et  $Kn_{\text{cont}}$ . Une fonction  $\sin^n$  a même été introduite dans le cadre du projet AFE [198] ;

$$\begin{aligned} f(Kn) &= \sin^n(\pi[a_1 + a_2 \log(Kn)]), \\ n &= a_3 + a_4 \log(Kn). \end{aligned} \quad (7.13)$$

Là aussi, les paramètres  $(a_i)_{i=1,\dots,4}$  sont liés aux Knudsen limites. Les fonctions de raccord d'**ARES** pour les grandeurs  $C_p$ ,  $C_f$  et  $C_h$  sont de cette forme [188].

La fonction erf – log a ensuite été introduite par Ivanov *et al.* [199] pour la simulation de l'aérodynamique de la capsule Soyouz. Elle s'écrit :

$$f(Kn) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Delta Kn} \ln \left( \frac{Kn}{Kn^*} \right) \right) \right], \quad (7.14)$$

où  $\Delta Kn = \ln(Kn^*/Kn_{\text{cont}})$  et  $Kn^*$  est le centre du régime transitionnel complet qui vérifie  $f(Kn^*) = 0.5$ . L'étude comparative effectuée par Wilmoth, Blanchard et Moss [200] entre les fonctions  $\sin^2$  et erf – log à la lumière des données obtenues lors du vol Viking I met en avant la grande précision de ces deux fonctions. Par rapport à la fonction  $\sin^2$ , un avantage de taille en terme de coût de paramétrisation est néanmoins offert par la formulation erf – log. En effet, en suivant la procédure indiquée dans [200] (*i.e.* en supposant une valeur universelle du ratio  $\Delta Kn$ ), un seul calcul dans le régime transitionnel permet de déterminer l'unique paramètre ajustable  $Kn^*$  tandis que plusieurs calculs sont nécessaires pour déterminer les paramètres de la fonction  $\sin^2$ .

D'autres fonctions ont été développées spécifiquement pour le calcul de grandeurs aérodynamiques locales. La formule de Kotov, Lychkin, Reshetin et Schelkogonov [201] présentée dans [202] a la forme générale suivante :

$$C_p = p_0 + p_1 \sin(\alpha) + p_2 \sin^2(\alpha), \quad (7.15)$$

et

$$C_f = \tau_0 \cos(\alpha) + \tau_1 \cos(\alpha) \sin(\alpha), \quad (7.16)$$

où  $\alpha$  est l'angle d'incidence locale et les coefficients  $(p_i, \tau_i)_{i=0,1}$  sont des coefficients de régimes explicités dans [202]. Plus tard, Potter et Peterson ont développé une autre formulation pour le calcul des grandeurs locales de frottement et de pression [203]. Le coefficient de frottement s'obtient avec les relations suivantes :

$$C_f/C_{f,\text{fm}} = \left( \frac{0.24}{0.24 + Z^{-1.3}} \right)^{1.25} \quad \text{si } Z > 1 \text{ et } \theta \leq 75^\circ, \quad (7.17)$$

ou

$$C_f/C_{f,\text{fm}} = 0.1284Z \quad \text{si } 0.1 < Z < 1 \text{ et } \theta \leq 75^\circ. \quad (7.18)$$

La variable  $Z$  est définie par :

$$Z = \left( \frac{M_\infty}{\sqrt{Re}} \right) \left( \frac{T_\infty}{T_w} \right)^{(1-\omega)/2} (1 + \sin(\theta)) \left( \frac{80h_w}{h_{\text{tot}}} \right)^y, \quad (7.19)$$

avec

$$y = \frac{V^{2.7}}{V^{3.1} + 180}, \quad (7.20)$$

$$V = \frac{M_\infty}{Re_\infty}.$$

Lorsque l'inclinaison locale  $\theta \in ]75^\circ; 90^\circ]$ , le ratio  $C_f/C_{f, \text{fm}}$  se calcule à partir d'une interpolation linéaire détaillée dans [203]. Le ratio de pression  $p/p_{\text{fm}}$  est donné par les équations suivantes :

$$p/p_{\text{fm}} = 1 - \left(1 - \frac{p_{\text{cont}}}{p_{\text{fm}}}\right) \left[1 + (0.6 + \theta)^4 \sqrt{\frac{M_\infty}{Re_\infty}}\right]^{-1} \quad \text{si } p_{\text{cont}} \leq p_{\text{fm}}, \quad (7.21)$$

ou

$$p/p_{\text{fm}} = 1 + \left(\frac{p_{\text{cont}}}{p_{\text{fm}}} - 1\right) \left[1 + 0.6 \sqrt{\frac{M_\infty}{Re_\infty}}\right]^{-1} \quad \text{si } p_{\text{cont}} > p_{\text{fm}}. \quad (7.22)$$

L'angle  $\theta$  s'exprime cette fois en radian. La comparaison de cette méthode à des résultats numériques et expérimentaux pour plusieurs géométries émoussées (sphère, sphère-cône et AFE) présentée dans [203] montre un bon niveau de précision.

Plus récemment, une nouvelle bridging locale proposée par Morsa *et al.* a été présentée dans [202]. Cette nouvelle formulation consiste en une combinaison des fonctions de raccord locales de Potter et Kotov mais sans apporter de réelle amélioration aux formules originales. De plus, relativement aux résultats numériques obtenus pour les véhicules Orion et Expert, la comparaison du coefficient intégré  $C_A$  calculé par intégration des formules locales d'une part et avec la formule globale en  $\sin^2$  d'autre part, a mis en évidence une plus grande précision de la formule globale.

Dans la présentation du code **FOSTRAD** [204], Mehta *et al.* introduisent une nouvelle fonction basée sur une combinaison de sigmoïdes<sup>2</sup>. Cette fonction s'écrit :

$$f(Kn) = \begin{pmatrix} a_{s1} \text{sig}(b_{s1} \log(Kn) + c_{s1}) \\ a_{s2} \text{sig}(b_{s2} \log(Kn) + c_{s2}) \\ a_{s3} \text{sig}(b_{s3} \log(Kn) + c_{s3}) + \delta \end{pmatrix}, \quad (7.23)$$

où les paramètres  $(a_{si}, b_{si}, c_{si})_{i=1,3}$  et  $\delta$  sont des constantes choisies pour approcher au mieux les résultats disponibles. La fonction sigmoïde est définie par :

$$\text{sig}(x) = \frac{1}{1 + 10^{\pm x}}, \quad (7.24)$$

où le signe  $\pm$  dépend du sens de variation de la grandeur  $C_{x, \text{trans}}$  calculée. Pour la rentrée d'Orion, le calcul des coefficients  $C_D$ ,  $C_L$  et  $C_m$  avec cette formule permet d'obtenir un meilleur niveau de précision que la formule en  $\sin^2$ . Dans [204], la comparaison des deux approches met également en évidence la différence de comportement de la fonction  $\sin^2$  selon le choix des paramètres  $Kn_{\text{fm}}$  et  $Kn_{\text{cont}}$  tandis que la formule sigmoïde de Mehta ne nécessite pas d'indiquer explicitement les bornes du régime transitionnel.

Les fonctions de raccord constituent un excellent outil d'ingénierie pour la première phase de conception d'un véhicule spatial [182]. En effet, pour des géométries émoussées, elles offrent généralement un niveau de précision élevé pour un coût de calcul minime. Néanmoins, les fonctions de raccord souffrent également d'un certain nombre de défauts. Pour les géométries élancées par exemple, les effets de viscosité compromettent la précision des formulations locales [205]. De plus, les fonctions de raccord sont souvent ajustées pour un objet en particulier. Elles ne sont donc pas généralisables et fortement dépendantes de la définition du paramètre de raréfaction. Pour illustrer cet aspect, il suffit de considérer une géométrie élancée telle que la navette spatiale. Ce véhicule a

2. Comme on le verra plus tard, cette fonction est équivalente à un réseau de neurones multicouche avec une couche cachée.

un rayon de nez de l'ordre du mètre mais une longueur totale de plus de 30 m. De même pour l'IXV, le véhicule est trois fois plus long que haut. Par conséquent, à des conditions de raréfaction fixées, le nombre de Knudsen est très relatif au choix de la longueur de référence. De la même façon, le calcul du libre parcours moyen est relatif au modèle utilisé (HS ou VHS par exemple) et à la précision du modèle d'atmosphère pour l'estimation de la densité numérique  $n_\infty$ . Par ailleurs, le caractère arbitraire des limites utilisées pour définir les régimes moléculaire libre et continu est également un point limitant. En effet, malgré l'importance de choisir correctement ces limites [206], parmi les références mentionnées dans cette section, une grande variété de valeurs a été utilisée pour  $Kn_{\text{cont}}$  et surtout pour  $Kn_{\text{fm}}$ . Si une valeur  $Kn_{\text{fm}} = 10$  est parfois jugée pertinente [197, 198, 202] elle est parfois prise égale à 25 [200] et même à 100 [188, 198]. En fait, la définition formelle du régime moléculaire libre rappelée par Livadiotti [49] est donnée par les conditions :

$$\begin{aligned} Kn_{\lambda_{ii}} &= \frac{\lambda_{ii}}{L_{\text{ref}}} > 10, \\ Kn_{\lambda_{ir}} &= \frac{\lambda_{ir}}{L_{\text{ref}}} > 10. \end{aligned} \tag{7.25}$$

Dans ce contexte, les variables  $\lambda_{ii}$  et  $\lambda_{ir}$  désignent respectivement le libre parcours moyen par rapport aux particules incidentes entre elles et le libre parcours moyen relatif aux interactions entre les particules réfléchies et incidentes. En théorie cinétique des gaz, on utilise généralement le libre parcours moyen  $\lambda_\infty$  vérifiant la relation :

$$\lambda_\infty \propto \frac{1}{\sqrt{\pi} n_i d_{\text{ref}}^2}, \tag{7.26}$$

où  $n_i$  est la densité numérique des particules incidentes. D'après Sentman [207],  $\lambda_{ir}$  peut être relié à  $\lambda_\infty$  par la relation :

$$\lambda_{ir} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{s} \sqrt{\frac{T_r}{T_i}} \lambda_\infty, \tag{7.27}$$

où  $s$  est la vitesse moléculaire définie par l'équation (7.33),  $T_r$  est la température des particules réfléchies et  $T_i$  la température des particules incidentes. Sous les hypothèses suivantes ( $n_i, T_i$ )  $\simeq$  ( $n_\infty, T_\infty$ ) et  $T_r \simeq T_w$ , on constate que pour les écoulements hypersoniques hyperthermiques (*i.e.* tels que  $s > 5$ ) avec  $T_w \leq T_\infty$ , on a nécessairement :  $\lambda_{ir} < \lambda_\infty$ . Par conséquent, l'aspect moléculaire libre sous condition  $Kn > 10$  peut s'avérer insuffisant et une valeur plus conservative est alors préférable mais encore faut-il que le choix des paramètres  $L_{\text{ref}}$  et  $\lambda_\infty$  soit le plus pertinent.

Comme indiqué dans cette section, les grandeurs déterminées à l'aide des fonctions de raccord dépendent des grandeurs calculées en régime moléculaire libre et continu. Ces formulations se basent sur des hypothèses spécifiques et souffrent de leurs propres limitations susceptibles de se propager dans le régime transitionnel. C'est la raison pour laquelle, il est aussi important de connaître les modèles simplifiés utilisés dans ces régimes.

### 2.3 Formulations pour le régime moléculaire libre

En régime moléculaire libre, les distributions de pression, de frottement et de flux de chaleur sont données par des formules analytiques obtenues à partir de la théorie cinétique des gaz présentée en détails dans les ouvrages [1, 43, 207] et résumée ici. En reprenant la Figure 7.1 (page 187), on peut introduire le repère cartésien  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$  tel que  $\vec{x}$  est colinéaire à  $-\vec{n}$ ,  $\vec{U}_\infty$  appartient au plan  $(\vec{x}, \vec{y})$  et l'élément discret est contenu dans le plan  $(\vec{y}, \vec{z})$ . En reprenant les notations du chapitre 2 et en considérant le flux de particules de vitesse moyenne  $\vec{U}_\infty$  à travers cet élément discret, alors pour n'importe quelle particule, les composantes de vitesse dans le repère cartésien considéré s'écrivent :

$$\begin{aligned} u &= u' + U_\infty \cos(\theta), \\ v &= v' + U_\infty \sin(\theta), \\ w &= w'. \end{aligned} \tag{7.28}$$

Les termes  $u'$ ,  $v'$  et  $w'$  désignent les composantes de vitesse thermique. Le flux d'une quantité  $Q$  à travers l'élément considéré vaut alors :

$$n \langle Qu \rangle = n \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} Q u f \, du \, dv \, dw. \quad (7.29)$$

Pour un flux de particules à l'équilibre, la distribution  $f$  est une Maxwellienne de vitesse centrée sur la vitesse moyenne  $\vec{U}_\infty$  d'expression :

$$f_M(\vec{u}) = \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2k T} \left[ (U_\infty \cos(\theta) - u)^2 + (U_\infty \sin(\theta) - v)^2 + w^2 \right] \right\}, \quad (7.30)$$

où  $\vec{u} = (u, v, w)$ . L'équation (7.29) peut alors s'exprimer à partir des composantes de vitesse thermique sous la forme :

$$n \langle Qu \rangle = n \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-U_\infty \cos(\theta)}^{+\infty} Q (u' + U_\infty \cos(\theta)) \exp \left\{ -\frac{m}{2k T} [u'^2 + v'^2 + w'^2] \right\} du' dv' dw'. \quad (7.31)$$

A partir de cette équation, la pression incidente  $p_i$  correspondant au flux incident de quantité de mouvement normal s'obtient en prenant  $Q = m u$  dans (7.31) :

$$p_i = n m \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left( -\frac{m}{2k T} v'^2 \right) dv' \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left( -\frac{m}{2k T} w'^2 \right) dw' \int_{-U_\infty \cos(\theta)}^{+\infty} (u' + U_\infty \cos(\theta)) \exp \left( -\frac{m}{2k T} u'^2 \right) du'. \quad (7.32)$$

En introduisant le ratio de vitesse moléculaire  $s$  :

$$s = U_\infty \sqrt{\frac{m}{2k T}}, \quad (7.33)$$

et à partir des relations intégrales disponibles en Annexe B de [43], on obtient finalement :

$$p_i = n k T \left\{ \frac{s \cos(\theta)}{\sqrt{\pi}} \exp(-s^2 \cos^2(\theta)) + \left( \frac{1}{2} + s^2 \cos^2(\theta) \right) (1 + \operatorname{erf}(s \cos(\theta))) \right\}, \quad (7.34)$$

où la fonction erf est la fonction erreur définie par la relation :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt. \quad (7.35)$$

De la même manière, en posant  $Q = m v$ , on peut exprimer le flux incident de quantité de mouvement tangentielle  $\tau_i$  :

$$\tau_i = n k T \left\{ \frac{s \sin(\theta)}{\sqrt{\pi}} \exp(-s^2 \cos^2(\theta)) + s^2 \cos(\theta) \sin(\theta) [1 + \operatorname{erf}(s \cos(\theta))] \right\}. \quad (7.36)$$

En posant  $Q = 1/2 m (u^2 + v^2 + w^2)$ , on obtient l'expression de  $q_{\text{tr},i}$ , la contribution de l'énergie cinétique au flux de chaleur incident :

$$q_{\text{tr},i} = \frac{\rho}{4} \left( \frac{2k T}{m} \right)^{3/2} \left\{ \frac{s^2 + 2}{\sqrt{\pi}} \exp(-s^2 \cos^2(\theta)) + s \cos(\theta) (s^2 + 5/2) [1 + \operatorname{erf}(s \cos(\theta))] \right\}. \quad (7.37)$$

En notant  $\zeta$  le nombre de degrés de liberté internes et  $R_s$  la constante spécifique du gaz considéré, l'énergie spécifique interne  $e_{\text{int}}$  s'écrit :

$$e_{\text{int}} = \frac{1}{2} \zeta R_s T. \quad (7.38)$$

En utilisant la relation entre  $\zeta$  et le coefficient adiabatique  $\gamma$ , on a :

$$\zeta = \frac{5 - 3\gamma}{\gamma - 1}. \quad (7.39)$$

On peut alors écrire la contribution de l'énergie interne au flux de chaleur :

$$q_{\text{int},i} = \frac{\rho}{8\sqrt{\pi}} \left( \frac{2kT}{m} \right)^{3/2} \frac{5 - 3\gamma}{\gamma - 1} \left\{ \exp(-s^2 \cos^2(\theta)) + \sqrt{\pi} s \cos(\theta) [1 + \text{erf}(s \cos(\theta))] \right\}. \quad (7.40)$$

Le flux de chaleur incident  $q_i$  vaut finalement :

$$q_i = q_{\text{tr},i} + q_{\text{int},i}. \quad (7.41)$$

Les distributions de pression, frottement et flux de chaleur s'obtiennent en écrivant les bilans de flux à la paroi :

$$\begin{aligned} p &= p_i + p_r, \\ \tau &= \tau_i - \tau_r, \\ q &= q_i - q_r. \end{aligned} \quad (7.42)$$

où  $p_r$ ,  $\tau_r$  et  $q_r$  sont les flux réfléchis de pression, de frottement et de chaleur. A ce stade, l'enjeu est d'exprimer ces flux réfléchis dont les distributions ne sont a priori pas connues. En cinétique des gaz, les lois d'interaction gaz-surface servent justement à relier les distributions réfléchies aux distributions incidentes. Pour le flux de chaleur, le coefficient d'accommodation énergétique de Maxwell noté ici  $w_M$  (pour éviter toute confusion avec les autres notations) est défini par la relation :

$$w_M = \frac{E_i - E_r}{E_i - E_w}, \quad (7.43)$$

où  $E_i$ ,  $E_r$ ,  $E_w$  sont les flux d'énergie incidents, réfléchis et réfléchis à l'équilibre thermique avec la paroi. En remarquant que  $E \equiv q$ , la relation (7.43) donne directement :

$$q = w_M (q_i - q_w). \quad (7.44)$$

En reprenant les calculs précédents<sup>3</sup> et en considérant cette fois que la distribution  $f$  du flux de particules réfléchi à l'équilibre avec la paroi suit une Maxwellienne de vitesse nulle et de température  $T_w$ , on trouve finalement :

$$q = w_M \frac{\rho_\infty}{4\sqrt{\pi}} \left( \frac{2kT_\infty}{m} \right)^{3/2} \left( \left[ s^2 + \frac{\gamma}{\gamma - 1} - \left\{ \frac{1}{2} \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right\} \left( \frac{T_w}{T_\infty} \right) \right] \left[ \exp(-s^2 \sin^2 \alpha) + \sqrt{\pi} s \sin(\alpha) \{1 + \text{erf}(s \sin(\alpha))\} \right] - \frac{1}{2} \exp(-s^2 \sin^2(\alpha)) \right). \quad (7.45)$$

Schaaf et Chambre [190, 189] proposent d'utiliser un coefficient d'accommodation distinct pour la quantité de mouvement normale ( $\sigma_n$ ) et la quantité de mouvement tangentielle ( $\sigma_t$ ) :

$$\sigma_n = \frac{p_i - p_r}{p_i - p_w}, \quad (7.46)$$

$$\sigma_t = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i - \tau_w}. \quad (7.47)$$

---

3. La procédure de Bird [43] consiste à écrire le flux réfléchi  $q_w$  à partir du flux incident pour un gaz stationnaire (*i.e.* avec  $s = 0$ ) de température  $T_w$ . Ainsi, seul le calcul du flux numérique de particules réfléchi à l'équilibre avec la paroi  $n_w$  est nécessaire.

Le même raisonnement<sup>4</sup> permet alors de trouver :

$$p = \frac{\rho_\infty}{2} \left( \frac{2kT_\infty}{m} \right) \left\{ \left[ \frac{2 - \sigma_n}{\sqrt{\pi}} s \sin(\alpha) + \frac{1}{2} \sigma_n \sqrt{\frac{T_w}{T_\infty}} \right] \exp(-s^2 \sin^2(\alpha)) + \left[ (2 - \sigma_n) \left( \frac{1}{2} + s^2 \sin^2(\alpha) \right) + \frac{1}{2} \sigma_n \sqrt{\frac{T_\infty}{T_w}} \sqrt{\pi} s \sin(\alpha) \right] [1 + \operatorname{erf}(s \sin(\alpha))] \right\}, \quad (7.48)$$

$$\tau = \frac{\sigma_t \rho_\infty}{2\sqrt{\pi}} \frac{2kT_\infty}{m} s \cos(\alpha) \left[ \exp(-s^2 \sin^2(\alpha)) + \sqrt{\pi} s \sin(\alpha) \{1 + \operatorname{erf}(s \sin(\alpha))\} \right]. \quad (7.49)$$

Les coefficients  $C_p$  et  $C_f$  se déduisent ensuite directement des équations (7.48) et (7.49).

Comme l'explique Falchi [189], bien que l'utilisation de deux coefficients comme préconisé par Schaaf et Chambre soit plus précise, l'expérience montre que pour les deux coefficients, des valeurs proches de 1 doivent être prises. Le plus souvent, la distinction entre les coefficients  $w_M$ ,  $\sigma_n$  et  $\sigma_t$  n'est pas faite et un seul coefficient sert à décrire l'ensemble des interactions gaz-surface. Les travaux sur l'aérodynamique de satellites ont alors montré que le coefficient d'accommodation global ainsi utilisé dépend de la température de paroi, de l'angle d'inclinaison des particules mais aussi du degré de contamination de la paroi et donc de l'altitude [49, 100]. Dans l'ensemble, les interactions gaz-surface sont très complexes et des efforts sont toujours en cours pour atteindre un meilleur niveau de compréhension [101].

## 2.4 Modèles en régime continu

En régime continu, le flux de chaleur au point d'arrêt est une grandeur déterminante notamment pour le dimensionnement des Système de Protection Thermique (TPS). Pour cette raison, beaucoup d'efforts ont été mis en œuvre depuis la fin des années 1950 et jusqu'à aujourd'hui, pour développer des corrélations empiriques du flux de chaleur au point d'arrêt. Plus particulièrement, dans les conditions qui nous intéressent (vitesse de vol  $< 10$  km/s), le rayonnement de la couche de choc étant négligeable, les modèles considérés servent à estimer le flux de chaleur convecto-diffusif.

### 2.4.1 Flux de chaleur au point d'arrêt

Une des premières relations empiriques pour le flux de chaleur convecto-diffusif au point d'arrêt a été proposée par Fay et Riddell en 1957 [208]. Dans sa forme générale, cette formulation prend en compte les mécanismes réactifs (diffusion et recombinaison) selon la relation [189] :

$$q_s = \frac{0.76}{Pr^{0.6}} (\rho_w \mu_w)^{0.1} (\rho_s \mu_s)^{0.4} \left[ 1 + (Le^\alpha - 1) \left( \frac{h_D}{h_s} \right) \right] (h_s - h_w) \sqrt{\left( \frac{du_e}{dx} \right)_s}, \quad (7.50)$$

où  $q_s$  est donné en  $W/m^2$ . Les grandeur  $h_D$ ,  $h_s$  et  $h_w$  correspondent respectivement aux enthalpies massiques de diffusion, au point d'arrêt et à la paroi (J/kg). Les masses volumiques au point d'arrêt et à la paroi ( $\rho_s, \rho_w$ ) s'expriment en  $kg/m^3$  et les viscosités au point d'arrêt et à la paroi ( $\mu_s, \mu_w$ ) s'expriment en Pa.s. Le coefficient  $\alpha$  varie en fonction de l'état chimique du gaz et de la catalycité de paroi. Ainsi, si dans la couche limite, le gaz est à l'état d'équilibre chimique  $\alpha = 0.54$ , s'il est figé avec une paroi totalement catalytique  $\alpha = 0.63$  et s'il est figé avec une paroi non-catalytique  $\alpha \rightarrow \infty$ . Bien que cette expression soit très complète, certains paramètres ne peuvent être exprimé à l'aide d'un modèle simple et toutes les possibilités offertes ne sont pas utilisables dans les codes de rentrée.

En supposant  $Pr = 0.71$  et  $Le = 1$ , l'équation (7.50) se simplifie et prend la forme suivante :

$$q_s = 0.94 (\rho_w \mu_w)^{0.1} (\rho_s \mu_s)^{0.4} (h_s - h_w) \sqrt{\left( \frac{du_e}{dx} \right)_s}. \quad (7.51)$$

4. Pour un gaz stationnaire, on trouve immédiatement  $\tau_w = 0$  et la connaissance de  $n_w$  permet de calculer  $p_w$ .

Dans le cadre de la théorie newtonienne, le gradient de vitesse au point d'arrêt  $\left(\frac{du_e}{dx}\right)_s$  peut s'exprimer à partir de la pression d'arrêt  $p_s$  (Pa) et de la pression dans l'écoulement non perturbé  $p_\infty$  (Pa) selon la relation :

$$\left(\frac{du_e}{dx}\right)_s = \frac{1}{R_n} \sqrt{\frac{2(p_s - p_\infty)}{\rho_s}}, \quad (7.52)$$

où  $R_n$  s'exprime en m et  $\rho_s$  en kg/m<sup>3</sup>. Le modèle tel que donné par les équations (7.51) et (7.52) est implémenté dans **SCARAB** et **FOSTRAD**<sup>5</sup> [204]. On notera par ailleurs qu'il existe d'autres théories pour exprimer le gradient de vitesse comme celle de Stokes et Truitt [209].

La forme non-enthalpique (*i.e.* pour une paroi froide) de la formule de Sutton-Graves [132] a déjà été introduite dans le chapitre 5 du manuscrit. Son expression générale sous forme enthalpique est :

$$q_s = K \sqrt{\frac{p_s}{R_n}} (h_s - h_w), \quad (7.53)$$

où  $K$  est un facteur de transfert de chaleur dépendant de la masse moléculaire, de la fraction massique et du paramètre de transport des espèces du gaz [2, 181]. Ce modèle est le résultat de l'étude du transfert de chaleur par convection au point d'arrêt d'un corps axisymétrique pour un mélange de gaz arbitraire à l'équilibre thermochimique. Il est également implémenté dans **ARES**.

Des travaux menés à l'ONERA ont conduit à la construction d'autres corrélations disponibles dans **ARES**. Parmi elles, on peut citer la formulation de Vérant-Sagnier [210] qui est une corrélation expérimentale proche de la formule de Sutton-Graves et donnée par la relation :

$$q_s = 23.79 \sqrt{\frac{p_s}{R_n}} \left( \frac{h_{\text{tot}} - h_w}{R_{s,\text{air}} T_{\text{ref}}} \right)^{1.069}, \quad (7.54)$$

avec  $q_s$  le flux de chaleur au point d'arrêt (W/m<sup>2</sup>),  $h_{\text{tot}} = h_\infty + \frac{1}{2}U_\infty$  l'enthalpie massique totale (J/kg),  $h_w = Cp(T_w)T_w$  l'enthalpie massique de paroi (J/kg),  $R_n$  le rayon de nez (m),  $p_s$  la pression au point d'arrêt (Pa),  $R_{s,\text{air}}$  la constante spécifique de l'air (J.kg<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>) et  $T_{\text{ref}} = 273.15$  K une température de référence (K). Cette corrélation fait l'hypothèse d'une paroi totalement catalytique.

Une corrélation encore plus récente a été proposée par Johnston et Brandis [211]. Pour des vitesses comprises entre 3 et 9.5 km/s, près de 340 simulations CFD, sous l'hypothèse d'une paroi super-catalytique, ont été utilisées pour aboutir à l'expression suivante :

$$q_s = 7.455 \times 10^{-9} \rho_\infty^{0.4705} U_\infty^{3.089} R_n^{-0.52}, \quad (7.55)$$

où  $q_s$  est exprimé en W/cm<sup>2</sup>,  $\rho_\infty$  en kg/m<sup>3</sup>,  $U_\infty$  en m/s et  $R_n$  en m. La comparaison présentée par les auteurs montre que relativement aux formulations de Fay-Riddell et Sutton-Graves, cette méthode permet de réduire considérablement l'erreur moyenne sur le flux de chaleur total. Elle a également été récemment implémentée dans **ARES**.

Une étude comparative de différentes formulations a été réalisée dans le cadre de la thèse d'Ysolde Prévereaud pour des conditions de vitesse  $U_\infty \in [630; 7200]$  m/s et d'altitude  $h \in [51.5; 73]$  km. Les résultats résumés dans les tableaux 5.3-5.4 des pages 153-154 du manuscrit [188] suggèrent que la corrélation la plus précise est celle de Vérant-Sagnier. Plus récemment, deux études comparatives de corrélations pour le flux de chaleur au point d'arrêt ont été réalisées par Prévereaud *et al.* [212] et par Park *et al.* [209]. Ces travaux discutent notamment l'importance de l'approche utilisée pour calculer le gradient de vitesse  $\left(\frac{du_e}{dx}\right)_s$  de la formule (7.51), dans un contexte d'estimation de la survivabilité de débris.

---

5. Ce code a depuis été renommé **STRATH-A**. Dans ce manuscrit, le nom utilisé pour désigner le code correspond au nom utilisé par l'article cité conjointement dans la discussion.

### 2.4.2 Distribution du flux de chaleur

Contrairement aux corrélations au point d'arrêt, les formulations pour la distribution du flux de chaleur sont beaucoup moins nombreuses. Une formulation pour une sphère a été proposée par Murzinov en 1966 [213]. En tout point de la sphère, le flux de chaleur  $q$  s'écrit :

$$q = q_s (0.55 + 0.45 \cos(2\theta)), \quad (7.56)$$

où  $\theta$  est l'angle d'inclinaison locale défini plus tôt. On constate qu'au point d'arrêt de la sphère (*i.e.* pour  $\theta = 0$ ), le flux de chaleur est bien égal à  $q_s$ . Lorsque  $\theta$  augmente, le flux diminue et atteint un minimum en  $\theta = \pi/2$ . A l'ombre, la périodicité de la fonction cosinus entraîne l'augmentation du flux ce qui n'est physiquement pas cohérent. La formulation se limite donc à la partie au vent de la sphère.

Une formulation analogue est utilisée dans **FOSTRAD** et **SCARAB** [204] pour calculer la distribution du flux de chaleur à la surface d'une géométrie quelconque :

$$q = q_s (0.1 + 0.9 \cos(\theta)). \quad (7.57)$$

Là encore, la formulation n'est valable que pour la partie au vent de la géométrie. On constate également que comme avec la formulation de Murzinov, pour un angle  $\theta = \pi/2$ , le flux de chaleur atteint une valeur minimale égale à 10% du flux au point d'arrêt.

**ARES** utilise une corrélation plus complexe, celle de Vérant-Lefrançois [28] :

$$q = q_s \left( \frac{p}{p_s} \right)^a \left( \frac{R_n}{R_{n,loc}} \right)^b, \quad (7.58)$$

où les paramètres  $a$  et  $b$  ont été déterminés à partir de simulations 3D de l'IXV en régime continu. Ainsi,  $a = 0.8$  et  $b$  s'obtient par une interpolation linéaire à partir du ratio  $R_n/R_{n,loc}$  (cf. Tableau 7 disponible dans [28]). A priori, la distribution du flux de chaleur ne dépend pas de l'angle d'incidence locale. Cependant, cette dépendance est incluse dans le calcul de la pression locale  $p$  lorsque celle-ci est déterminée à partir de la méthode de Newton modifiée présentée ci-dessous.

### 2.4.3 Coefficients aérodynamiques

En régime continu, le coefficient de frottement  $C_f$  est supposé nul en tout point de la géométrie. Cette hypothèse est une conséquence du fait qu'en régime hypersonique continu, la contribution du frottement est négligeable par rapport à la pression. Le coefficient de pression au point d'arrêt peut être obtenu de différentes manières. La plus simple est la formule de Rayleigh Pitot donnée dans [214] :

$$C_{p,s} = \frac{2}{\gamma M_\infty^2} \left[ \left( \frac{(\gamma + 1)^2 M_\infty^2}{4\gamma M_\infty^2 - 2(\gamma - 1)} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \left( \frac{1 - \gamma + 2\gamma M_\infty^2}{\gamma + 1} \right) - 1 \right], \quad (7.59)$$

où  $\gamma$  est le coefficient adiabatique de l'écoulement. Dans **ARES**, une relation de saut de choc et de compression isentropique au point d'arrêt est employée. Pour déterminer le ratio de masse volumique, une procédure itérative plus réaliste (*i.e.* prenant en compte l'état pré/post-choc) est utilisée. Elle se base sur les équations de Srinivasan [215], elles-mêmes obtenues à partir des tables de Mollier sous hypothèse d'un état d'équilibre thermochimique (chapitre 4 du manuscrit [188]). La distribution du coefficient de pression peut ensuite être calculée avec la méthode de Newton modifiée :

$$C_p = C_{p,s} \sin^2(\alpha). \quad (7.60)$$

En utilisant l'angle d'inclinaison locale (cf Figure 7.1 187), cette expression se rencontre aussi sous la forme :

$$C_p = C_{p,s} \cos^2(\theta). \quad (7.61)$$

A l'ombre, le coefficient de pression est pris égal à zéro. Dans ce cas, en reprenant la formulation de Véran-Lefrançois définie par l'équation (7.58), le terme de pression adimensionnée fait donc bien apparaître une dépendance à l'angle d'inclinaison locale en  $\cos^2$ .

D'après Anderson [214], il existe d'autres formulations pour le coefficient de pression. La formule de Newton-Busemann comprend un terme de correction pour prendre en compte la force centrifuge tandis que les méthodes tangente-cône, tangente-coin et choc-détente sont des alternatives plus précises pour des géométries pointues.

L'évaluation des méthodes d'**ARES** pour le calcul de  $C_{p,s}$  et de la distribution de  $C_p$  par la méthode de Newton est présentée dans le chapitre 5 de [188]. Cette étude montre la très grande précision de la méthode de calcul du coefficient de pression au point d'arrêt. Par ailleurs, la distribution de pression obtenue avec la méthode de Newton modifiée est comparée à des résultats expérimentaux et numériques sur plusieurs géométries (sphère, sphère-cône, ARD, AFE, IXV). Cette étude a mis en évidence plusieurs aspects :

- Une bonne capacité à reproduire le coefficient de pression sur les parties sphériques à proximité du point d'arrêt.
- Une difficulté à estimer correctement le coefficient de pression dans les zones de détente.

Compte tenu de l'extrême simplicité de la formulation, cette méthode offre tout de même un très bon niveau de précision pour les géométries émoussées ce qui explique son emploi dans **SCARAB**, **FOSTRAD** [204] et **ARES** [28] par exemple.

## 2.5 Limites des méthodes par panneaux en régime transitionnel

Maintenant que les différents éléments constitutifs des méthodes par panneaux ont été présentés, cette section vise à illustrer les limitations de ces méthodes en régime transitionnel. Pour cela, trois points de vol de la rentrée de la capsule Apollo 6 (cf. section 2 du chapitre 5) et un point de vol de la rentrée OREX (cf. section 4 du chapitre 5) ont été considérés. Par souci de concision et parce que le flux de chaleur est la grandeur la plus difficile à restituer, seuls les résultats pour cette quantité sont discutés.

Dans **ARES**, les fonctions de raccord et les modèles pour le régime continu font l'hypothèse d'une paroi super-catalytique. Ainsi, pour les conditions de vol où les effets de catalycité sont significatifs, il est physiquement incohérent de comparer les grandeurs aérodynamiques ( $C_{h,stag}$ ,  $C_h$ ) d'**ARES** avec des résultats DSMC **SPARTA** où les phénomènes de catalycité ne sont pas simulés. Pour cette raison, les points de vol de la rentrée d'Apollo sont choisis pour des altitudes  $h \geq 115$  km où ces phénomènes sont négligeables. De même, pour OREX, les observations de Gupta *et al.* rappelées dans le chapitre 5 indiquent que les effets de catalycité pour les points de vol situés au-dessus de 80 km sont négligeables. La comparaison entre les résultats **SPARTA** et **ARES** pour le point de vol à 105 km est donc légitime.

Les calculs rapides ont été réalisés avec **ARES** dans ses conditions d'utilisation standard (*i.e.* la longueur de référence est calculée à partir de taille de l'objet dans la direction de l'écoulement). Conformément aux calculs DSMC le modèle d'atmosphère utilisé est une combinaison des modèles **US62** ( $h < 90$  km) et **Jacchia77** ( $h \geq 90$  km). De même, le libre parcours moyen  $\lambda_\infty$  est calculé à partir du modèle Variable Hard Sphere (VHS) et les paramètres de Bird pour du  $N_2$ .

En régime continu, le flux de chaleur au point d'arrêt est calculé avec la corrélation de Johnston et Brandis (équation 7.55) tandis que la distribution est calculée avec la formule de Véran-Lefrançois (équation 7.58). En régime moléculaire libre, le flux est calculé avec la formule analytique donnée par l'équation (7.45). La fonction de raccord est une fonction de type  $\sin^n$  définie par l'équation (7.13).

Le Tableau 7.1 résume les résultats obtenus au point d'arrêt par DSMC et avec **ARES** à différentes altitudes du régime raréfié. Ces résultats montrent qu'en régime transitionnel ( $Kn \rightarrow 1 \times 10^{-1}$ ), l'écart relatif va jusqu'à 20% tandis qu'il diminue rapidement lorsque le régime se rapproche du régime moléculaire libre ( $Kn \rightarrow 10$ ).

Véhicule	Altitude (km)	$Kn$	$M_\infty$	$C_{h,stag}^{DSMC}$	$C_{h,stag}^{ARES}$	$\Delta E$ (%)
OREX	105	$8.9 \times 10^{-2}$	25.1	0.53	0.67	20
Apollo 6	115	$4.5 \times 10^{-1}$	26.3	0.67	0.84	20
Apollo 6	130	2.6	20.1	0.86	0.95	9
Apollo 6	150	10.2	16.2	0.95	0.99	4

$Kn = \lambda_{\infty, N_2}^{VHS} / L_{ref}$  avec  $L_{ref} = 3.43$  m pour Apollo et 1.5 m pour OREX.

$\Delta E$  est l'écart relatif entre les flux de chaleur au point d'arrêt.

TABEAU 7.1 – Flux de chaleur au point d'arrêt calculé avec **SPARTA** et **ARES** pour trois altitudes de la rentrée Apollo 6 et un point de vol de la rentrée d'OREX.

Pour ces quatre altitudes, les contours et les distributions le long de la ligne centrale du flux de chaleur sont représentés sur les Figures 7.3 et 7.4. Pour OREX à 105 km, on observe une différence majeure de comportement le long de la section conique où la décroissance du flux de chaleur n'est pas capturé par **ARES**. Pour les points de vol Apollo 6 à 115 km et dans une moindre mesure à 130 km, le léger pic du flux de chaleur à l'épaule n'est pas correctement restitué. Cet écart entre les résultats vient du fait qu'en régimes continu et proche continu, les modèles d'**ARES** ne sont pas capables de capturer le pic de flux de chaleur à l'épaule et l'erreur se propage, comme indiqué à la fin de la section 2.2. Ce défaut est illustré sur la Figure 7.5 pour un point de vol de l'ARD ( $h = 66$  km et  $M_\infty = 24$ ,  $\alpha = 20^\circ$ ). Enfin à 150 km ( $Kn = 10.2$ ), le pic du flux de chaleur à l'épaule disparaît et les résultats d'**ARES** et de **SPARTA** sont en excellent accord. Comme attendu, lorsque les conditions deviennent moléculaire libre, les résultats DSMC et **ARES** convergent vers les formules analytiques du régime correspondant.

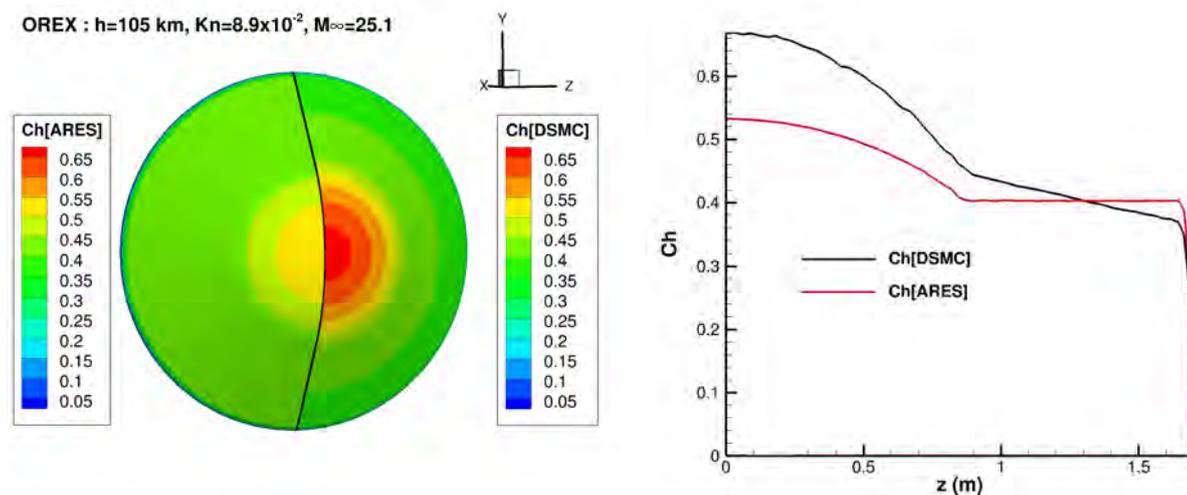


FIGURE 7.3 – Comparaison du coefficient  $C_h$  obtenu par DSMC et avec **ARES** pour OREX à 105 km.

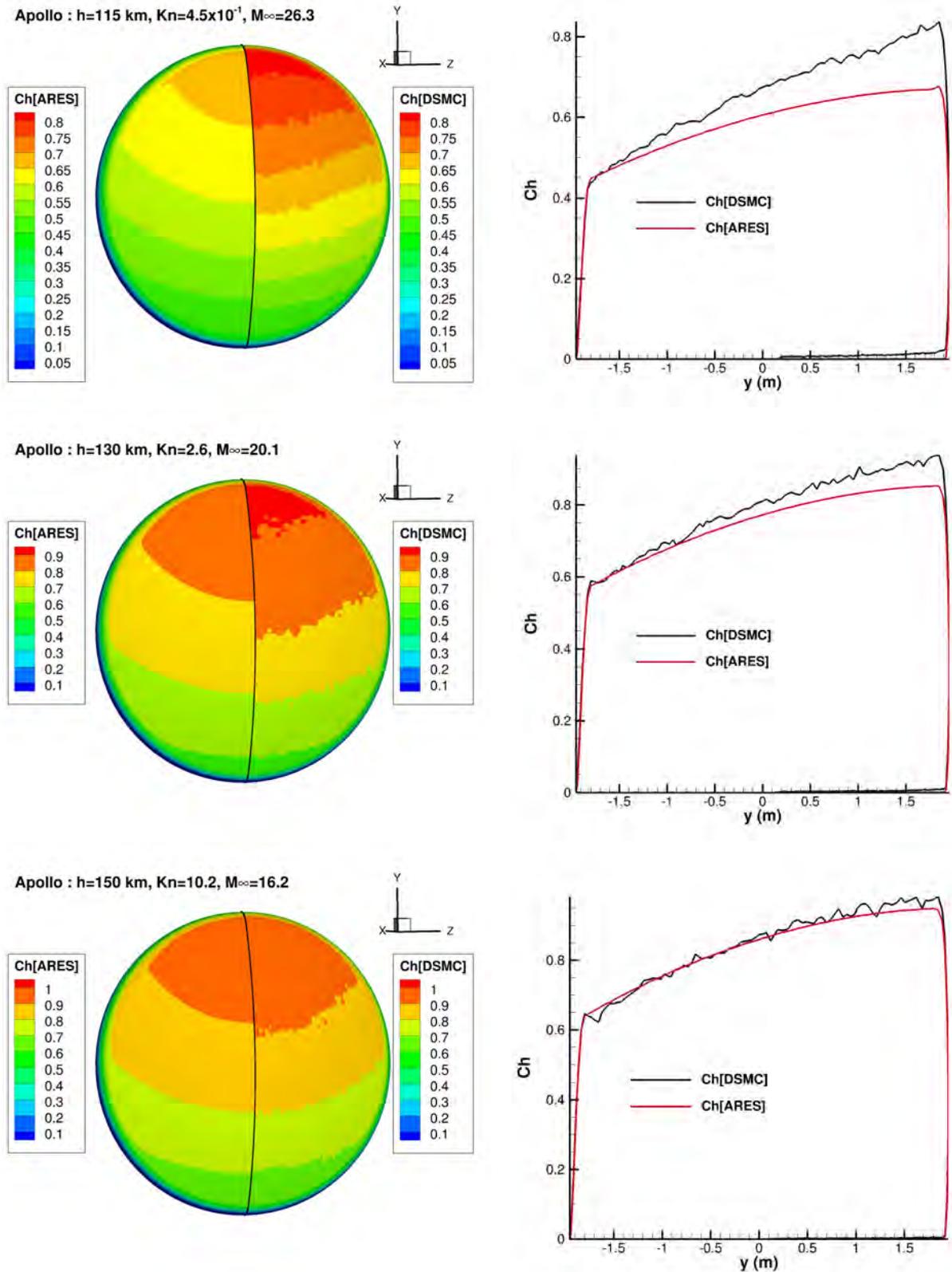


FIGURE 7.4 – Comparaison du coefficient  $C_h$  obtenu par DSMC et avec **ARES** pour Apollo 6 à 115 (1<sup>ère</sup> ligne), 130 km (2<sup>ème</sup> ligne) et 150 km (2<sup>ème</sup> ligne).

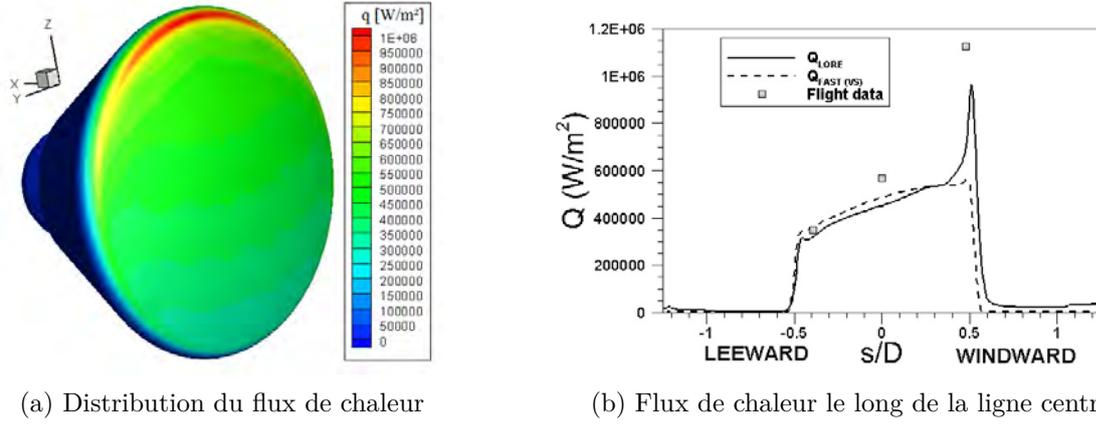


FIGURE 7.5 – Comparaison du flux de chaleur obtenu par CFD (LORE) et avec **ARES** pour l'ARD à 66 km (extrait de [28]).

### 3 Méthodes avancées pour le calcul des grandeurs pariétales

La section précédente a montré qu'en dépit de l'efficacité des méthodes les plus utilisées dans les codes de rentrée, ces méthodes souffrent tout de même d'un certain nombre de limitations. Dans cette section, on s'intéresse aux méthodes dites *avancées* dont l'objectif est d'élargir le spectre d'application des méthodes traditionnelles.

#### 3.1 Méthodes géométriques

On désigne ici par méthodes géométriques les corrélations développées par Jain [216, 217] et Brykina [218]. Leur principe est de représenter les effets 3D sur les distributions de surface, à partir de caractéristiques géométriques de l'objet plutôt qu'à partir de considération sur l'écoulement autour de l'objet [216]. La formule de Jain repose sur les équations suivantes :

$$C_p = C_{p0} + C_{p1} \sin(\alpha) + C_{p2} \sin^2(\alpha), \quad (7.62)$$

$$C_f = C_{f0} \cos(\alpha) + C_{f1} \sin(\alpha) \cos(\alpha), \quad (7.63)$$

$$C_h = C_{h0} + C_{h1} \sin(\theta). \quad (7.64)$$

Les coefficients  $(C_{pi})_{i=0,1,2}$  et  $(C_{fi}, C_{hi})_{i=0,1}$  sont dépendants du Mach ( $M_\infty$ ), du Reynolds au point d'arrêt ( $Re_0$ ), du coefficient adiabatique ( $\gamma$ ), du ratio de température de paroi sur température au point d'arrêt ( $T_w/T_0$ ) et du nombre de Prandtl ( $Pr$ ). La particularité de cette méthode repose sur la définition du Reynolds au point d'arrêt :

$$Re_0 = L \times Re_{01}, \quad (7.65)$$

où  $Re_{01}$  est le Reynolds unitaire au point d'arrêt :

$$Re_{01} = \frac{\rho_\infty U_\infty}{\mu(T_{e0})}, \quad (7.66)$$

$$T_{e0} = T_\infty \left( 1 + \frac{\gamma - 1}{\gamma} M_\infty^2 \right).$$

La longueur courante  $L$  est définie par :

$$L = \frac{\tilde{H}(x, y, z)}{H(x, y, z)} \times \frac{\lambda}{\tilde{H}(0, 0, 0)}, \quad (7.67)$$

$$\lambda = 1 + \frac{4}{15} \frac{f_{xx}f_x^2 + 2f_{xy}f_x f_y + f_{yy}f_y^2}{(1 + f_x^2 + f_y^2)H(x, y, z)}.$$

La fonction  $f$  décrit la surface de l'objet ( $z = f((x, y))$ ) et les variables ( $f_i, f_{ij}$ ) en sont les dérivées partielles par rapport aux indices  $i$  et  $j$ . Pour finir, les fonctions  $H(x, y, z)$  et  $\tilde{H}(x, y, z)$  désignent respectivement la courbure locale et la courbure locale de la géométrie axisymétrique équivalente au point  $(x, y, z)$ ; le point  $(x, y, z) = (0, 0, 0)$  désignant le point d'arrêt. Comme indiqué par les auteurs, cette formulation a été construite à partir de solutions numériques et analytiques des équations Viscous Shock Layer (VSL) [216]. Par comparaison de cette méthode avec des calculs DSMC, les auteurs mettent en avant sa capacité à reproduire le coefficient de transfert de chaleur pour un sphère-cône de  $5^\circ$  à des altitudes comprises entre 70 et 100 km. En effet, l'utilisation de la longueur courante  $L$  donnée par l'équation (7.67) permet de reproduire correctement l'allure décroissante du flux de chaleur le long de la section conique qui, en raison de son inclinaison constante, est généralement mal capturée par les méthodes classiques. Au point d'arrêt de la navette spatiale entre 92 et 150 km, les auteurs montrent que les calculs DSMC, la méthode de Fay-Riddell [208] et la formulation du flux de chaleur donnée par l'équation (7.64) s'accordent à 10% près jusqu'à 104.49 km. Au-dessus, la formulation continue de Fay-Riddell surestime le flux de chaleur tandis que la nouvelle formulation suit la tendance des résultats DSMC. Pour l'AFE à 76 et 80 km et à diverses incidences, les résultats confirment la précision de la méthode. Comme le soulignent les auteurs, cette méthode reste toutefois limitée à l'étude de géométries émoussées sur les parties au vent (avant séparation de l'écoulement).

Les travaux de Brykina portent sur une méthode géométrique similaire spécifiquement conçue pour les écoulements raréfiés. Cette fois, les équations sont obtenues à partir des équations Thin Viscous Shock Layer (TVSL) pour des faibles Reynolds. Pour des raisons de concision, les formules analytiques des coefficients  $C_p$ ,  $C_f$  et  $C_h$  et les équations TVSL données dans [218] ne sont pas écrites ici. Comme pour la méthode de Jain, elles dépendent de la fonction géométrique  $z = f(x, y)$  et de ses dérivées partielles. L'évaluation de la méthode par comparaison à des résultats DSMC et à d'autres méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann met en évidence les points suivants :

- La méthode se limite à la simulation des parties au vent d'une géométrie émoussée.
- La validité de la méthode dépend du degré de raréfaction et de la distance au point d'arrêt. Plus  $Kn$  est élevé, plus la distance au point d'arrêt pour laquelle la méthode reste valide est grande.
- Les formules convergent asymptotiquement vers la solution moléculaire libre sous condition de paroi totalement diffuse.

Jusqu'ici, la littérature ne fait pas mention de l'utilisation d'une de ces deux méthodes dans un code de rentrée quelconque. Cela peut s'expliquer par la difficulté d'accès aux documents donnant les détails des fonctions géométriques de la formule de Jain ou par les avantages limités offerts par la méthode de Brykina. Enfin, la nécessité de pouvoir décrire la géométrie considérée avec une fonction simple ( $z = f(x, y)$ ) et dérivable peut aussi constituer une limitation importante.

### 3.2 Méthodes de Falchi

Dans le cadre de sa thèse, Alessandro Falchi a travaillé sur le développement de nouvelles méthodes de calcul rapide pour mettre à jour le code **FOSTRAD/STRATH-A** [189]. L'essentiel de son travail se divise en trois développements majeurs. Le premier vise à améliorer la précision du code pour la prédiction du coefficient de traînée en régime moléculaire libre pour des géométries de type parallélépipède et cylindre [219]. Pour cela, une étude de sensibilité (sans effet d'altitude) au ratio d'aire  $A_{\text{ratio}}$  entre l'aire frontale et l'aire totale, à l'incidence  $\alpha$  et au dérapage  $\beta$  est réalisée pour construire un métamodèle  $C_F$  du coefficient de correction :

$$C_F = \frac{C_{D,\text{DSMC}}}{C_{D,\text{FOSTRAD}}}. \quad (7.68)$$

$C_{D,\text{DSMC}}$  est le coefficient de traînée obtenu avec un calcul DSMC et  $C_{D,\text{FOSTRAD}}$  celui obtenu avec les méthodes par panneaux de **FOSTRAD**. Ce facteur de correction permet donc de passer d'un niveau de précision bas à élevé. L'évaluation de la méthode par application au satellite GOCE (sur

la partie cylindrique) et au cubesat 3U montre une importante réduction de l'erreur par rapport aux méthodes traditionnelles. D'après Falchi, cette amélioration du niveau de précision en régime moléculaire libre doit permettre d'accroître la précision du modèle en régime transitionnel grâce aux fonctions de raccord du code **FOSTRAD**.

Dans la continuité du premier, le deuxième développement améliore la précision du calcul du flux de chaleur intégré sur la surface ( $\tilde{C}_h$ ) d'un cube caractérisé par un facteur d'échelle et d'un cylindre caractérisé par son ratio  $L/R$  [220]. Cette fois, le facteur de correction  $C_F$  est défini par la relation :

$$C_F = \frac{\tilde{C}_{h,\text{HF}}}{C_{h,\text{LF}}}, \quad (7.69)$$

qui fait le lien entre le coefficient basse précision basé sur un calcul DSMC basse fidélité et le coefficient haute précision basé sur un calcul DSMC haute fidélité. A partir d'une étude de sensibilité aux paramètres  $Kn$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $T_w$ ,  $U_\infty$  et au paramètre géométrique caractéristique de l'objet, un métamodèle  $\mathbb{C}_F$  du facteur de correction est construit pour chaque forme. D'après Falchi, pour les deux géométries considérées, ce modèle réduit offre une meilleure estimation du flux de chaleur moyen dans le régime transitionnel et le facteur de correction permet de diviser le temps de calcul par 27 en utilisant un calcul basse fidélité plutôt qu'un calcul haute fidélité. On notera tout de même que pour des Knudsen faibles ( $Kn \simeq 0.05$ ), un calcul DSMC basse fidélité nécessite l'utilisation de ressources de Calcul Haute Performance (HPC) ce qui est problématique pour l'usage visé.

Le troisième développement porte sur l'amélioration du calcul de distribution du flux de chaleur en régime continu. Bien que la formulation ne soit pas présentée en détails, les informations disponibles dans [219] laissent entendre qu'elle dépend du rayon de courbure locale et, grâce à un algorithme de lissage, permet la simulation du flux de chaleur pour des géométries présentant des surfaces planes comme un cube, un cylindre ou l'IXV entre autres [189, 219]. Pour assurer la cohérence entre ce nouveau modèle en régime continu et la formulation du régime moléculaire libre qui ne dépend pas du rayon de courbure locale, une nouvelle fonction de raccord est également introduite. Le nombre de Stanton local  $St$  est calculé à partir d'une interpolation 1D par morceau selon la relation :

$$St_{\text{trans}} = St_{\text{cont}} + \mathbb{B}(R_n, Kn)(St_{\text{fm}} - St_{\text{cont}}), \quad (7.70)$$

où  $St_{\text{trans}}$  est le Stanton local au point du régime transitionnel correspondant au Knudsen  $Kn$  et  $\mathbb{B}$  est la fonction de raccord locale. L'évaluation de cette méthode sur plusieurs cas tests incluant un cas de couplage avec un code d'ablation 1D a montré qu'elle était capable de fournir des résultats fiables rapidement et sans recourir à des ressources HPC.

Dans sa version originale, le code **FOSTRAD/STRATH-A** offrait déjà un bon niveau de précision pour des véhicules émoussés mais son application à des géométries en coin (parallélépipède, cylindre, cube) se traduisait inévitablement par une plus faible précision. Comme en témoigne l'application récente de **STRATH-A** à l'étude d'un lanceur VEGA à haute altitude [221], son spectre d'application est désormais vaste et les modifications présentées ici permettent de pallier nombre de ses limitations. Ces développements restent néanmoins propres à des conditions de vol et à des géométries particulières.

### 3.3 Méthodes basées sur l'apprentissage statistique

Dans ce paragraphe, on désigne par *méthodes d'apprentissage statistique*, l'ensemble des techniques mathématiques permettant de réduire la complexité d'un problème à ses caractéristiques principales apprises, pour passer d'un moyen de résolution coûteux en temps de calcul, à un modèle réduit au temps de réponse largement plus faible. En pratique, on distingue trois catégories de modèles réduits :

- (i) Les méthodes par projection dont le principe est de projeter l'ensemble des données dans un sous-espace vectoriel de dimension réduite. Une méthode célèbre de projection est la Proper Orthogonal Decomposition (POD), communément utilisée pour calculer des distributions.

- (ii) Les méthodes d'approximation aussi appelées *métamodèles* (en anglais *surrogate models*) qui à un jeu d'entrées font correspondre une ou plusieurs sorties. Parmi ces méthodes on peut citer le Krigeage (KG), la Méthode de Surface de Réponse (RSM) ou les Fonctions de Base Radiale (RBF), généralement utilisées pour calculer des valeurs intégrées.
- (iii) Les méthodes hybrides où un métamodèle est utilisé pour calculer certains paramètres du modèle de projection auquel il est associé. L'utilisation d'un modèle réduit pour interpoler les coefficients de la POD permet de capturer le comportement non-linéaire des phénomènes physiques à restituer.

Ces dernières années, l'émergence des méthodes d'apprentissage statistique et leur application aux problèmes d'ingénierie [222] a trouvé écho dans la communauté hypersonique continu mais aussi raréfié. Ces nouveaux modèles peuvent être construits de sorte à être intégrés dans les codes de rentrée comme alternative aux méthodes classiques, ou comme moyen d'exploration d'espaces de design dans le cadre d'une étude d'optimisation.

Les travaux d'Ahmed et Qin [29] sont un premier exemple de l'utilisation d'un modèle réduit pour l'optimisation géométrique d'un aérodisque (Figure 7.6) pour la réduction de traînée et de l'échauffement aérodynamique en conditions hypersoniques continues. Dans leur étude, un métamodèle KG est retenu après comparaison avec un métamodèle RSM, pour calculer le coefficient de traînée et la température de paroi maximale en fonction de la distance au corps principal et du rayon de l'aérodisque. Le plan d'expérience total est constitué de 160 calculs CFD réalisés avec le code **FLUENT** selon un plan Latin Hypercube Sampling (LHS)<sup>6</sup>. Finalement, l'entraînement est effectué avec jusqu'à 117 simulations et l'évaluation du modèle est faite à partir d'un second plan LHS de 17 simulations. La distribution de température maximale dans l'espace de design estimée avec deux modèles de krigeage est représentée sur la Figure 7.7.

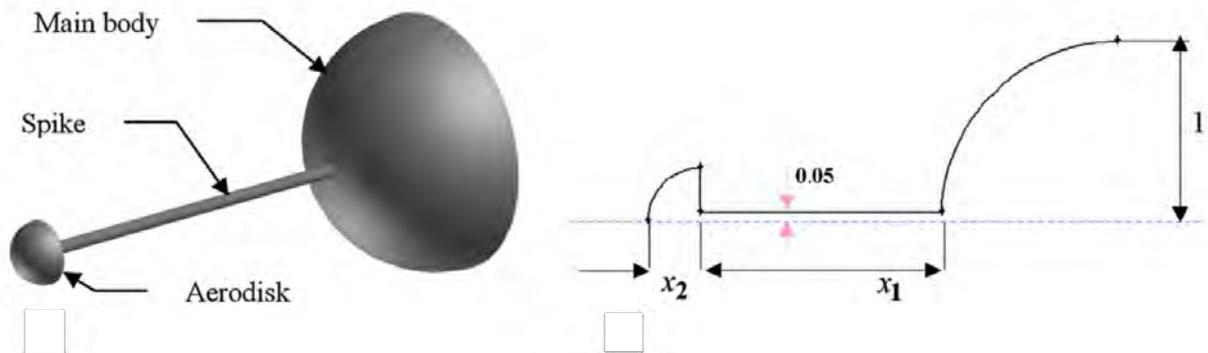


FIGURE 7.6 – Aérodisque et variables de design (extrait de [29]).

Toujours en régime continu, les travaux de Drouet *et al.* [48, 223] portent sur le développement de modèles réduits du flux de chaleur et de la pression sur les parois à l'ombre de débris spatiaux de forme cylindrique en régime hypersonique continu. Avec le code **CEDRE**, un plan d'expériences de 12 simulations (selon un plan LHS) a été construit et 4 points d'apprentissage ont été rajoutés à partir d'une méthode de Design of Experiments (DOE) adaptatif. A partir des données géométriques  $L$ ,  $D$  du cylindre et de l'incidence  $\alpha$ , le modèle hybride POD-KG permet d'améliorer considérablement la précision du calcul des distributions de pression et de flux de chaleur à l'ombre, là où les méthodes classiques font l'hypothèse de sollicitations nulles pouvant conduire à la sous-estimation de distributions parfois non négligeables.

Un autre modèle hybride POD-RBF a été développé par Kutkan [224] pour l'optimisation géométrique de la capsule stardust en incidence nulle et à une altitude de 81 km. La capsule est considérée comme une géométrie 2D-axisymétrique définie par un ensemble de splines paramétrées

6. Cette notion sera présentée plus en détails dans le prochain chapitre.

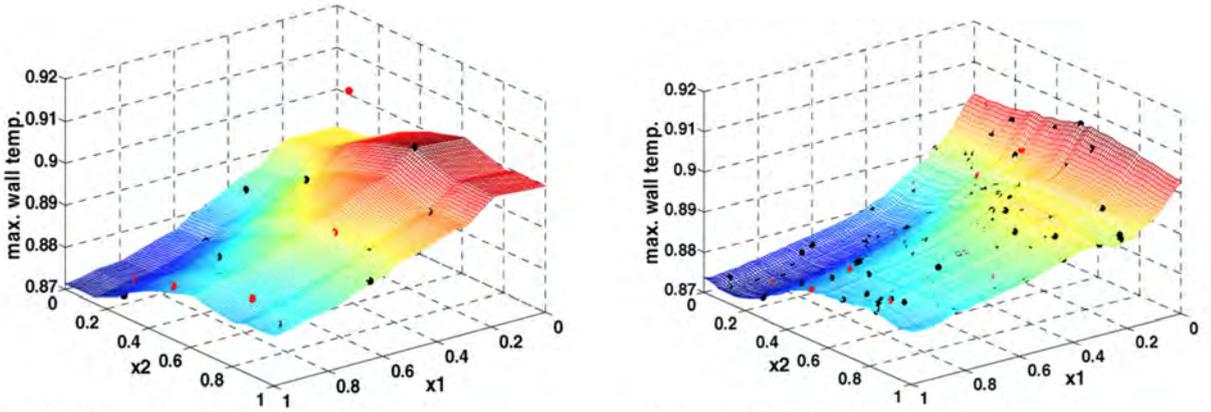


FIGURE 7.7 – Réponses des modèles de krigeage entraînés à partir de 17 (gauche) et 117 (droite) points (extrait de [29]).

par 15 points de contrôle. L'espace des paramètres constitué des coordonnées des 15 points de contrôle est exploré arbitrairement avec 90 calculs DSMC (code **DS2V**). Le modèle réduit ainsi construit permet de déterminer des configurations géométriques optimales au sens du flux de chaleur (minimise le flux maximal et le flux intégré), de la pression (maximise la traînée), du volume (maximise le volume) sous contraintes. Ainsi, lorsqu'une géométrie optimale permettant de minimiser le flux de chaleur total est recherchée, les autres objectifs sont considérés comme des contraintes dont les valeurs de référence relatives à la géométrie réelle constituent des valeurs à ne pas dépasser.

Un modèle réduit du coefficient de traînée pour une géométrie cylindrique arbitraire a été construit par Donaldson [225]. Ce modèle est basé sur un métamodèle de Régression par Processus Gaussien (GPR)<sup>7</sup> entraîné à partir de 30000 simulations basse fidélité réalisées avec le code de rentrée **RAC** basé sur des méthodes par panneaux. A partir du nombre de Mach, de Knudsen, de l'angle d'incidence et du ratio  $L/D$ , le modèle réduit permet de calculer le coefficient de traînée d'un cylindre quelconque en tout point du régime transitionnel. Bien que ce modèle réduit soit construit à partir d'un modèle à réponse rapide, il permet tout de même de réduire le temps de calcul d'un ordre de grandeur tout en gardant le niveau de précision des méthodes par panneaux.

Dans [226], Walsh *et al.* s'intéressent à l'optimisation géométrique d'un concept de microsatellite Very Low Earth Orbit (VLEO) à une altitude de 200 km. A partir de 4 paramètres géométriques (Figure 7.8), le modèle réduit de type RBF estime le coefficient de traînée correspondant et une fonction multi-objectifs est définie pour minimiser  $C_D$  tout en maximisant le volume du satellite. Au total, 2635 points d'apprentissage sont choisis à partir d'un DOE adaptatif composé de calculs DSMC réalisés avec le code **SPARTA**. Parmi eux, 500 calculs sélectionnés au hasard sont utilisés pour l'évaluation du modèle, le reste est utilisé pour l'entraînement. Pour les longueurs caractéristiques ( $L_{ref} \in [0.5; 1.5]$  m) et l'altitude considérées, les nombres de Knudsen varient entre 92 et 278. Dans ces conditions, le régime est supposé totalement moléculaire libre pour toutes les configurations. Compte tenu de la précision des méthodes par panneaux en régime moléculaire libre, le modèle RBF entraîné à partir de calculs rapides a également été construit. La comparaison des deux modèles réduits ainsi générés a mis en évidence une différence relative de l'ordre de 6% seulement pour le cas des configurations pointues. Des exemples de résultats obtenus avec de tels modèles RBF sont représentés sur la Figure 7.9.

Sia et Mehta ont, quant à eux, développé 2 types de modèles réduits pour la modélisation rapide de la rentrée de formes caractéristiques de débris [30]. Le premier modèle est un métamodèle type KG pour le calcul du coefficient de traînée d'une sphère, d'un cube et d'un cylindre (en incidence nulle ou en incidence de  $90^\circ$ ). Pour la sphère et le cube, les résultats des modèles de krigeage sont représentés sur la Figure 7.10. Le deuxième type de métamodèle est un réseau de neurones pour le calcul de la distribution du flux de chaleur sur les mêmes géométries. Pour chacune d'entre elles,

7. Autre nom donné au krigeage.

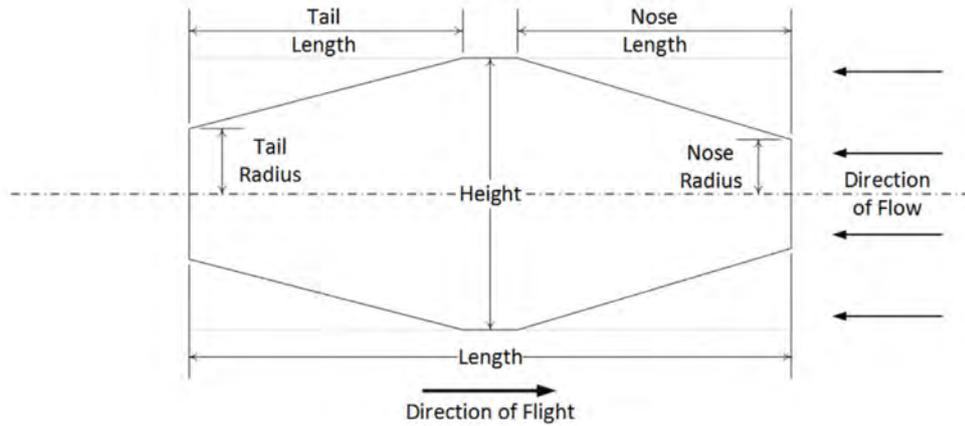


FIGURE 7.8 – Micro-satellite et ses quatre variables de design. La hauteur et la longueur sont contraintes (extrait de [29]).

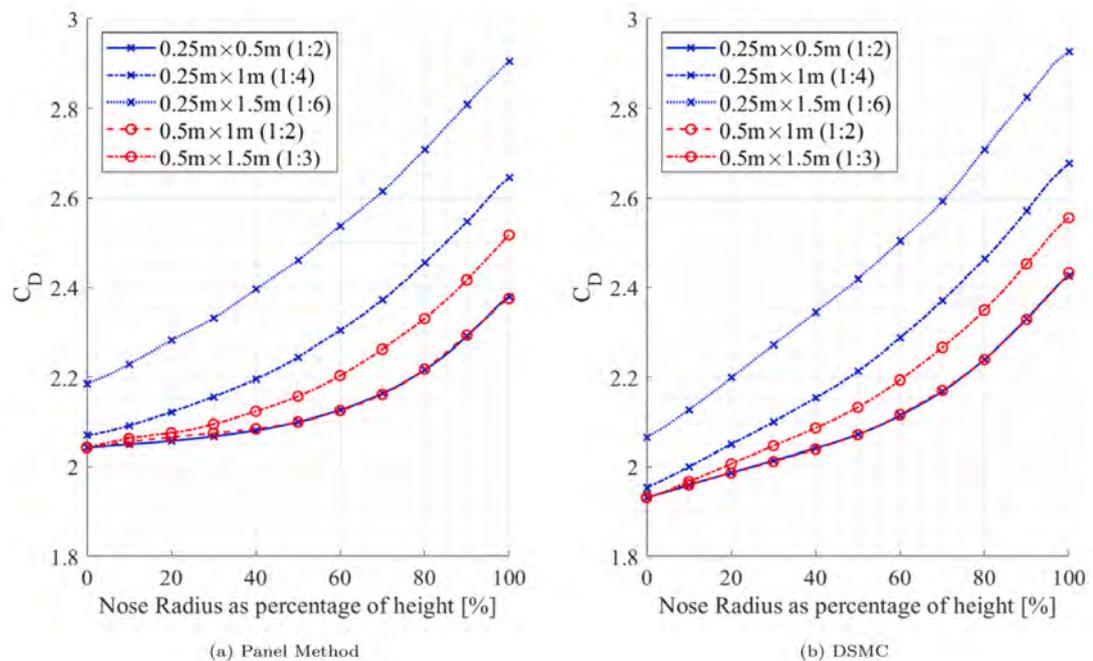


FIGURE 7.9 – Coefficient de traînée en fonction du *nose radius* pour différents ratio *height/length*. Les résultats sont obtenus avec des modèles RBF entraînés avec des méthodes par panneaux (gauche) et des calculs DSMC (droite) (extrait de [29]).

100 calculs DSMC réalisés avec le code **SPARTA** sont utilisés pour l'entraînement et 25 calculs supplémentaires sont utilisés pour l'évaluation. Un plan LHS est donc construit pour explorer l'espace défini par les variables  $Kn \in [0.01; 1]$ ,  $T_\infty \in [200; 2000]$  K et  $U_\infty \in [2; 4]$  km/s. Pour le cas du cube, la comparaison des résultats DSMC et des prédictions par réseaux de neurones pour deux configurations de vol est représentée sur la Figure 7.11. Cet article montre la puissance des méthodes d'apprentissages pour le calcul de grandeurs globales, locales et pour des géométries aussi bien convexes que concaves. L'inconvénient de cette procédure est qu'elle nécessite un modèle local et un modèle global par géométrie ce qui requiert un nombre de calculs important pour l'entraînement. De plus, pour chaque réseau de neurones, le même maillage doit être utilisé pour tous les calculs puisqu'il correspond au nombre de sorties du réseau (*i.e.* au nombre de neurones sur la dernière couche).

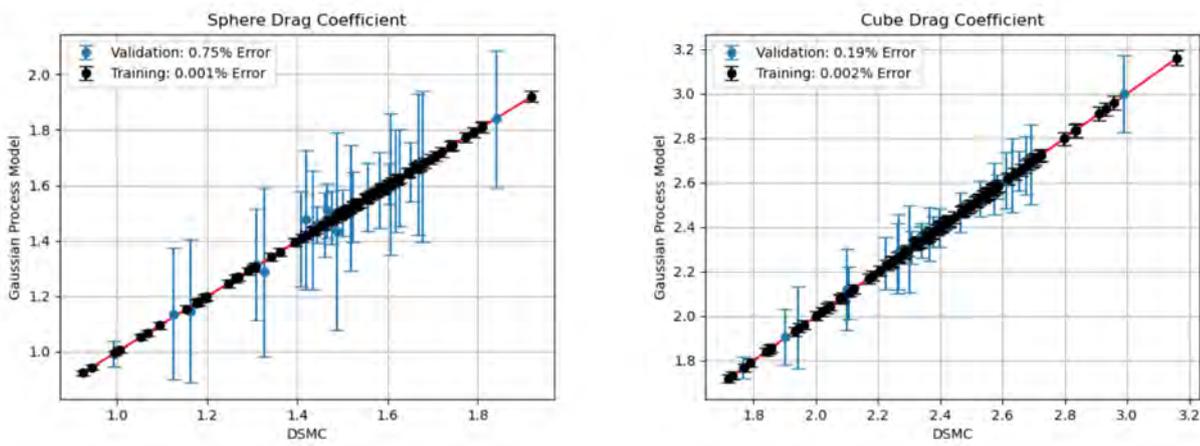


FIGURE 7.10 – Coefficients de traînée prédits par krigeage pour le cas d’une sphère (gauche) et d’un cube (droite) (extrait de [30]).

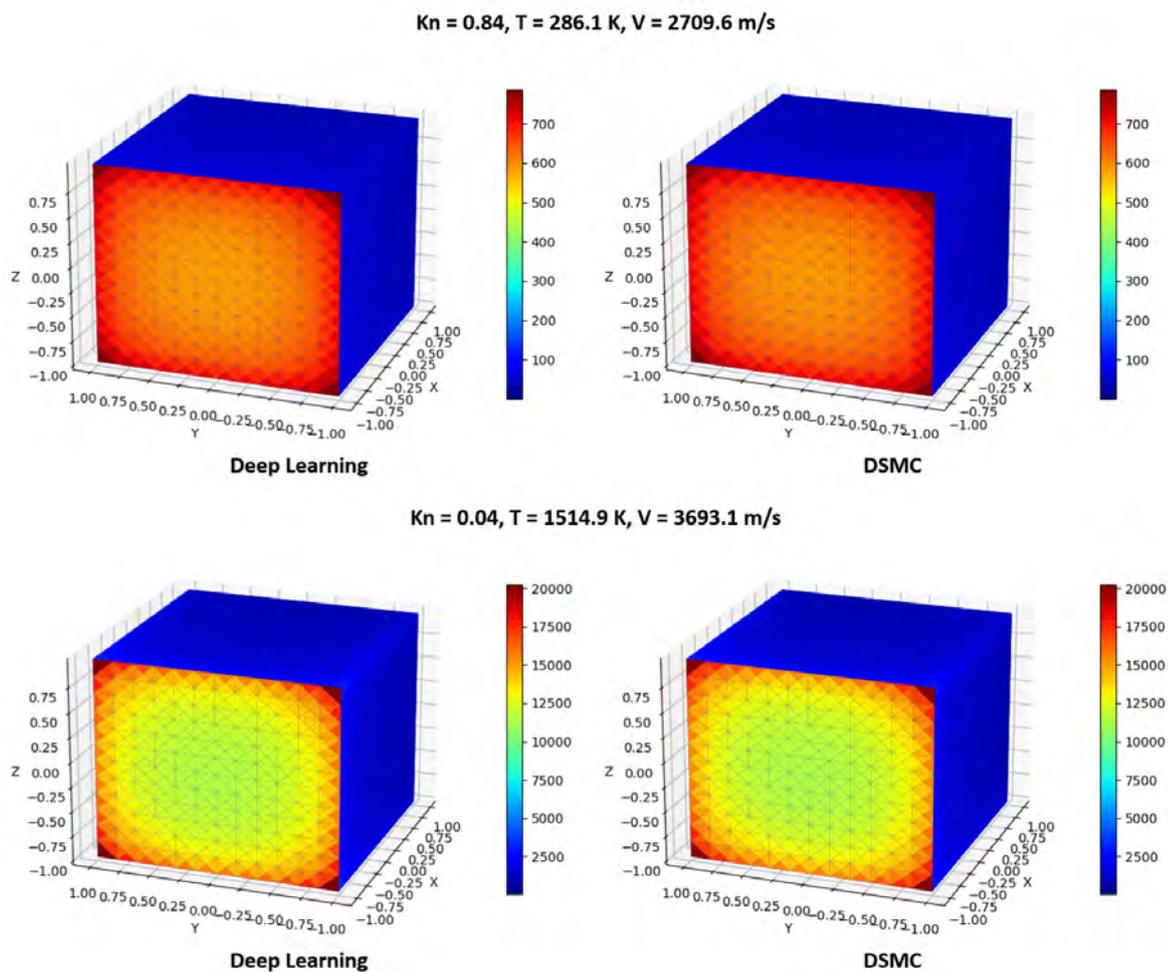


FIGURE 7.11 – Comparaison des distributions du flux de chaleur prédites par réseau de neurones (gauche) et calculées par DSMC (droite) pour deux configurations de vol (extrait de [30]).

Les méthodes d'apprentissage statistique apparaissent donc comme une alternative privilégiée pour améliorer la précision des codes de rentrée et pour répondre au besoin de traiter des géométries non-convexes. Le prix du niveau de précision de tels modèles est toutefois lié à la richesse de la base de données utilisée pour l'entraînement. De plus, les méthodes présentées ici, bien que très performantes, n'offrent pas la même robustesse que les méthodes traditionnelles par panneaux.

## 4 Résumé

Ce chapitre a permis d'introduire les notions fondamentales liées aux codes de rentrée. A cette occasion, un aperçu détaillé des éléments constitutifs des codes de rentrée orientés véhicule a été donné. Ainsi, nombre de méthodes par panneaux ont été décrites pour les régimes transitionnel, continu et moléculaire libre.

En dépit de leur simplicité et de leur robustesse, les méthodes par panneaux souffrent tout de même de nombreuses limitations et tout particulièrement dans le régime transitionnel auquel on s'intéresse ici. En effet, comme illustré sur quatre points de vol de la rentrée OREX et Apollo 6, lorsque les formulations pour les distributions du régime continu commettent des erreurs importantes, ces erreurs sont propagées par les fonctions de raccord sur une grande partie du régime transitionnel. De plus, les capacités de généralisation et la précision des fonctions de raccord dépendent grandement du nombre de Knudsen qui dépend lui même fortement du choix de la longueur de référence, des modèles pour le calcul du libre parcours moyen et des Knudsen limites. Dans le but de pallier certaines limitations soulignées dans la première partie du chapitre, plusieurs méthodes avancées ont donc été développées. Ainsi, l'incapacité de reproduire les variations de distribution pour des sections géométriques d'inclinaison constante a motivé le développement de formulations géométriques plus complexes. De même, l'incapacité des méthodes classiques à simuler des distributions sur des géométries non-convexes a conduit au développement de modèles avancés par Falchi. Cependant, les faiblesses propres aux fonctions de raccord n'ont pas été directement adressées. Les méthodes d'apprentissage évoquées dans la dernière partie du chapitre semblent être l'outil au potentiel le plus large. Dans le chapitre suivant, nous nous intéressons donc au développement de modèles réduits de ce type.



# Chapitre 8

## Développement de modèles réduits pour les distributions pariétales de pression, de frottement et de flux de chaleur en régime hypersonique raréfié

### Sommaire

<b>1</b>	<b>Méthodes d'apprentissage statistique pour le calcul rapide de grandeurs pariétales</b>	<b>209</b>
1.1	Entraînement du modèle : base de données et plan d'expériences	210
1.2	Le krigeage	212
1.3	Les réseaux de neurones	217
<b>2</b>	<b>Développement de modèles réduits pour les grandeurs d'arrêt</b>	<b>226</b>
2.1	Choix des variables de design	226
2.2	Construction de la base de données 2D-axisymétrique	227
2.3	Résultats	231
<b>3</b>	<b>Développement de modèles réduits pour les distributions</b>	<b>238</b>
3.1	Choix des variables de design	238
3.2	Construction d'une base de données 3D	242
3.3	Résultats	246
<b>4</b>	<b>Résumé</b>	<b>250</b>

**Introduction :** Compte tenu des limitations propres aux modèles actuels et plus particulièrement aux fonctions de raccord, de nouveaux modèles réduits basés sur des méthodes d'apprentissage ont été développés dans le cadre de cette thèse. Dans la première partie du chapitre, les différentes méthodes d'apprentissage utilisées ainsi que les outils permettant la construction de bases de données (plans d'expérience) sont présentés. Ensuite, les différentes étapes ayant conduit au développement de modèles de krigeage pour les coefficients de pression  $C_{p,stag}$  et de flux de chaleur  $C_{h,stag}$  au point d'arrêt sont décrites. Cette description comprend le choix des variables d'entrée, de l'élaboration de la base de données et va jusqu'à l'évaluation des modèles par comparaison aux résultats DSMC **SPARTA**. Dans la troisième partie du chapitre, la construction de réseaux de neurones pour le calcul des distributions des coefficients de pression  $C_p$ , de flux de chaleur  $C_h$  et de frottement  $C_f$  est abordée. A cette occasion, le choix des variables de design par analyse de calculs préliminaires puis la construction des bases de données sont discutés. L'évaluation de ces modèles par comparaison aux résultats numériques (**SPARTA**) et aux résultats obtenus avec les modèles existants (**ARES**) sert finalement à conclure et à ouvrir plusieurs perspectives d'amélioration complémentaires.

### 1 Méthodes d'apprentissage statistique pour le calcul rapide de grandeurs pariétales

Le Machine Learning (ML) désigne l'ensemble des méthodes d'apprentissage automatique capables d'identifier une structure statistique dans des observations pour prédire ensuite la réponse

en de nouveaux points. L'objectif dans ce chapitre est de proposer de nouvelles formulations tirant à la fois profit de la précision des méthodes de ML et de la flexibilité des méthodes classiques. Pour cela, le choix a été fait d'utiliser deux méthodes d'apprentissage distinctes :

- (i) le **krigeage** pour l'estimation des coefficients de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt ;
- (ii) les **réseaux de neurones profonds** pour le calcul des distributions des coefficients de pression, de frottement et du flux de chaleur.

Cette section vise donc à introduire la notion de *plan d'expériences* aussi appelé Design of Experiments (DOE), puis à présenter les deux modèles d'apprentissage retenus.

### 1.1 Entraînement du modèle : base de données et plan d'expériences

Un des enseignements de l'état de l'art sur les méthodes d'apprentissage est que la précision d'un modèle réduit dépend fortement de la richesse et de la complétude (au sens de l'espace de design) de la base de données. Lors de la construction d'un métamodèle, une des premières étapes consiste donc à choisir la technique d'élaboration du plan d'expériences et le nombre de points d'apprentissage. Si l'on revient aux travaux de Sia et Mehta [30], pour chaque géométrie, 100 simulations DSMC ont été utilisées pour entraîner un modèle réduit pour l'estimation du coefficient de traînée et un modèle réduit pour le calcul de la distribution du flux de chaleur. En pratique, le nombre de points d'apprentissage nécessaires dépend du nombre de paramètres d'entrée du modèle réduit visé et de la méthode d'apprentissage. Ensuite, selon l'application, plusieurs méthodes d'échantillonnage existent pour la génération du plan d'expériences.

Comme expliqué par Simpson dans sa revue des méthodes d'échantillonnage [222], le plan d'expériences le plus élémentaire est le *plan factoriel*  $2^k$  où  $k$  représente le nombre de paramètres du plan. En considérant le modèle réduit de Sia [30] qui à un jeu d'entrées  $\mathbf{x}$  associe le coefficient de traînée  $C_D$ , alors chaque expérience est définie par un tirage des variables  $(Kn, T_\infty, U_\infty)$  dans leurs intervalles de variation respectifs où pour rappel,  $Kn \in [0.01; 1]$ ,  $T_\infty \in \times[200; 2000]$  K et  $U_\infty \in \times[2; 4]$  km/s. Le plan d'expériences factoriel  $2^k$  est donc simplement constitué des 8 expériences obtenues à partir de toutes les combinaisons possibles des extrema des intervalles :

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)} &= (0.01, 200, 2), \\ \mathbf{x}^{(2)} &= (1, 200, 2), \\ &\vdots \\ \mathbf{x}^{(8)} &= (1, 2000, 4). \end{aligned}$$

Si ce type de plan se génère très facilement à partir de l'algorithme de Yates, il présente toutefois plusieurs inconvénients majeurs. Tout d'abord, le nombre d'expériences croît de façon exponentielle avec le nombre de paramètres. Ensuite, la pertinence du plan est fortement liée à la simplicité du modèle étudié, ici en l'occurrence, la pertinence du plan dépendrait de la complexité de la dépendance de  $C_D$  aux paramètres  $Kn$ ,  $T_\infty$  et  $U_\infty$ . En effet, en considérant seulement 2 valeurs par paramètre, seuls des effets linéaires sont adéquatement représentés dans le plan. Un plan  $3^k$  serait capable de capturer des effets quadratiques mais augmenterait significativement le nombre d'expériences requises. Pour ces raisons, les plans factoriels se limitent généralement à des études pilotes de l'espace de design et à l'évaluation des effets principaux des paramètres [222, 227]. En négligeant les interactions d'ordre élevé, on obtient un *plan factoriel fractionnaire*  $2^{k-p}$  qui permet de réduire considérablement la taille du plan d'expériences et d'étudier des systèmes complexes où  $k \gg 1$ . En terme de précision, ces plans présentent néanmoins les mêmes limitations que les plans factoriels complets.

D'un point de vue statistique, plusieurs caractéristiques permettent d'évaluer la qualité d'un plan d'expériences [32]. On dit d'un plan qu'il est *space-filling* lorsque la répartition des points permet une exploration optimale de l'espace de design. Le caractère *stratified* ou *robuste en sous-projection* signifie que la répartition des points est optimale lorsque l'on considère la projection des points du plan sur un sous-espace de dimension réduite. Les *hypercubes latins* forment une catégorie

de plans d'expériences vérifiant la propriété de stratification. Ils se construisent de la manière suivante. Supposons que l'on souhaite élaborer un plan d'expériences de  $k$  dimensions constitué de  $n$  points, alors un hypercube de dimension  $k$  est construit en découpant chaque dimension en  $n$  intervalles puis en plaçant les points dans  $n$  cases à travers l'hypercube de sorte à ce que l'on puisse extraire chaque point selon n'importe quel axe sans traverser de case occupée. Un exemple d'hypercube latin  $(n, k) = (5, 2)$  optimal est représenté sur la Figure 8.1. On remarque que par construction, la robustesse en sous-projection est vérifiée puisque la projection des points suivant les intervalles  $(x_i)_{i=1,2}$  est uniforme. En revanche, rien ne garantit a priori le caractère *space-filling*. En effet, en considérant l'hypercube latin diagonal (Figure 8.2), la robustesse en sous-projection est toujours vraie mais le remplissage surfacique n'est pas optimal. Un Latin Hypercube Sampling (LHS) consiste donc à déterminer une configuration d'hypercube latin optimale selon différents critères mathématiques de remplissage [32].

L'avantage majeur d'un tel plan est qu'il se construit sous la contrainte du nombre d'expériences souhaité ce qui est particulièrement avantageux lorsque le nombre d'expériences (ou de simulations) réalisable est limité. Néanmoins, le caractère optimal au sens du remplissage n'implique pas que le nombre de points d'échantillonnage choisi suffise à l'exploration complète du plan. Dans ce cas, il faut procéder à l'enrichissement du plan d'expériences (*i.e.* ajouter des points a posteriori). L'inconvénient principal du LHS est que la structure optimale n'est pas toujours conservable lorsque l'on souhaite ajouter de nouveaux points d'apprentissage. Toutefois, le plan peut être complété à l'aide d'une technique de DOE adaptatif comme on le verra dans la section 2.2.

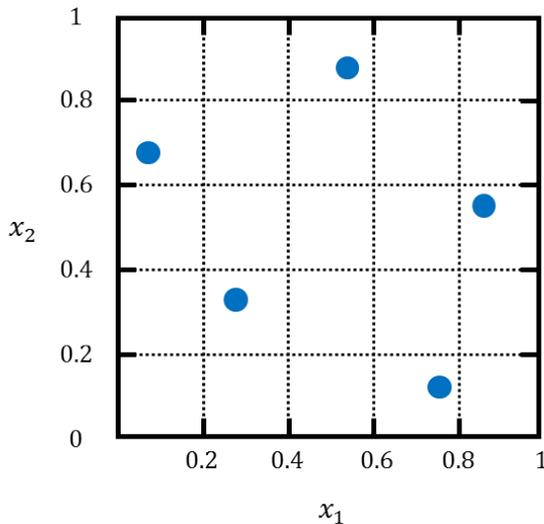


FIGURE 8.1 – Exemple d'hypercube latin optimal.

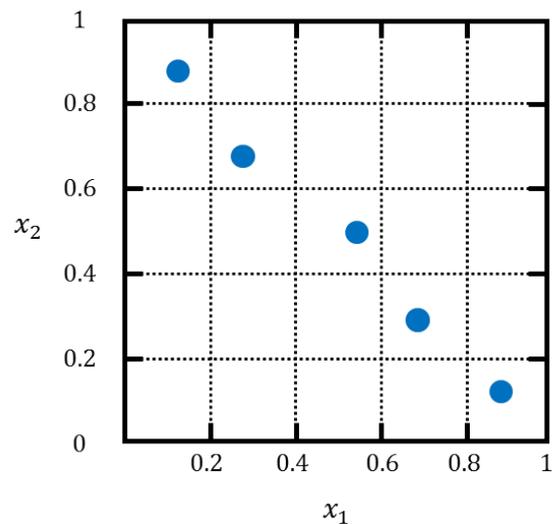


FIGURE 8.2 – Exemple d'hypercube latin diagonal.

Lors d'une étude ML, la première étape consiste à préparer les données. Dans notre contexte, on suppose qu'on dispose d'une base de données constituée d'entrées  $\mathbf{x}$  et d'observations (ou sorties)  $y$ . Les entrées sont généralement organisées sous la forme d'une matrice de taille  $n \times d$  où  $n$  est le nombre de points de la base de données, et  $d$  est le nombre de variables de design. Les sorties peuvent être scalaires (krigeage), auquel cas  $y$  est un vecteur de taille  $n$ , ou multiples (réseaux de neurones), auquel cas  $y$  est une matrice de taille  $n \times K$  avec  $K$  le nombre de sorties. Cette base de données peut se construire avec un code de calcul (ou de façon expérimentale) dont les  $n$  simulations (ou expériences) sont réalisées selon le plan d'expériences choisi. Le métamodèle envisagé doit alors être capable de fournir une réponse approchée  $\hat{y}$  de la réponse exacte  $y$ . Pour cela, la base de données est répartie en une base de données d'entraînement (*i.e.* training set  $[\mathbf{x}_{\text{train}}, y_{\text{train}}]$ ) et une base de données d'évaluation (*i.e.* test set  $[\mathbf{x}_{\text{test}}, y_{\text{test}}]$ ) de sorte que la base complète vérifie :

$$[\mathbf{x}, y] = [\mathbf{x}_{\text{train}}, y_{\text{train}}] \cup [\mathbf{x}_{\text{test}}, y_{\text{test}}]. \quad (8.1)$$

Pour achever la préparation des données, il est important d'ajuster l'échelle des données par *normalisation*<sup>1</sup> ou par *standardisation*<sup>2</sup>. Comme on le verra dans la section suivante, le krigeage est une méthode basée sur une notion de distance. L'étape de mise à l'échelle permet d'éviter les biais en donnant initialement le même poids à chaque variable de design indépendamment de leur valeur d'origine. Pour les réseaux de neurones (voir section 1.3), cette étape permet notamment d'homogénéiser la progression du gradient lors de l'ajustement des paramètres.

Une fois les données préparées, le métamodèle peut alors être entraîné avec la base d'entraînement et sa capacité de généralisation est évaluée sur la base de test. Comme on le verra plus tard, pour les réseaux de neurones, la validation peut parfois se faire de façon plus sophistiquée et une répartition du dataset en trois jeux de données peut permettre d'éviter les biais induits par une division training-test.

## 1.2 Le krigeage

Le krigeage est une méthode de prédiction bayésienne développée dans les années 50 par l'ingénieur minier Danie Krige puis formalisée par le mathématicien Georges Matheron. Le terme krigeage est généralement mis en relation avec la communauté géostatistique tandis que dans la communauté ML, on le rencontre sous le nom de Régression par Processus Gaussien (GPR). Cette polyonymie en apparence anecdotique est en réalité centrale lorsque l'on expose les principes sous-jacents de la méthode. Pour une description statistique, mathématiquement rigoureuse et exhaustive, des processus gaussiens, le lecteur peut se référer à l'ouvrage de Rasmussen et Williams [228]. Ici, on adopte une démarche plus succincte inspirée des références [29, 223, 32] et des supports de formation de Nathalie Bartoli<sup>3</sup>.

### 1.2.1 Krigeage sans bruit

Considérons un plan d'expériences constitué de  $n$  points d'apprentissage. Alors l'ensemble des variables d'apprentissage (en anglais *sample points*) s'écrit  $\mathbf{x} = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)})^t$  où chaque  $\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^d$ . Les observations ou réponses associées à  $\mathbf{x}$  sont données par  $y = (y(\mathbf{x}^{(1)}), y(\mathbf{x}^{(2)}), \dots, y(\mathbf{x}^{(n)}))^t \in \mathbb{R}^n$  avec  $y(\mathbf{x}^{(i)}) \in \mathbb{R}$ . Le krigeage consiste à approcher la grandeur modélisée  $y(\mathbf{x})$  par un processus stochastique conditionné par l'ensemble des observations. Pour construire cette approximation, on introduit d'abord l'*a priori* aussi appelé processus non conditionné d'expression [223] :

$$Y(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) + Z(\mathbf{x}), \tag{8.2}$$

où  $\mu(\mathbf{x})$  est la partie déterministe représentative de l'allure générale du processus qui peut être supposée comme une constante connue (krigeage simple), une constante  $\beta_0$  à déterminer (krigeage ordinaire) ou encore une fonction polynomiale (krigeage universel) d'expression :

$$\mu(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{m-1} \beta_j f_j(\mathbf{x}). \tag{8.3}$$

Les  $f_j$  sont les  $m$  fonctions de base choisies au préalable par l'utilisateur avec  $f_0 = 1$  et les  $(\beta_j)_{j=0..m-1}$  sont des coefficients à déterminer. Le terme  $Z(\mathbf{x})$  de l'équation (8.2), est un processus gaussien de moyenne nulle et de variance  $\sigma^2$  vérifiant la relation :

$$\text{Cov}(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = \sigma^2 r(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}). \tag{8.4}$$

1. Normaliser des données consiste à les ramener à un intervalle  $[0, 1]$  en appliquant à chaque composante la transformation  $\bar{x} = (x - x_{\min}) / (x_{\max} - x_{\min})$  où  $x_{\min}$  et  $x_{\max}$  désignent respectivement les valeurs minimale et maximale des données d'entraînement.

2. Standardiser des données revient à les centrer-réduire, c'est-à-dire à appliquer à chaque composante la transformation  $\bar{x} = (x - \mu) / \sigma$  où  $\mu$  et  $\sigma$  désignent respectivement la moyenne et l'écart-type des données d'entraînement.

3. Formation Kriging - EGO dispensée à l'ONERA en juin 2020.

La fonction de corrélation  $r$ , aussi appelée noyau de corrélation, est une mesure de similarité dépendante d'une certaine distance spatiale. Elle définit la matrice de corrélation  $\mathbf{R}$  dont les coefficients ont la forme générale suivante :

$$r(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = \exp\left(-\sum_{l=1}^d \theta_l |x_l^{(i)} - x_l^{(j)}|^p\right), \quad (8.5)$$

où  $d$  est le nombre de paramètres d'entrée. Les poids  $\theta_l$  s'interprètent comme l'activité des paramètres de design, c'est-à-dire la vitesse à laquelle la corrélation décroît avec la distance dans les différentes dimensions de l'espace de design. Le paramètre  $p$  est, quant à lui, représentatif de la différentiabilité ou du caractère lisse de la corrélation. En théorie, il peut être optimisé et prendre n'importe quelle valeur réelle entre 0 et 2 mais il est souvent fixé au préalable comme un entier égal à 1 (fonction de corrélation exponentielle) ou 2 (fonction de corrélation gaussienne) [29]. Sur la Figure 8.3 sont représentées plusieurs trajectoires<sup>4</sup> 1D obtenues pour différents jeux de paramètres. La partie grisée représente l'intervalle de confiance de 95% correspondant à  $\pm 2\sigma$  autour de la moyenne  $\mu(x)$ .

En pratique, les hyperparamètres  $\sigma^2$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  et  $\theta$ , peuvent être déterminés, entre autres, par validation croisée [228] ou par maximisation de la vraisemblance [32]. On présente ici la deuxième solution dans le cas du krigeage universel. On définit la vraisemblance  $\mathcal{L}(\theta, \boldsymbol{\beta}, \sigma; y)$  comme la probabilité  $P(y|\theta, \boldsymbol{\beta}, \sigma)$  d'obtenir les observations  $y$  en connaissant les paramètres  $(\theta, \boldsymbol{\beta}, \sigma)$ . Dans le cas des processus gaussiens, cette vraisemblance a pour expression [32, 228] :

$$\mathcal{L}(\theta, \boldsymbol{\beta}, \sigma; y) = \frac{1}{(2\pi \sigma^2)^{n/2} |\mathbf{R}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{(y - F\boldsymbol{\beta})^t \mathbf{R}^{-1} (y - F\boldsymbol{\beta})}{2\sigma^2}\right), \quad (8.6)$$

où  $\mathbf{R}$  est la matrice  $n \times n$  de corrélation telle que  $\mathbf{R}_{i,j} = r(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)})$  et  $F$  est la matrice des fonctions de base  $n \times m$  telle que  $F_{i,j} = f_{i-1}(\mathbf{x}^{(j)})$ . L'idée est alors de déterminer les paramètres  $(\theta, \boldsymbol{\beta}, \sigma)$  en maximisant la vraisemblance. En prenant le logarithme de l'équation (8.6), on obtient l'expression suivante :

$$\ln(\mathcal{L}) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{R}|) - \frac{(y - F\boldsymbol{\beta})^t \mathbf{R}^{-1} (y - F\boldsymbol{\beta})}{2\sigma^2}. \quad (8.7)$$

En calculant et en annulant les dérivées  $\partial_{\boldsymbol{\beta}} \mathcal{L}$ ,  $\partial_{\sigma} \mathcal{L}$ , on obtient l'expression des Maximum Likelihood Estimates (MLE)  $\hat{\sigma}$  et  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  par les équations :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(F^t \mathbf{R}^{-1} F\right)^{-1} F^t \mathbf{R}^{-1} y, \quad (8.8)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \left(y - F\hat{\boldsymbol{\beta}}\right)^t \mathbf{R}^{-1} \left(y - F\hat{\boldsymbol{\beta}}\right). \quad (8.9)$$

Pour le krigeage simple,  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  est simplement remplacé par la constante connue  $\mu$  et la matrice  $F$  par le vecteur  $\mathbf{1}$  de taille  $n \times 1$  et dont tous les coefficients valent 1. De même, pour le krigeage ordinaire, il suffit de remplacer  $F$  par le vecteur  $\mathbf{1}$  et  $F\hat{\boldsymbol{\beta}}$  par le vecteur  $\mathbf{1}\hat{\beta}_0$  où  $\hat{\beta}_0$  est un MLE de la constante inconnue. Finalement, en introduisant les équations (8.8) et (8.9) dans (8.7) et en écartant la partie constante, on obtient la vraisemblance concentrée :

$$\ln(\mathcal{L}) \simeq -\frac{n}{2} \ln(\hat{\sigma}^2) - \frac{1}{2} \ln(|\mathbf{R}|), \quad (8.10)$$

4. Pour tracer une réalisation (ou trajectoire) d'un processus gaussien sur  $[0; 1]$ , il faut d'abord discrétiser l'intervalle en  $n_x$  points puis échantillonner à partir de la distribution normale multivariée de moyenne  $\mu(x)$  et de covariance  $\sigma^2 \mathbf{R}$  calculée aux  $n_x$  points. La trajectoire est alors donnée pour tout  $x$  dans  $[0; 1]$  par  $Y(x) = L\bar{X} + \mu(x)$  où  $L$  est la matrice obtenue à partir d'une décomposition de Cholesky de la matrice de covariance (*i.e.* telle que  $L L^t = \sigma^2 \mathbf{R}$ ) et  $\bar{X}$  est un vecteur de  $n_x$  variables indépendantes normalement distribuées (*i.e.*  $\bar{X} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ ).

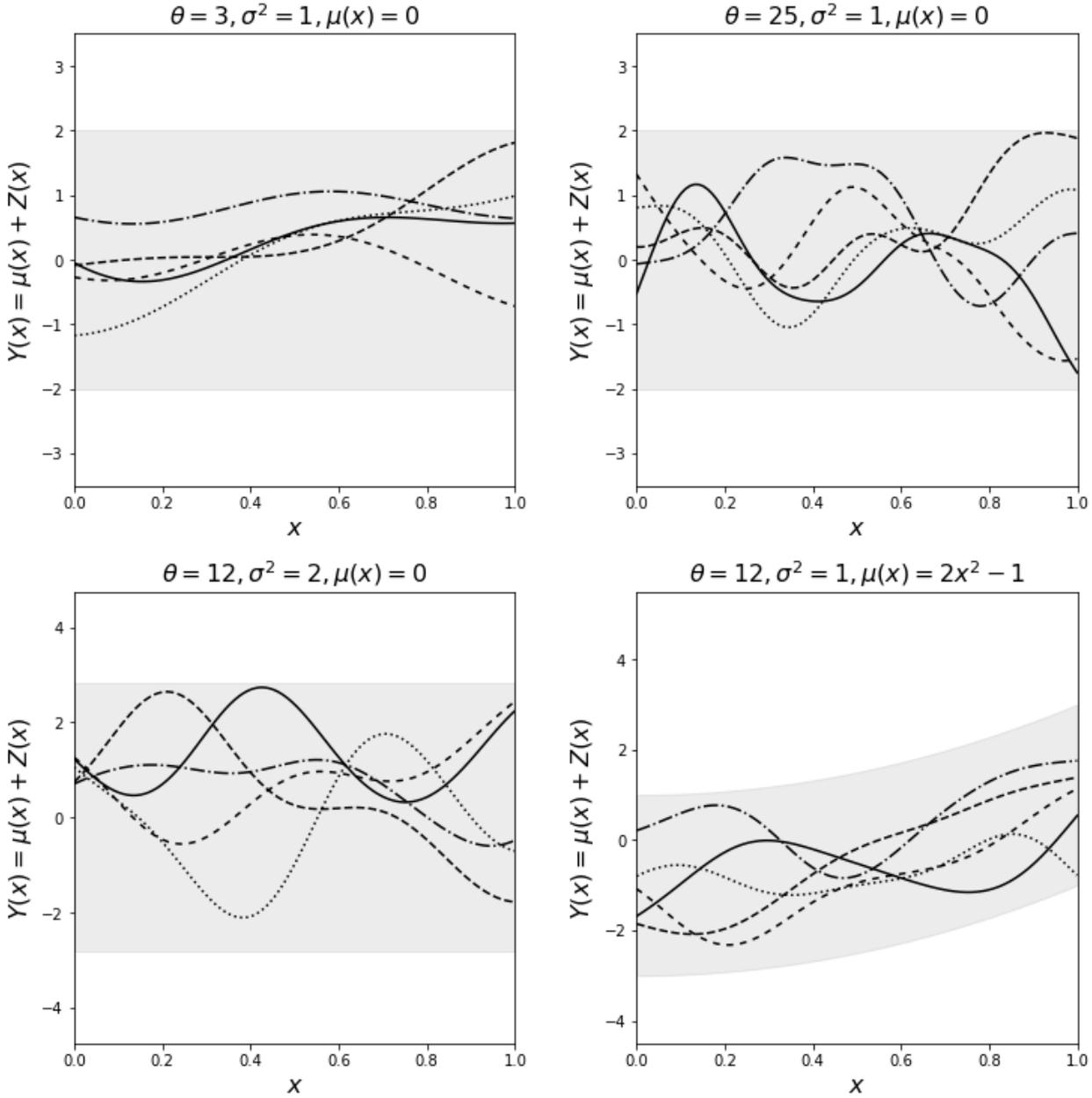


FIGURE 8.3 – Réalisations de processus gaussiens non conditionnés obtenues avec un noyau gaussien (*i.e.*  $p=2$ ) et différents paramètres  $\mu$ ,  $\theta$  et  $\sigma^2$  (inspiré de [31]).

dont l'expression ne dépend plus que du paramètre  $\theta$ . Les  $\hat{\theta}_l$  permettant de maximiser la vraisemblance concentrée s'obtiennent donc par résolution d'un problème d'optimisation non-linéaire.

Lorsque l'ensemble des paramètres est défini, la dernière étape consiste à déterminer l'expression analytique du prédicteur permettant d'approcher la réponse  $y$  en un nouveau point  $\mathbf{x}^*$ . Pour cela, on considère le processus conditionné  $\hat{Y}(\mathbf{x}^*) \sim [Y(\mathbf{x})|Y(\mathbf{x}) = y(\mathbf{x}^{(i)}), i = 1..n]$  qui est aussi un processus gaussien (*i.e.*  $\hat{Y}(\mathbf{x}^*) \sim \mathcal{N}(\mu_Y(\mathbf{x}^*), \sigma_Y^2(\mathbf{x}^*))$ ) dont il faut calculer la moyenne  $\mu_Y$  et la variance  $\sigma_Y^2$ . L'approche de Sacks consiste à chercher le Best Linear Unbiased Predictor (BLUP) en considérant un problème de minimisation basé sur les multiplicateurs de Lagrange pour la contrainte sans biais [31, 229]. Une autre approche consiste à maximiser la vraisemblance des données augmentées par le vecteur de corrélation  $r(\mathbf{x}^*)$  entre les variables observées et la nouvelle prédiction [32] :

$$r(\mathbf{x}^*)_i = r(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{(i)}), \quad i = 1..n. \quad (8.11)$$

Indépendamment de l'approche suivie, on obtient finalement les équations suivantes :

- Pour le krigeage universel :

$$\mu_Y(\mathbf{x}^*) = f(\mathbf{x}^*)^t \boldsymbol{\beta} + r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} (y - F\boldsymbol{\beta}), \quad (8.12)$$

$$\begin{aligned} \sigma_Y^2(\mathbf{x}^*) = & \sigma^2 [ 1 - r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} r(\mathbf{x}^*) \\ & + (f(\mathbf{x}^*)^t - r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} F) (F^t \mathbf{R}^{-1} F)^{-1} (f(\mathbf{x}^*)^t - r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} F)^t ]. \end{aligned} \quad (8.13)$$

- Pour le krigeage ordinaire, la deuxième ligne de la variance est négligeable et ces équations s'écrivent :

$$\mu_Y(\mathbf{x}^*) = \beta_0 + r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} (y - \mathbf{1}\beta_0), \quad (8.14)$$

$$\sigma_Y^2(\mathbf{x}^*) = \sigma^2 (1 - r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} r(\mathbf{x}^*)). \quad (8.15)$$

- Enfin, pour le krigeage simple :

$$\mu_Y(\mathbf{x}^*) = \mu + r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} (y - \mathbf{1}\mu), \quad (8.16)$$

$$\sigma_Y^2(\mathbf{x}^*) = \sigma^2 (1 - r(\mathbf{x}^*)^t \mathbf{R}^{-1} r(\mathbf{x}^*)). \quad (8.17)$$

On note que les modifications  $(F\boldsymbol{\beta}, f(\mathbf{x}^*)^t \boldsymbol{\beta}) \rightarrow (\mathbf{1}\beta_0, \beta_0)$  et  $(\mathbf{1}\beta_0, \beta_0) \rightarrow (\mathbf{1}\mu, \mu)$  permettent de passer respectivement d'un krigeage universel à ordinaire et d'un krigeage ordinaire à simple.

Ainsi, le modèle de krigeage utilisé pour prédire la réponse  $y$  correspond à la moyenne  $\mu_Y$  et la variance du krigeage donnée par  $\sigma_Y^2$  représente l'erreur moyenne du modèle [31]. La Figure 8.4 représente un exemple de krigeage ordinaire non-optimal (*i.e.* conditionné par les observations mais dont les paramètres n'ont pas été estimés par MLE) et plusieurs réalisations du processus gaussien conditionné par 6 observations. La Figure 8.5 montre quant à elle la comparaison entre le même krigeage ordinaire non-optimal et le krigeage ordinaire optimal dont la moyenne  $\hat{\mu}_Y$  et la variance  $\hat{\sigma}_Y^2$  sont calculées à partir des paramètres  $\theta \equiv \hat{\theta}$ ,  $\sigma \equiv \hat{\sigma}$  et  $\beta_0 \equiv \hat{\beta}_0$  obtenus par MLE.

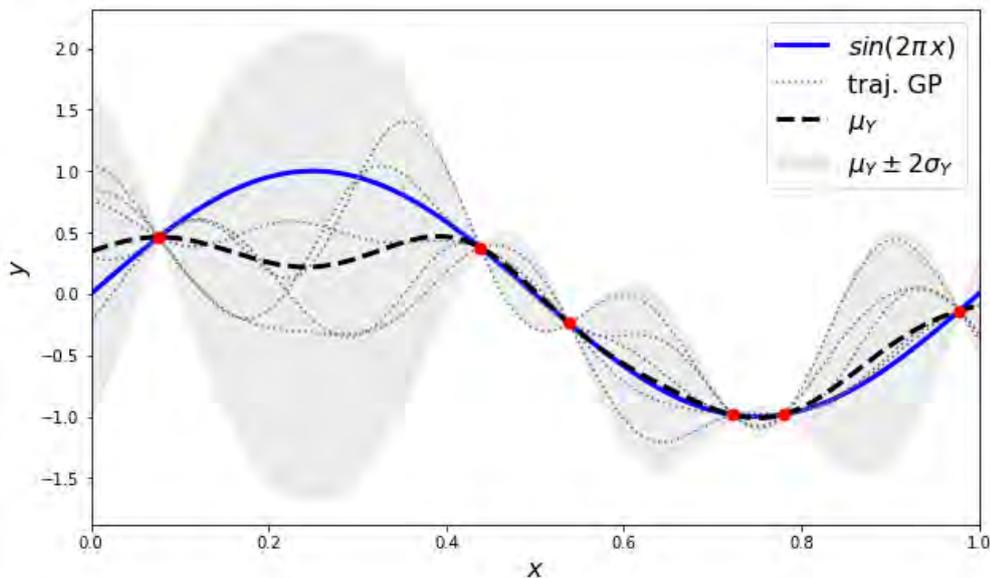


FIGURE 8.4 – Krigeage non-optimal et réalisations de processus gaussiens conditionnés obtenus avec un noyau gaussien (*i.e.*  $p=2$ ) et les paramètres  $\beta_0 = 0$ ,  $\theta = 50$  et  $\sigma^2 = 1$ . Les observations (points rouges) sont obtenues à partir de la solution de référence  $y = \sin(2\pi x)$ .

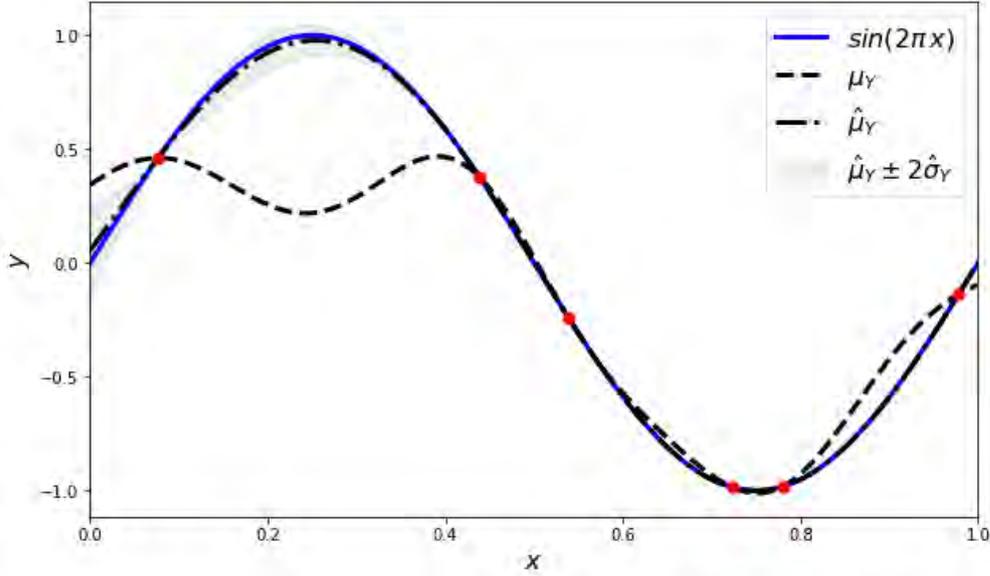


FIGURE 8.5 – Comparaison d'un modèle de krigeage ordinaire optimal ( $\hat{\beta}_0$ ,  $\hat{\theta}$  et  $\hat{\sigma}^2$ ) et de krigeage ordinaire non-optimal ( $\beta_0 = 0$ ,  $\theta = 50$  et  $\sigma^2 = 1$ ). Les observations (points rouges) sont obtenues à partir de la solution de référence  $y = \sin(2\pi x)$ .

A ce stade, on peut noter plusieurs aspects importants de la méthode. En n'importe quel point d'échantillonnage,  $r(\mathbf{x}^{(i)}) = \mathbf{R}_{:,i}$  et  $r(\mathbf{x}^{(i)})^t \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} = y(\mathbf{x}^{(i)})$ . On a donc  $\mu_Y(\mathbf{x}^{(i)}) = y(\mathbf{x}^{(i)})$  et  $\sigma_Y^2 = 0$  ce qui signifie que le krigeage est interpolant. Pour les points éloignés des points d'apprentissage,  $r(\mathbf{x}^*) \rightarrow 0$ , il n'y a donc plus de corrélation et la méthode se réduit à une méthode de régression élémentaire. Enfin, le krigeage fournit une estimation de l'incertitude en tout point grâce à la connaissance de la variance  $\sigma_Y^2$  qui peut être utilisée pour réduire l'incertitude du modèle. En effet, sans connaître la réponse  $y(\mathbf{x}^*)$  associée à un nouveau point  $\mathbf{x}^*$ , l'effet d'ajouter ce point aux observations sur la variance peut quand même être évalué. Cette propriété permet alors d'élaborer une stratégie d'enrichissement du plan d'expériences. Toutefois, il convient de noter que l'hypothèse gaussienne à la base de la méthode ne peut être vérifiée et il se peut que l'erreur du modèle soit mal représentée par la variance du krigeage. A ce titre, elle n'est qu'indicative et l'erreur réelle n'est estimée que lors de la validation.

### 1.2.2 Krigeage bruité

Jusqu'ici, nous sommes partis du principe que les observations n'étaient pas bruitées. En réalité, que l'on soit dans un contexte expérimental ou que l'on travaille avec des résultats de simulations stochastiques comme c'est le cas pour la DSMC, les observations peuvent être parasitées par un bruit. Une méthode de régression est alors plus pertinente qu'une méthode d'interpolation. Une façon simple d'appréhender la régression par krigeage est proposée par Forrester [32]. L'idée est d'ajouter une constante de régression  $\lambda$  sur la diagonale de la matrice de corrélation. Comme indiqué précédemment, le caractère interpolant du krigeage provient du lien entre le vecteur de corrélation et la matrice de corrélation aux points d'observation (*i.e.*  $r(\mathbf{x}^{(i)}) = \mathbf{R}_{:,i}$ ). Grâce à l'ajout de la constante  $\lambda$ , la relation d'interpolation n'est plus vraie et pour le krigeage ordinaire par exemple, les équations (8.14) et (8.15) deviennent :

$$\mu_Y(\mathbf{x}^*) = \beta_0 + r(\mathbf{x}^*)^t (\mathbf{R} + \lambda)^{-1} (\mathbf{y} - \mathbb{1}\beta_0), \quad (8.18)$$

$$\sigma_Y^2(\mathbf{x}^*) = \sigma^2 \left( 1 - r(\mathbf{x}^*)^t (\mathbf{R} + \lambda)^{-1} r(\mathbf{x}^*) \right). \quad (8.19)$$

Les autres formulations s'obtiennent avec les mêmes simplifications que pour la formulation interpolante. De même, la procédure MLE permet d'exprimer analytiquement les paramètres optimaux

$\hat{\beta}$ ,  $\hat{\sigma}$ . Les paramètres  $\hat{\theta}$ ,  $\hat{\lambda}$  s'obtiennent encore par résolution d'un problème d'optimisation. La Figure 8.6 illustre la différence entre un modèle de krigeage optimal interpolant et un modèle optimal pour la régression obtenus pour un cas 1D repris de [32]. La fine partie grisée représente l'intervalle de confiance de 95% associé à la régression par krigeage. On remarque que désormais le krigeage n'est pas interpolant et que la variance ne s'annule pas aux points d'apprentissage.

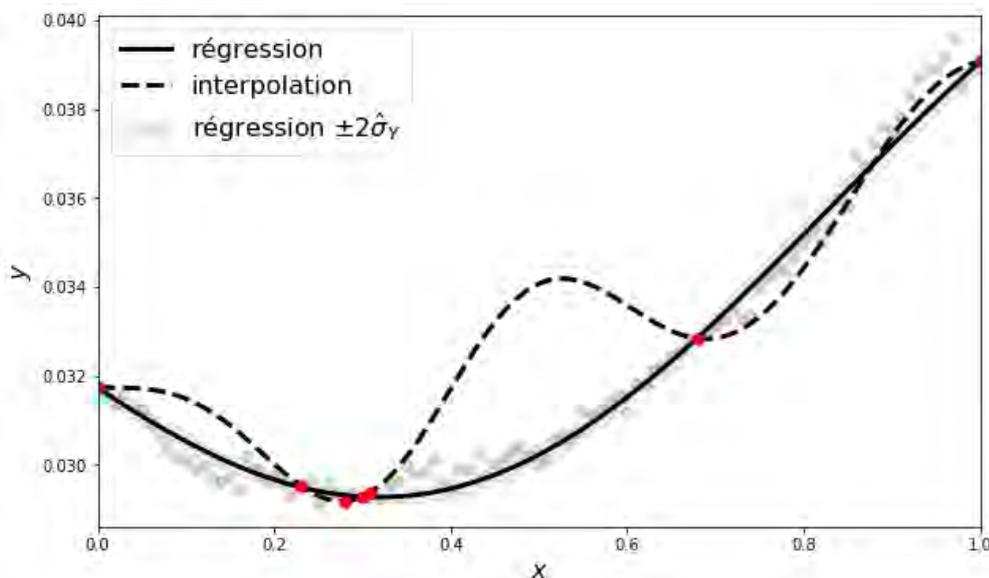


FIGURE 8.6 – Krigeage interpolant et krigeage régression optimaux pour un problème 1D issu de [32]. Les observations (points rouges) sont sélectionnées parmi les données (points gris).

La méthode de krigeage dans sa formulation pour la régression a été retenue pour estimer les coefficients de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt en fonction des conditions de vol. Pour construire les modèles de krigeage optimaux, la toolbox open-source <sup>5</sup> SMT [230] a été utilisée. Cette toolbox co-développée par plusieurs équipes de recherche de l'Université du Michigan, de la NASA, de l'ISAE-SUPAERO et de l'ONERA a également été utilisée pour calculer les modèles de krigeage optimaux des Figures 8.5 et 8.6.

### 1.3 Les réseaux de neurones

Le Deep Learning (DL) est une sous-catégorie du ML où la notion de profondeur fait référence au nombre de couches successives de représentations généralement apprises avec des réseaux de neurones. Bien que le terme réseau de neurones provienne d'une analogie biologique avec la structure du cerveau, ils ne sont pas des modèles du cerveau [33]. Une description succincte des réseaux de neurones est disponible dans la revue des métamodèles pour l'ingénierie de Simpson [222]. Néanmoins, compte tenu de l'évolution rapide des applications et des algorithmes de la méthode, une explication plus détaillée est proposée dans ce paragraphe à partir de l'ouvrage de François Chollet [33] et des supports de la formation FIDLE <sup>6</sup> dispensée en 2020 par le CNRS.

#### 1.3.1 Fondamentaux des réseaux de neurones

Le *perceptron* de Rosenblatt [231] est considéré comme le réseau de neurones le plus simple. En reprenant les notations du paragraphe précédent, la Figure 8.7 illustre le perceptron qui au vecteur d'entrées  $\mathbf{x}^{(i)} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$  renvoie la réponse prédite  $\hat{y}_i = \hat{y}(\mathbf{x}^{(i)})$  de l'observation  $y_i = y(\mathbf{x}^{(i)})$ .

5. Disponible au lien <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2019.03.005>.

6. L'intégralité des supports sont disponibles sur le dépôt <https://gricad-gitlab.univ-grenoble-alpes.fr/talks/fidle>.

Cette prédiction est donnée par l'équation :

$$\hat{y}_i = \sigma \left( \sum_{j=1}^d w_j x_j + b \right), \quad (8.20)$$

où  $\sigma(\cdot)$  est une fonction d'activation. Les poids  $(w_j)_{j=1..d}$  et le biais  $b$  constituent les paramètres du perceptron. En prenant la fonction marche suivante comme fonction d'activation :

$$\sigma(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } t \geq 0, \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (8.21)$$

le perceptron est un classifieur linéaire binaire (*i.e.* qui trie les données selon deux catégories). En remplaçant la fonction d'activation par la fonction identité  $\sigma(t) = t$ , le perceptron devient une méthode de régression linéaire. Indépendamment de sa fonction, le perceptron peut être entraîné pour adopter un comportement optimal. L'entraînement se fait au moyen d'un algorithme d'optimisation appelé *descente de gradient*. En définissant l'erreur  $E$  (aussi appelée risque empirique) associée à une prédiction :

$$E = \frac{1}{2} (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (8.22)$$

et compte tenu de l'expression de  $\hat{y}_i$  donnée par l'équation (8.20), on peut calculer le gradient d'erreur par rapport aux paramètres du perceptron :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_j} &= -(y_i - \hat{y}_i) \sigma' \left( \sum_{j=1}^d w_j x_j + b \right) x_j, \\ \frac{\partial E}{\partial b} &= -(y_i - \hat{y}_i) \sigma' \left( \sum_{j=1}^d w_j x_j + b \right), \end{aligned} \quad (8.23)$$

où  $\sigma'(\cdot)$  désigne la dérivée de la fonction d'activation. En introduisant le taux d'apprentissage  $\lambda \in \mathbb{R}_+^*$ , l'algorithme de descente de gradient consiste à mettre à jour, après chaque prédiction  $(\mathbf{x}^{(i)} \rightarrow \hat{y}_i)$ , les paramètres du perceptron en fonction de leur influence sur l'erreur :

$$\begin{aligned} w_j &= w_j - \lambda \frac{\partial E}{\partial w_j}, \\ b &= b - \lambda \frac{\partial E}{\partial b}. \end{aligned} \quad (8.24)$$

En quelques itérations, l'algorithme converge vers l'état optimal du perceptron permettant de minimiser l'erreur pour les éléments de la base de données considérée. Lorsque les éléments sont sélectionnés au hasard sans remise, on parle de Stochastic Gradient Descent (SGD). Les notions de base de données, d'itération et de convergence seront précisées plus tard.

Même si le perceptron permet d'introduire les concepts fondamentaux des réseaux de neurones, cet outil reste élémentaire puisqu'il est composé d'un seul neurone<sup>7</sup>. Le perceptron multicouche aussi appelé réseau de neurones totalement connecté est la version supérieure du perceptron. La représentation d'un tel réseau est donnée sur la Figure 8.8. Dans cette configuration, le réseau possède  $L$  couches cachées, chacune constituée de  $(n_l)_{l=1..L}$  neurones. Les couches d'entrée et de sortie sont composées de respectivement  $d$  et  $K$  neurones, conformément au nombre de variables de design  $d$  et au nombre de composantes de la réponse à approcher pour  $K$ .

Pour les réseaux standards à propagation *feedforward* (*i.e.* directe), l'information se propage à sens unique, des entrées vers les sorties selon les équations suivantes. A chaque neurone  $k \in \llbracket 1, n_1 \rrbracket$

7. En réalité ce réseau dispose de  $d$  neurones sur la couche d'entrée et d'un neurone sur la couche de sortie mais il n'effectue qu'une seule opération de réduction et d'activation.

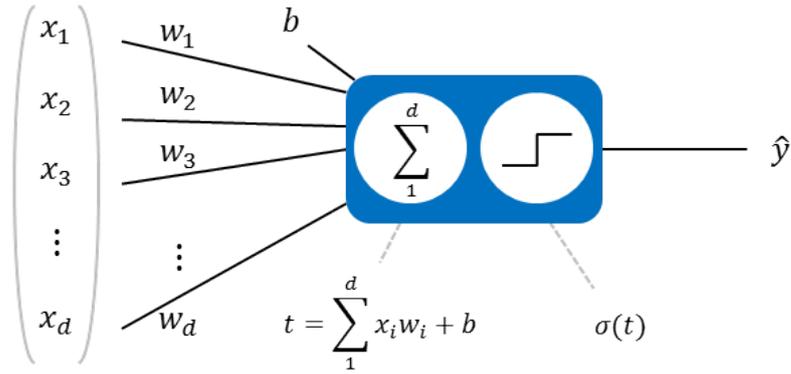


FIGURE 8.7 – Représentation graphique d'un perceptron simple (inspiré des supports FIDLE).

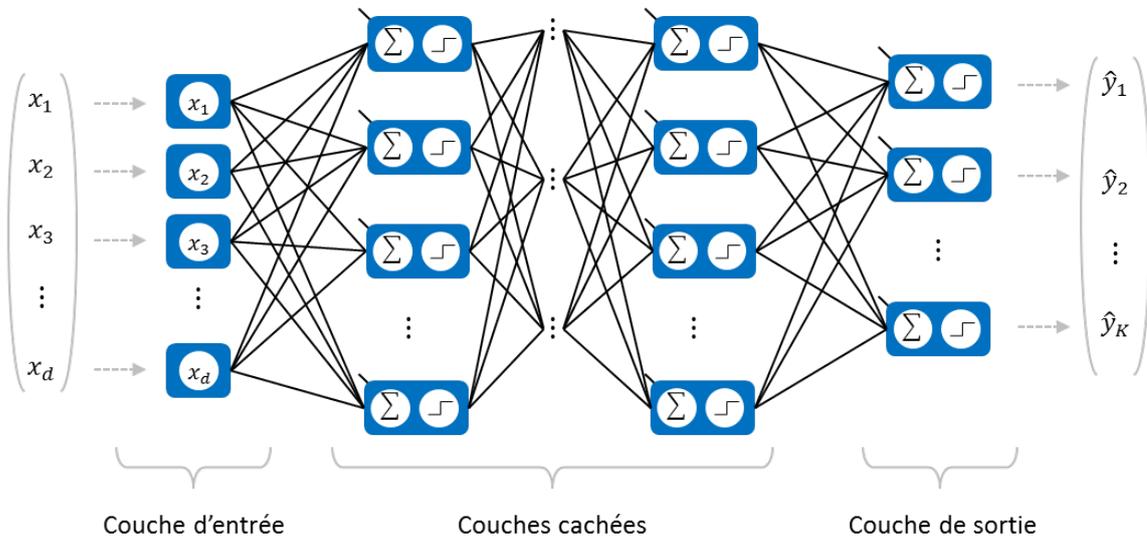


FIGURE 8.8 – Représentation graphique d'un perceptron multicouche (inspiré des supports FIDLE).

de la première couche cachée, les  $d$  variables d'entrée sont réduites puis activées :

$$z_k^{(1)} = \sum_{j=1}^d w_{k,j}^{(1)} x_j + b_k^{(1)}, \quad (8.25)$$

$$s_k^{(1)} = \sigma(z_k^{(1)}).$$

A la deuxième couche, les sorties  $(s_k^{(1)})_{k=1..n_1}$  de la couche précédente subissent les mêmes opérations, et pour chaque neurone  $k \in \llbracket 1, n_2 \rrbracket$  de la deuxième couche on a :

$$z_k^{(2)} = \sum_{j=1}^{n_1} w_{k,j}^{(2)} s_j^{(1)} + b_k^{(2)}, \quad (8.26)$$

$$s_k^{(2)} = \sigma(z_k^{(2)}).$$

Cette succession d'opérations se poursuit à travers l'ensemble des couches cachées et les sorties  $(\hat{y}_k)_{k=1..K}$  s'écrivent finalement :

$$z_k^{(L+1)} = \sum_{j=1}^{n_L} w_{k,j}^{(L+1)} s_j^{(L)} + b_k^{(L+1)}, \quad (8.27)$$

$$\hat{y}_k = s_k^{(L+1)} = \sigma(z_k^{(L+1)}).$$

On s'intéresse ici au cas général d'un réseau dont la sortie est multiple. On définit alors l'erreur  $E$  de la manière suivante :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^K (y_j - \hat{y}_j)^2. \quad (8.28)$$

Comme pour le perceptron, l'objectif est de minimiser cette erreur en ajustant les poids du réseau. Pour cela, on effectue une descente de gradient du risque empirique  $E$  en calculant pour chaque couche du réseau les dérivées  $\left( \frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(l)}}, \frac{\partial E}{\partial b_k^{(l)}} \right)_{(k,j,l) \in \llbracket 1, n_l \rrbracket \times \llbracket 1, n_{l-1} \rrbracket \times \llbracket 1, L+1 \rrbracket}$  puis en mettant à jour les paramètres selon les relations suivantes :

$$\begin{aligned} w_{k,j}^{(l)} &= w_{k,j}^{(l)} - \lambda \frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(l)}}, \\ b_k^{(l)} &= b_k^{(l)} - \lambda \frac{\partial E}{\partial b_k^{(l)}}. \end{aligned} \quad (8.29)$$

En comparaison au cas simple du perceptron, le calcul des dérivées est désormais plus complexe en raison du grand nombre de compositions effectuées au fil des couches. Pour simplifier le calcul, l'astuce consiste à utiliser la *chain rule* qui exploite une propriété élémentaire de dérivation des fonctions composées ( $\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x}$ ). L'application de cette formule à un élément de la couche de sortie s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \hat{y}_k} &= \frac{\partial}{\partial \hat{y}_k} \left( \frac{1}{2} \sum_{j=1}^K (y_j - \hat{y}_j)^2 \right) = -(y_j - \hat{y}_j), \\ \frac{\partial E}{\partial z_k^{(L+1)}} &= \frac{\partial E}{\partial \hat{y}_k} \frac{\partial \hat{y}_k}{\partial z_k^{(L+1)}} = -(y_j - \hat{y}_j) \sigma' \left( z_k^{(L+1)} \right). \end{aligned} \quad (8.30)$$

En introduisant le gradient local  $\delta_k^{(l)}$  par rapport au  $k^{\text{ième}}$  neurone de la couche  $l$  :

$$\frac{\partial E}{\partial z_k^{(l)}} = \delta_k^{(l)}, \quad (8.31)$$

on obtient alors pour les poids et biais de la couche  $L+1$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial z_k^{(L+1)}}{\partial w_{k,j}^{(L+1)}} &= \frac{\partial}{\partial w_{k,j}^{(L+1)}} \left( \sum_{i=1}^{n_L} w_{k,i}^{(L+1)} s_i^{(L)} + b_k^{(L+1)} \right) = s_j^L, \\ \frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(L+1)}} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(L+1)}} \frac{\partial z_k^{(L+1)}}{\partial w_{k,j}^{(L+1)}} = \delta_k^{(L+1)} s_j^L, \\ \frac{\partial E}{\partial b_k^{(L+1)}} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(L+1)}} \frac{\partial z_k^{(L+1)}}{\partial b_k^{(L+1)}} = \delta_k^{(L+1)}. \end{aligned} \quad (8.32)$$

En notant que pour une couche cachée  $l \in \llbracket 1, L \rrbracket$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial z_i^{(l+1)}}{\partial z_k^{(l)}} &= w_{i,k}^{(l+1)} \sigma' \left( z_k^{(l)} \right), \\ \delta_k^{(l)} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(l)}} = \sum_{i=1}^{n_{l+1}} \frac{\partial E}{\partial z_i^{(l+1)}} \frac{\partial z_i^{(l+1)}}{\partial z_k^{(l)}} = \sum_{i=1}^{n_{l+1}} \delta_i^{(l+1)} \frac{\partial z_i^{(l+1)}}{\partial z_k^{(l)}}. \end{aligned} \quad (8.33)$$

on peut ensuite généraliser ces formules à l'ensemble des  $L$  couches cachées du réseau :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial z_k^{(l)}}{\partial w_{k,j}^{(l)}} &= \frac{\partial}{\partial w_{k,j}^{(l)}} \left( \sum_{i=1}^{n_{l-1}} w_{k,i}^{(l)} s_i^{(l-1)} + b_k^{(l)} \right) = s_j^{l-1}, \\
 \frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(l)}} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(l)}} \frac{\partial z_k^{(l)}}{\partial w_{k,j}^{(l)}} = \sigma' \left( z_k^{(l)} \right) s_j^{(l-1)} \sum_{i=1}^{n_{l+1}} \delta_i^{(l+1)} w_{i,k}^{(l+1)}, \\
 \frac{\partial E}{\partial b_k^{(l)}} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(l)}} \frac{\partial z_k^{(l)}}{\partial b_k^{(l)}} = \sigma' \left( z_k^{(l)} \right) \sum_{i=1}^{n_{l+1}} \delta_i^{(l+1)} w_{i,k}^{(l+1)}.
 \end{aligned} \tag{8.34}$$

Pour la première couche cachée, ces équations deviennent :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial z_k^{(1)}}{\partial w_{k,j}^{(1)}} &= \frac{\partial}{\partial w_{k,j}^{(1)}} \left( \sum_{i=1}^d w_{k,i}^{(1)} x_i + b_k^{(1)} \right) = x_j, \\
 \frac{\partial E}{\partial w_{k,j}^{(1)}} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(1)}} \frac{\partial z_k^{(1)}}{\partial w_{k,j}^{(1)}} = \delta_k^{(1)} x_j, \\
 \frac{\partial E}{\partial b_k^{(1)}} &= \frac{\partial E}{\partial z_k^{(1)}} \frac{\partial z_k^{(1)}}{\partial b_k^{(1)}} = \delta_k^{(1)}.
 \end{aligned} \tag{8.35}$$

L'algorithme de *backpropagation* (en français rétropropagation) consiste alors simplement à calculer les dérivées successives de l'ensemble des paramètres en partant des sorties puis en remontant les couches successives du réseau.

Jusqu'ici, on a vu comment était calculée la réponse d'un réseau de neurones dense et comment en optimiser les paramètres à partir d'une descente de gradient basée sur l'algorithme de rétropropagation. La mise en équations de ces opérations qui constituent la base de cette méthode permet d'en comprendre les fondements mais soulève également bon nombre d'interrogations quant à une mise en œuvre pratique dans le contexte d'ingénierie qui nous intéresse.

### 1.3.2 Concepts avancés des réseaux de neurones

L'objectif de cette section est donc de préciser plusieurs notions évoquées brièvement plus tôt et d'introduire de nouveaux concepts en lien avec les pratiques avancées discutées dans [33] et dans la littérature.

#### Fonctions d'activation

Pour alléger la mise en équations des réseaux de neurones, le choix a été fait d'utiliser la notation  $\sigma(\cdot)$  pour désigner les fonctions d'activation indépendamment des couches auxquelles elles se rapportent. En pratique, une fonction d'activation différente peut être définie pour chaque couche. Le tableau suivant donne trois exemples de fonctions d'activation couramment rencontrées en DL avec leurs dérivées :

<b>Sigmoïde</b>	$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$	$f'(x) = f(x)(1 - f(x))$
<b>Tanh</b>	$f(x) = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)}$	$f'(x) = 1 - f(x)^2$
<b>ReLU</b>	$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \\ x & \text{sinon} \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}$

Il n'y a pas de règle stricte quant à la nature d'une fonction d'activation mais elles sont généralement dérivables et non-linéaires. La première caractéristique permet d'assurer la compatibilité avec la descente de gradient tandis que la deuxième sert à introduire une non-linéarité permettant de tirer profit de la profondeur du réseau [33]. Sur la dernière couche d'un réseau, le choix d'une fonction d'activation spécifique est généralement la conséquence directe de la fonction du réseau. Ainsi, pour faire de la régression scalaire, la fonction identité est à privilégier tandis que la fonction sigmoïde peut être utilisée pour estimer une probabilité [33]. Pour les couches cachées, le choix des fonctions d'activation reste quelque chose de très empirique et constitue une voie de recherche active en DL [232].

## Vectorisation et batch

Toujours concernant la description mathématique des réseaux de neurones, les équations de la section précédente font apparaître un aspect fondamental : leur facilité de vectorisation. En effet, la notation employée pour l'écriture des équations donne une représentation séquentielle des algorithmes mais une notation vectorielle aurait très bien pu être employée au prix de quelques conventions d'écriture. On parle alors de notation tensorielle dont l'avantage premier est de mettre en évidence que la majorité des opérations mathématiques se résume à une série de produits matriciels<sup>8</sup>.

Une autre conséquence de la vectorisation des algorithmes est qu'elle facilite le regroupement de plusieurs entrées en un vecteur d'entrées appelé *batch* et d'effectuer une prédiction puis une descente de gradient pour un batch plutôt qu'entrée après entrée. Cette pratique offre une accélération considérable de l'entraînement en réduisant le nombre d'exécutions de l'algorithme de backpropagation pour chaque *epoch* (*i.e.* passage de la totalité des données d'entraînement à travers le réseau). Ainsi, un batch de petite taille permet un déclenchement de l'apprentissage rapide (avant d'avoir vu l'ensemble des données) tandis qu'un batch de très grande taille nécessite généralement beaucoup plus d'epochs pour atteindre un état optimal. La taille du batch constitue donc un *hyperparamètre* (par opposition aux paramètres) déterminant dont le choix peut considérablement influencer la vitesse d'entraînement mais aussi la précision du modèle obtenu.

## Précision

La précision d'un réseau de neurones peut se quantifier par différents moyens. Au cours de l'entraînement, le but est d'optimiser une fonction objectif aussi appelée fonction de perte. Dans le cas d'un modèle de régression, la fonction objectif correspond à l'erreur que l'on cherche à minimiser grâce à une SGD par exemple. Dans le cas d'une régression scalaire, la Mean Squared Error (MSE) utilisée dans la section précédente est un candidat à privilégier [33]. L'avantage de cette fonction est qu'elle est facilement dérivable, ce qui est particulièrement pratique pour le calcul des dérivées du gradient. La Mean Absolute Error (MAE) est un autre candidat potentiel pour la fonction de perte. On considère que cette erreur est plus robuste aux *outliers* (*i.e.* valeurs absurdes) dont l'impact peut être exacerbé par le carré de la MSE. Cependant, la MAE a une tendance à moins ralentir l'apprentissage lorsqu'elle se rapproche d'un minimum. Comme il est tout à fait possible de vouloir suivre l'évolution d'un autre critère de précision différent de la grandeur minimisée, les implémentations de réseaux de neurones les plus courantes permettent de suivre l'évolution de la fonction de perte et d'une série d'autres variables appelées *métriques*. Comme indiqué par Chollet [33], pour la régression scalaire il est courant de prendre la MSE comme fonction de perte et la MAE comme métrique. Dans ce contexte, la Root Mean Squared Error (RMSE) est une autre métrique communément utilisée.

---

8. Cet aspect constitue l'une des raisons principales pour lesquelles les réseaux de neurones ont largement favorisé et bénéficié de la généralisation d'une exécution sur GPU.

## Optimalité

Maintenant que la notion de fonction de perte a été détaillée, il convient de se concentrer sur deux autres aspects fondamentaux : l'optimalité du réseau et la convergence du SGD qui ont été volontairement éludées jusqu'ici. En effet, par souci de simplicité dans la description des réseaux de neurones et de leur fonctionnement, une hypothèse implicite de convergence du SGD vers un état optimal du réseau a été faite. L'optimisation des paramètres des réseaux est, dans la majeure partie des cas, un problème non-convexe hautement complexe à tel point que la convergence du SGD est encore à l'étude, et qu'à ce jour aucune preuve formelle n'existe sauf dans des cas particuliers [233]. Comme expliqué dans [33], pour le cas d'une fonction simple et dérivable, la recherche d'un optimum se fait par évaluation de la fonction aux points d'annulation de la dérivée. Pour les réseaux de neurones, la fonction de perte est très complexe et la résolution analytique de ce problème n'est possible que dans un contexte théorique où le réseau n'a que très peu de paramètres. En pratique, l'approche adoptée est donc de minimiser la fonction de perte par un algorithme itératif de SGD. La représentation graphique de l'algorithme sur une fonction de perte 1D (Figure 8.9a) ou 2D (Figure 8.9b) permet de visualiser certains enjeux de la méthode. En particulier, la Figure 8.9a permet d'appréhender l'influence du taux d'apprentissage  $\lambda$  sur la vitesse de convergence. Avec un pas d'apprentissage trop faible, l'algorithme progresse lentement et risque de rester bloqué au niveau d'un minimum local tandis qu'avec un pas trop grand, le gradient risque d'alterner entre des mauvaises positions le long de la fonction de perte sans atteindre de minimum. Pour éviter les risques de blocage au niveau des minima locaux et pour optimiser la vitesse de progression sur les parties lisses, plusieurs variantes du SGD ont été développées. Ces variantes reposent principalement sur l'utilisation d'*optimiseurs* plutôt qu'un pas d'apprentissage constant. La plupart de ces optimiseurs exploitent la notion de *moment* qui fait référence à l'image d'une balle roulant le long de la courbe de perte et susceptible de rester bloquée en un minimum local [33]. L'idée est alors de déplacer la balle à chaque itération en fonction de sa vitesse et de son accélération, c'est-à-dire en mettant à jour les paramètres du réseau en prenant en compte le gradient actuel et les valeurs précédentes. Les optimiseurs les plus connus sont les méthodes *Adam*, *AdaGrad* et *RMSProp* dont une description complète est proposée dans les références [234, 235, 236].

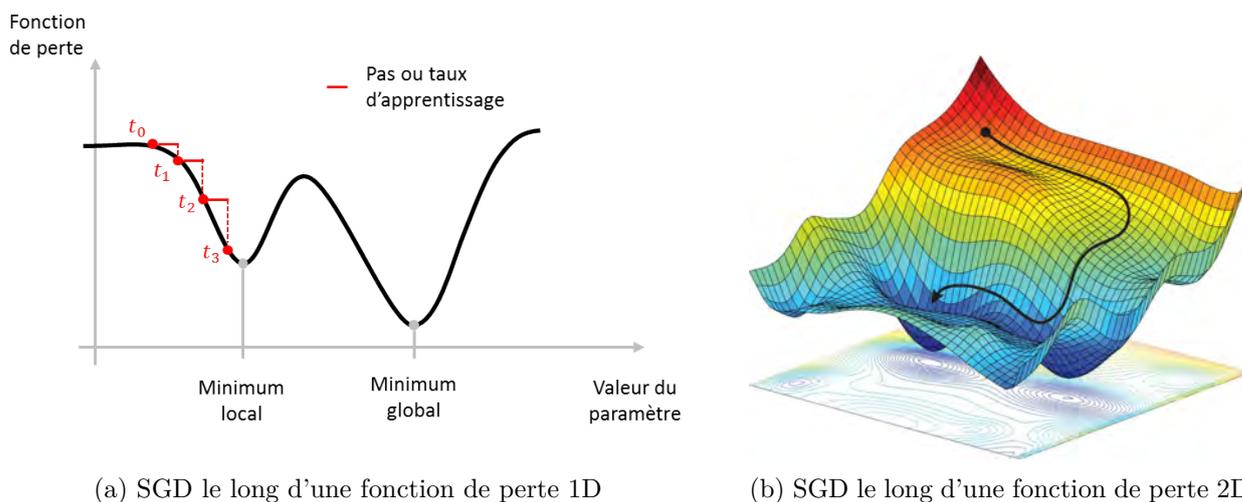
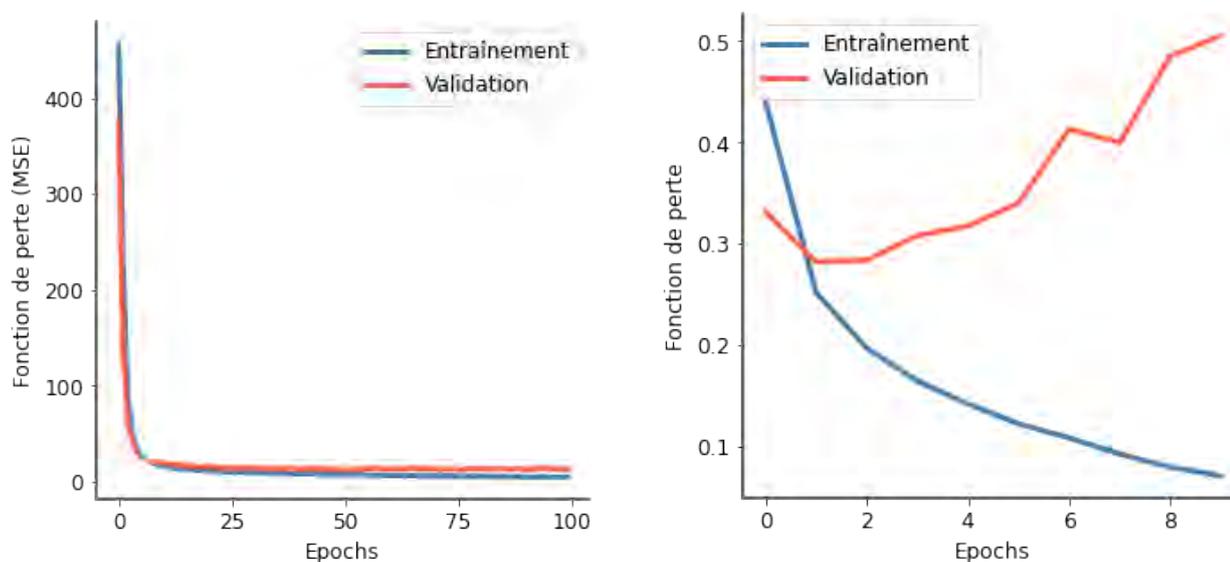


FIGURE 8.9 – Représentations graphiques de l'algorithme de SGD pour des fonctions de perte simples 1D (inspiré de [33]) et 2D (extrait de [34]).

## Overfitting, régularisation et subdivision des données

Mis à part l'amélioration continue des méthodes d'optimisation employées par l'algorithme d'apprentissage, la volonté de représenter concrètement la topologie de la fonction de perte a mo-

tivé le développement de techniques de visualisation haute fidélité pour des réseaux de neurones profonds [237]. En pratique, la topologie de la fonction de perte n'est pas facilement accessible et l'observation de la courbe d'erreur est utilisée pour contrôler la progression du gradient pendant l'apprentissage. En effet, au cours de l'entraînement, une pratique quasi-universelle consiste à tracer la superposition de l'évolution de l'erreur (ou d'une métrique) d'entraînement d'une part et de l'erreur (ou d'une métrique) de validation d'autre part en fonction du nombre d'epochs (Figure 8.10). Un des avantages de cette pratique est qu'elle permet de contrôler l'apparition d'un phénomène courant en ML, l'*overfitting*. Ce terme désigne un comportement particulier du réseau résultant d'une sur-optimisation des paramètres et qui se traduit par l'apprentissage de représentations spécifiques aux données d'entraînement compromettant ainsi les capacités de généralisation du modèle. L'augmentation soudaine de la courbe d'erreur de test, lorsque la courbe d'apprentissage continue à diminuer, est une manifestation caractéristique de l'*overfitting* (Figure 8.10b). La manière la plus simple d'éviter l'apparition de l'*overfitting* est d'agrandir la base de données d'entraînement. Lorsque ce n'est pas possible, plusieurs pratiques numériques permettent d'atténuer ce phénomène. Lorsqu'un réseau est trop grand par rapport aux données disponibles, une façon de réduire la tendance à l'*overfitting* consiste à réduire la profondeur du réseau [33]. La *pénalisation* et le *dropout* sont deux autres méthodes de *régularisation* pour aborder le problème. La pénalisation consiste à contraindre la complexité du réseau en forçant les paramètres (poids et biais) à prendre des valeurs faibles. Dans ce cas, la régularisation se fait en pénalisant la fonction de perte (*i.e.* la fonction à minimiser par descente de gradient) en ajoutant à l'erreur un coût associé au fait d'avoir des paramètres élevés [33]. Le dropout est une autre méthode de régularisation dont le principe consiste à annuler aléatoirement pendant l'entraînement certaines sorties des couches où il est activé. Comme indiqué par Chollet [33], l'idée est d'introduire un bruit fictif pour réduire les chances d'apparition de motifs aléatoires qui pourraient être appris à tort.



(a) Courbes d'apprentissage pour un réseau [64, 64] sur la base de données BPHD [238]

(b) Courbes d'apprentissage pour un réseau [16, 16] sur la base de données IMDB [239]

FIGURE 8.10 – Courbes d'apprentissage d'un réseau de régression scalaire (a) et d'un classifieur binaire (b).

Pour une subdivision classique de la base de données appelée *hold-out validation* (Figure 8.11) où la base est répartie en un dataset d'entraînement et un dataset de validation selon une répartition 80-20% par exemple, un *overfitting* des données de validation peut avoir lieu. En effet, la recherche d'une configuration/architecture (*i.e.* une valeur pour chaque hyperparamètre) par évaluation répétée des performances des différentes configurations sur la même base peut donner lieu à une fuite d'informations en provenance de la base de validation vers le réseau [33]. Comme évoqué à

la fin de la section 1.1, lorsque la base de données est suffisamment grande, il est conseillé d'utiliser un troisième jeu de données pour former un dataset de test. Avec une répartition 70-20-10% pour les dataset d'entraînement, de validation et de test, on peut alors entraîner et évaluer un grand nombre de configurations avec les deux premiers jeux de données et garder le dernier pour évaluer la performance de généralisation finale de l'ultime réseau retenu. Lorsque la taille de la base globale est trop modeste, il est possible d'utiliser une subdivision *k-fold* des données. Cette procédure illustrée sur la Figure 8.11 consiste à découper la base en  $k$  jeux de données de même taille, à en sélectionner  $k - 1$  pour l'entraînement et à garder le dernier pour le calcul du score de précision. En changeant à chaque fois le jeu de validation, on obtient  $k$  scores que l'on peut moyenner pour obtenir une mesure de précision globale [33]. Si la base de données est très petite, une dernière procédure de validation appelée *k-fold validation itérée avec mélange* consiste à renouveler  $p$  fois la procédure de validation *k-fold* en faisant précéder chaque étape de subdivision par une étape de mélange des données [33].

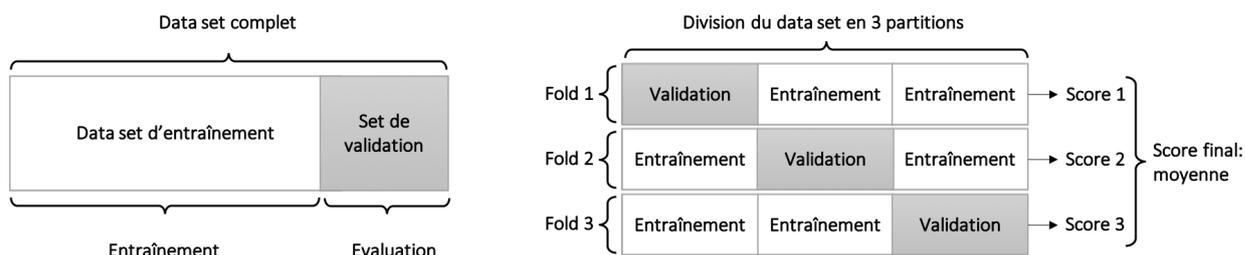


FIGURE 8.11 – Répartition de la base de données pour une validation par hold-hout (gauche) ou *k-fold* (droite) (reproduit d'après [33]).

## Optimisation d'architecture et répétabilité

Pour clore cette discussion sur les aspects avancés relatifs aux réseaux de neurones, il reste deux questions centrales à aborder : l'étape d'entraînement conduit-elle à une paramétrisation unique, et comment choisir l'architecture d'un réseau de neurones ? Pour répondre à la première question, il suffit d'entraîner le même réseau plusieurs fois pour se convaincre de sa nature stochastique. En effet, lorsque l'on choisit une architecture, on commence par en initialiser les paramètres. Généralement, cela se fait par un procédé aléatoire, ce qui implique un réseau différent à chaque initialisation. Ensuite, l'étape de descente de gradient a elle aussi une nature stochastique à travers les optimiseurs (qui peuvent comporter une part d'aléatoire) et lors des étapes de sélection des batch dans la descente de gradient stochastique SGD. La pluralité des sources stochastiques et la difficulté de les contrôler sont telles que plusieurs auteurs s'intéressent au développement d'implémentations capables de garantir la reproductibilité des résultats [240, 241, 242]. De tels travaux dépassent le cadre de cette thèse mais ils permettent de prendre conscience du fait qu'une même architecture entraînée plusieurs fois convergera systématiquement vers un état final différent avec des capacités de généralisation différentes. Pour pallier ce problème, une pratique courante consiste à entraîner le même modèle un grand nombre de fois pour en estimer les performances moyennes et en extraire le plus performant.

La multiplication de l'entraînement sur une architecture donnée présuppose toutefois d'avoir connaissance d'une configuration optimale. Cela nous amène donc à la deuxième question concernant les moyens de déterminer une architecture optimale. Aux prémices du DL et jusqu'à très récemment, aucune technique avancée ne permettait d'identifier une architecture plus intéressante qu'une autre. La seule manière de faire était d'ajuster empiriquement la configuration du réseau en modifiant progressivement les hyperparamètres (nombre de neurones par couche, nombre de couches, taille des batch, taux d'apprentissage, etc.) jusqu'à l'obtention d'une architecture performante. Aujourd'hui cette méthode s'utilise encore et permet d'évaluer rapidement les performances

potentielles d'un réseau. Néanmoins, l'augmentation des ressources de calcul a permis le développement d'algorithmes d'exploration automatique de l'espace des hyperparamètres. Parmi ces algorithmes appelés *tuner*, on peut citer les approches par exploration aléatoire et par processus gaussien [243, 244]. Dans le premier cas, l'espace des hyperparamètres est exploré de façon aléatoire tandis que dans le deuxième, un métamodèle de la fonction de perte en fonction des hyperparamètres est construit pour optimiser l'exploration de l'espace. Pour répondre au problème de répétabilité, ces algorithmes permettent de tester chaque configuration plusieurs fois et de conserver le réseau offrant les meilleures performances.

Les réseaux de neurones constituent une méthode d'apprentissage profonde capable d'extraire des informations enfouies dans des bases de données pouvant facilement atteindre plusieurs millions de points d'apprentissage. Bien que cet avantage ne soit pas exploité ici, cette méthode permet également de prédire simultanément plusieurs sorties corrélées. Pour ces raisons, la méthode a été retenue pour l'estimation locale des grandeurs pariétales ( $C_p$ ,  $C_f$ ,  $C_h$ ) d'un objet en phase de rentrée hypersonique raréfiée. Les notions avancées discutées ici témoignent de l'ensemble des questions qui peuvent se poser lors du développement d'un tel modèle.

## 2 Développement de modèles réduits pour les grandeurs d'arrêt

Cette section se concentre sur la construction de deux métamodèles de krigeage pour le calcul des grandeurs d'arrêt  $C_{p,stag}$ ,  $C_{h,stag}$  en régime hypersonique raréfié. Elle présente le choix des variables de design, la construction de la base de données d'entraînement et de validation. Ensuite, la comparaison des résultats des nouveaux modèles avec ceux issus des simulations DSMC **SPARTA** est abordée. Les résultats des nouveaux modèles sont également confrontés à ceux obtenus avec les modèles actuels implémentés dans le code **ARES**.

### 2.1 Choix des variables de design

L'état de l'art des méthodes de calcul rapide présenté dans le chapitre 7 a mis en évidence que pour le calcul du flux de chaleur en régime continu, un grand nombre de formulations permet d'en calculer la valeur au point d'arrêt à partir d'informations contextuelles (e.g.  $\rho_\infty$ ,  $U_\infty$ ,  $R_n$ ). Si certaines formulations reposent sur des considérations physiques plus rigoureuses et nécessitent la connaissance d'un nombre élevé de grandeurs, d'autres sont plus empiriques et utilisent plutôt des coefficients de corrélation en complément de quelques variables physico-géométriques. En régime moléculaire libre, les formulations analytiques développées à partir de la cinétique des gaz permettent également de réduire le calcul du flux de chaleur au point d'arrêt à des expressions simples dépendantes de quelques paramètres seulement. Pour la pression, le nombre de formulations est beaucoup plus faible mais les mêmes remarques restent valables. Finalement, en régime raréfié transitionnel, les fonctions de raccord permettent de calculer, grâce à un paramètre de raréfaction, les valeurs pariétales à partir des valeurs supposées connues en régime continu et moléculaire libre.

Ces informations suggèrent donc que, pour les grandeurs d'arrêt adimensionnées, il serait possible de construire une formulation pour l'ensemble du régime raréfié à partir d'une quantité minimale de grandeurs environnementales et géométriques. Les corrélations généralement déduites de bases de données numériques ou expérimentales pourraient être inférées par un modèle d'apprentissage statistique. La question centrale pour atteindre cet objectif est donc de déterminer quelles sont les informations minimales nécessaires.

Comme indiqué dans le premier chapitre du manuscrit, en régime hypersonique raréfié, les nombres adimensionnés les plus importants sont les nombres de Knudsen et de Mach. Par conséquent, ces deux grandeurs apparaissent comme les candidats les plus naturels. De plus, un principe fondamental lors de la construction d'un métamodèle est d'éviter au maximum les redondances d'informations parmi les variables de design. Compte tenu des variables utilisées dans les corrélations existantes pour la pression et le flux de chaleur, ces deux nombres semblent contenir l'ensemble des

grandeurs physiques nécessaires. En remarquant que le choix de la longueur de référence pour le calcul du nombre de Knudsen dépend du contexte, le choix  $L_{\text{ref}} = 2R_n$  (où  $R_n$  est le rayon de nez au point d'arrêt) permet finalement de fermer le système d'informations requises pour le calcul des grandeurs d'arrêt. Pour simplifier l'accès au rayon  $R_n$  et pour alléger les coûts de calcul, la base de données discutée dans la section suivante a été construite à partir de simulations d'écoulements hypersoniques raréfiés autour d'une sphère de rayon unitaire.

## 2.2 Construction de la base de données 2D-axisymétrique

### 2.2.1 Génération du plan d'expériences

Une fois les variables de design choisies, l'étape suivante consiste à générer une base de données numériques pour explorer l'espace de design. Pour créer un plan d'expériences  $(Kn, M_\infty)$  relatif à des conditions de rentrées hypersoniques raréfiées, il faut d'abord définir précisément notre domaine d'étude en termes de taille d'objet et de conditions atmosphériques. Compte tenu des tailles, altitudes et vitesses caractéristiques des objets (véhicules, satellites et débris) généralement soumis à des écoulements hypersoniques raréfiés nous avons considéré les conditions limites suivantes :

- Les objets ont une longueur de référence minimale de 0.1 m et une longueur de référence maximale de 50 m.
- Les altitudes sont comprises entre 200 et 85 km.
- Les vitesses de rentrée varient entre 6 et 10 km/s.

A partir des données atmosphériques moyennées des modèles **US62** et **Jacchia77**, les densités numériques  $n_\infty$  et les températures  $T_\infty$  associées permettent d'identifier les bornes physiques du domaine :

- A 200 km,  $M_\infty \in [8; 14]$  et  $Kn \in [4; 1980]$ .
- A 85 km,  $M_\infty \in [22; 37]$  et  $Kn \in [1.4 \times 10^{-4}; 7 \times 10^{-2}]$ .

Ces bornes permettent de définir un premier domaine, appelé domaine physique, représenté en gris sur la Figure 8.12. La prise en compte des potentielles variations de température aux altitudes limites et des bornes des régimes continu ( $Kn \simeq 10^{-3}$ ) et moléculaire libre ( $Kn \simeq 100$ ) permet de se ramener au domaine suivant :

- Pour  $Kn = 100$ ,  $M_\infty \in [8; 20]$ .
- Pour  $Kn = 10^{-3}$ ,  $M_\infty \in [20; 40]$ .

Cependant, en raison des variations non linéaires de la température  $T_\infty$  entre les altitudes considérées, il ne suffit pas de relier linéairement les bornes du domaine pour le fermer. Pour illustrer cela et déterminer le domaine d'expérience à considérer, différents points limites, pour des altitudes comprises entre 200 et 85 km, ont été tracés sur la Figure 8.12. En considérant le domaine physique réduit et les points limites, le domaine d'expérience représenté en pointillés rouges sur la même figure a pu être défini.

Après identification des limites du domaine, il est possible de construire le plan d'expériences. Pour les raisons évoquées dans la section 1.1, le choix s'est porté sur un plan LHS optimal. Pour le krigeage, un bon choix du nombre de points d'apprentissage est  $n = 10d$  où  $d$  représente le nombre de variables de design [48]. Avec une marge additionnelle de 25%, le plan d'expériences de  $n = 25$  points représenté sur la Figure 8.13 a été obtenu. Le plan d'expériences dans le repère physique représenté sur la Figure 8.14 s'obtient alors avec une transformation bilinéaire logarithmique.

Une fois l'ensemble des conditions déterminées en termes de Mach et Knudsen, il faut revenir aux variables nécessaires à la mise en données des calculs correspondants. Du fait de la non-bijectivité du passage  $(Kn, M_\infty) \rightarrow (U_\infty, T_\infty, n_\infty, X_{O_2}, X_{N_2}, X_O)$ , les conditions atmosphériques et de vol ont été déterminées avec la procédure suivante :

- (i) La température  $T_\infty$  est supposée constante et égale à 160 K.
- (ii) Les géométries sont des sphères de rayon de nez unitaire ( $R_n = 1$  m).
- (iii) Le libre parcours moyen  $\lambda_{N_2, \infty}^{\text{VHS}}$  puis la densité numérique  $n_\infty$  se calculent à partir des paramètres  $(Kn, R_n, T_\infty)$ .

- (iv) Les compositions  $X_{O_2}, X_{N_2}, X_O$  s'obtiennent par interpolation des tables d'atmosphère en connaissant  $n_\infty$ .
- (v) Les compositions permettent de calculer la constante spécifique de l'air  $R_{s,air}$  qui, avec  $T_\infty$  et  $M_\infty$  donnent la vitesse  $U_\infty$ .
- (vi) A partir de la procédure utilisée dans l'étude Apollo du chapitre 5, la température de paroi  $T_w$  est estimée par équilibre radiatif en supposant l'émissivité constante  $\epsilon_w = 0.85$ .

Les conditions des points de la base de données d'entraînement ainsi obtenues sont reportées dans le Tableau 8.1.

Compte tenu de la grande quantité de données de validation disponibles, les 25 points du plan LHS ont été utilisés pour l'entraînement. En effet, pour le coefficient de flux de chaleur au point d'arrêt, les travaux de Singh et Schwartzentruber [56] fournissent 29 points de validation contenus dans notre domaine d'étude. En complément, une partie de la base de données 3D (notée BDD 3D) créée pour l'entraînement des réseaux de neurones (voir section 3.2) permet l'extraction de 23 points de validation pour les coefficients de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt. Pour

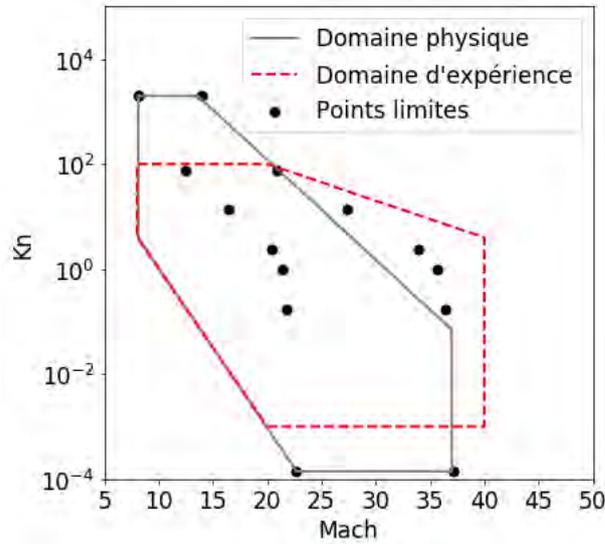


FIGURE 8.12 – Représentation des domaines physiques et d'expérience.

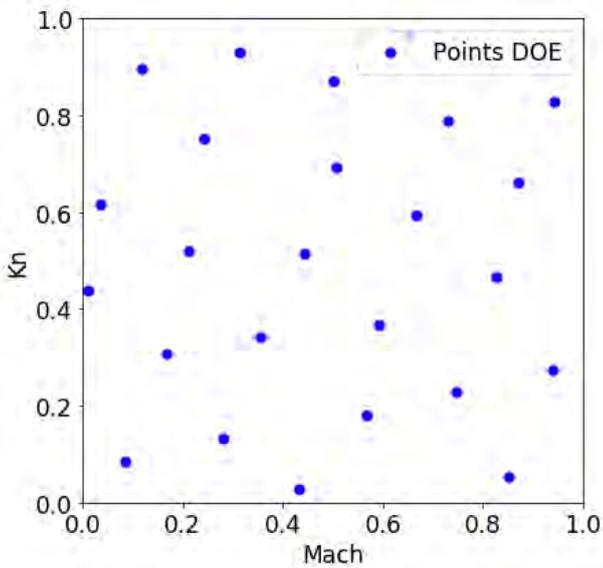


FIGURE 8.13 – Plan d'expériences LHS de 25 points dans le repère canonique.

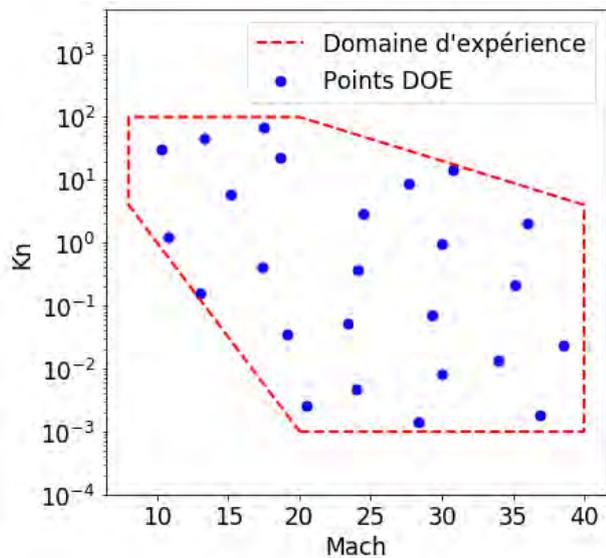


FIGURE 8.14 – Plan d'expériences LHS de 25 points dans le repère physique.

$M_\infty$	$Kn$	$n_\infty$ ( $\cdot/m^3$ )	$X_{O_2}$	$X_{N_2}$	$X_O$	$U_\infty$ (m/s)	$T_w$ (K)
CFD							
28.4	$1.4 \times 10^{-3}$	$4.69 \times 10^{20}$	0.221	0.779	0	7214	1597
36.9	$1.8 \times 10^{-3}$	$3.59 \times 10^{20}$	0.221	0.779	0	9383	1881
20.4	$2.6 \times 10^{-3}$	$2.49 \times 10^{20}$	0.221	0.779	0	5199	1154
24	$4.7 \times 10^{-3}$	$1.40 \times 10^{20}$	0.221	0.779	0	6108	1212
30	$8.1 \times 10^{-3}$	$8.08 \times 10^{19}$	0.221	0.779	0	7636	1337
DSMC							
33.9	$1.4 \times 10^{-2}$	$4.76 \times 10^{19}$	0.233	0.767	0.009	8643	1384
38.5	$2.4 \times 10^{-2}$	$2.75 \times 10^{19}$	0.196	0.786	0.018	9830	1411
19.01	$3.4 \times 10^{-2}$	$1.91 \times 10^{19}$	0.186	0.785	0.029	4890	798
23.4	$5.1 \times 10^{-2}$	$1.27 \times 10^{19}$	0.178	0.784	0.038	6017	885
29.3	$6.9 \times 10^{-2}$	$9.45 \times 10^{18}$	0.170	0.784	0.0460	7547	1011
13.0	$1.6 \times 10^{-1}$	$4.18 \times 10^{18}$	0.147	0.779	0.074	3371	499
35.2	$2.2 \times 10^{-1}$	$3.00 \times 10^{18}$	0.133	0.774	0.093	9161	1009
24.1	$3.8 \times 10^{-1}$	$1.72 \times 10^{18}$	0.114	0.765	0.121	6324	672
17.3	$4.1 \times 10^{-1}$	$1.61 \times 10^{18}$	0.112	0.763	0.125	4559	517
30.0	$9.5 \times 10^{-1}$	$6.91 \times 10^{17}$	0.089	0.741	0.170	7993	633
10.8	1.2	$5.38 \times 10^{17}$	0.085	0.733	0.182	2886	284
36.0	2.0	$3.22 \times 10^{17}$	0.077	0.714	0.209	9675	601
24.4	2.9	$2.25 \times 10^{17}$	0.072	0.697	0.231	6601	413
15.2	5.8	$1.12 \times 10^{17}$	0.064	0.661	0.275	4141	253
27.7	8.9	$7.33 \times 10^{16}$	0.058	0.634	0.308	7634	347
30.8	14.1	$4.63 \times 10^{16}$	0.052	0.601	0.347	8561	336
18.6	22.8	$2.87 \times 10^{16}$	0.046	0.561	0.393	5240	220
10.3	30.9	$2.12 \times 10^{16}$	0.042	0.538	0.420	2913	171
13.3	45.6	$1.43 \times 10^{16}$	0.036	0.491	0.473	3824	176
17.4	67.0	$9.75 \times 10^{15}$	0.032	0.460	0.508	5071	184

Conditions obtenues avec  $T_\infty = 160$  K,  $Kn = \lambda_{N_2, \infty}^{VHS} / (2R_n)$  et  $R_n = 1$  m.

TABLEAU 8.1 – Conditions atmosphériques et de vol des points de la base de données d’entraînement des modèles de krigeage.

chacune de ces simulations 3D réalisées avec différentes géométries (Apollo, OREX et l’IXV),  $Kn$  est calculé à partir du rayon de nez au point d’arrêt  $R_n$ . La répartition de ces points dans le domaine numérique est représentée sur la Figure 8.15.

## 2.2.2 Simulation numérique du plan d’expériences

Comme indiqué dans le Tableau 8.1, une partie des simulations a été réalisée en utilisant un code DSMC et une autre partie en utilisant un code CFD. Ainsi, pour les conditions les plus raréfiées ( $Kn \geq 10^{-2}$ ), des calculs DSMC 2D-axisymétriques ont été faits avec le code **SPARTA**. Comme pour l’ensemble des calculs présentés jusqu’ici, une attention particulière a été accordée au respect des métriques fondamentales de la DSMC. La particularité des simulations 2D-axisymétriques est qu’elles permettent d’atteindre un niveau de raffinement très élevé. En contrepartie, l’hétérogénéité des surfaces d’injection des particules en entrée du domaine de calcul se traduit par un nombre de particules par maille de plus en plus faible à mesure que l’on se rapproche de la ligne d’arrêt. En dépit de l’utilisation d’un algorithme d’équilibrage par création de particules artificielles, un nombre de particules trop faible se traduit par l’apparition d’un pic physiquement absurde au niveau du point d’arrêt. Pour éviter ce phénomène décrit dans les notes de Bird [245], chaque simulation

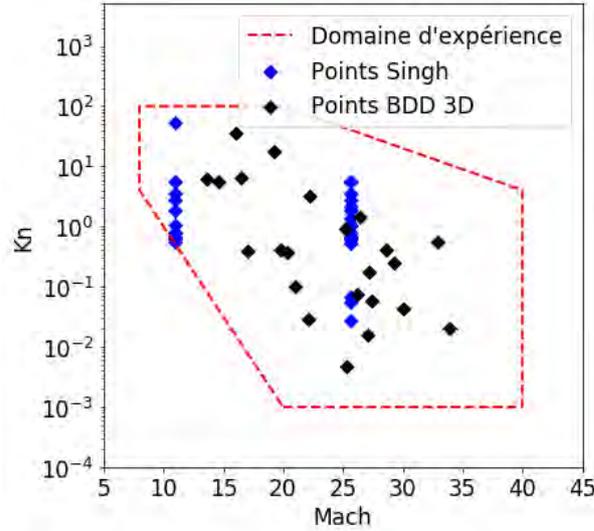


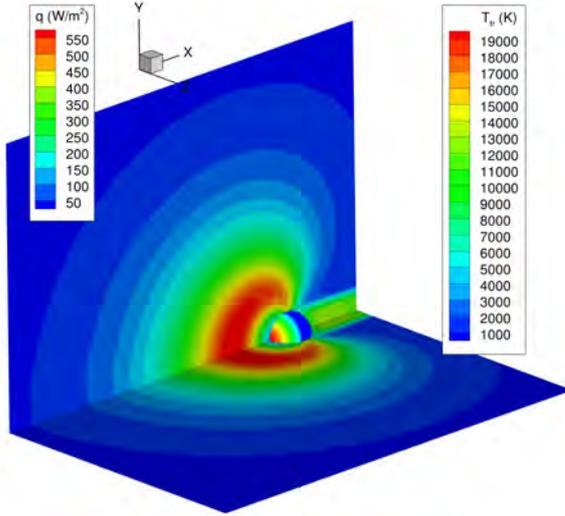
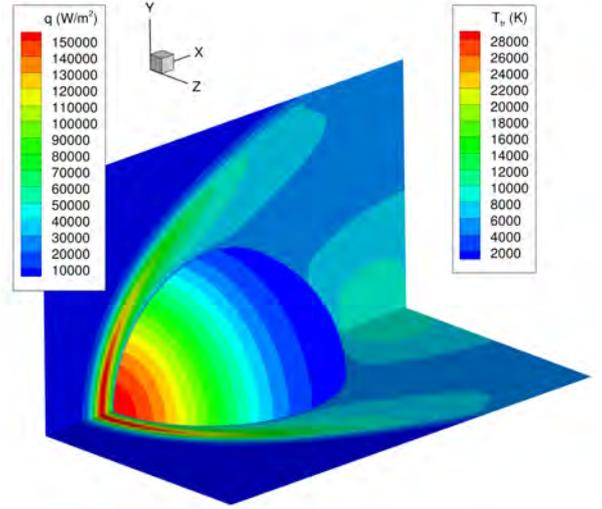
FIGURE 8.15 – Distribution des points de validation.

a été réalisée plusieurs fois en augmentant le nombre de particules jusqu'à convergence. Pour les  $Kn$  les plus élevés, ce phénomène est plus marginal car il est peu coûteux de « sur-résoudre » les calculs. Ainsi, pour la simulation la plus raréfiée ( $Kn = 67$ ), le pas de temps et d'espace vérifient  $\Delta t = 5 \times 10^{-4} \tau_{\text{coll},\infty}$ ,  $\Delta x = 0.005 \lambda_\infty$  et le nombre de particules numériques est choisi de sorte à assurer un nombre de particules par maille  $N_{p/c} > 10$  le long de la ligne d'arrêt. Pour le cas  $Kn = 1.4 \times 10^{-2}$ , le pas de temps et le maillage initial sont pris tels que  $\Delta t = \min(\tau_{\text{coll}})/5$ ,  $\Delta x = \lambda_\infty/4$  et un raffinement adaptatif de niveau 4 permet de réduire la taille de maille jusqu'à  $\Delta x/8$  lorsque le ratio local  $\lambda/\Delta x$  devient inférieur à 1.5.

Pour toutes les simulations, un modèle d'air à 5 espèces est utilisé avec le modèle TCE et la cinétique chimique de Park. Les nombres de collisions sont choisis constant pour la rotation ( $Z_{\text{rot}} = 5$ ) et variable avec le modèle de Millikan-White pour la vibration ( $Z_{\text{vib}} = Z_{\text{vib}}^{\text{MW}}(T)$ ). Les transferts d'énergie sont simulés avec le modèle de Borgnakke-Larsen en supposant le mode de rotation continu et le modèle de vibration discret sous l'hypothèse de l'oscillateur harmonique simple. Les collisions sont simulées avec l'algorithme No Time Counter (NTC) et le modèle de collision Variable Hard Sphere (VHS) est utilisé avec les paramètres de Stephani [178] dont l'importance a été mise en avant dans le chapitre 6. Pour finir, malgré les effets significatifs d'accommodation en conditions très raréfiées, le coefficient  $w$  a été pris constant égal à 1 pour toutes les simulations. Des exemples de résultats sont montrés sur les Figure 8.16 et 8.17.

Pour les conditions proches du régime continu ( $Kn < 10^{-2}$ ), les simulations ont été réalisées avec **CASL**, la version 1D sphérique équivalent du code CFD Navier-Stokes 2D-3D **CELHyO** [187, 212], et utilisée notamment par Van Ghele dans le cadre de l'étude de la rentrée de l'IXV en régime continu [47]. La particularité de **CASL** est qu'il permet de calculer précisément le flux de chaleur et la pression au point d'arrêt d'une géométrie quelconque assimilée à une sphère équivalente de rayon  $R_n$ . Pour les calculs discutés ici, les équations de Navier-Stokes ont été résolues avec un schéma implicite en temps et un schéma en espace de type HUS-Van-Leer d'ordre 2.

En raison de l'effet négligeable du mode de vibration, l'écoulement a systématiquement été supposé à l'équilibre thermique tandis que le déséquilibre chimique a été simulé avec le modèle de cinétique chimique de Park. La viscosité d'espèce a été calculée avec le modèle de Blottner et la viscosité de mélange avec le modèle d'Armaly-Sutton. La diffusion est obtenue avec la formule de Gubernatis et la conductivité thermique avec les formules de Wilke et Montchick [246].


 FIGURE 8.16 – Simulation DSMC du cas  $M_\infty = 30.8$ ,  $Kn = 14.1$ .

 FIGURE 8.17 – Simulation DSMC du cas  $M_\infty = 33.9$ ,  $Kn = 1.4 \times 10^{-2}$ .

### 2.3 Résultats

Pour justifier l'intérêt de construire un modèle d'apprentissage complexe comme le krigeage, il convient de comparer les résultats d'un tel métamodèle aux résultats d'un métamodèle élémentaire. Les méthodes de surface de réponse linéaire et quadratique ont donc été considérées. En reprenant la présentation d'un modèle de surface de réponse proposée par Ahmed [29], ces méthodes se définissent à partir des relations suivantes. Pour une surface de réponse linéaire, la réponse approchée en un nouveau point  $\mathbf{x}^*$  est donnée par la relation :

$$\hat{y}(\mathbf{x}^*) = \beta_0 + \sum_{k=1}^d \beta_k x_k^*, \quad (8.36)$$

où  $d$  est le nombre de variables de design,  $\mathbf{x}^*$  est un vecteur de taille  $d$  et  $\beta$  est le vecteur de régression de même taille obtenu par la méthode des moindres carrés :

$$\beta = (A^t A)^{-1} A^t y, \quad (8.37)$$

avec  $y = (y_1, \dots, y_n)^t$  le vecteur des réponses exactes. La matrice  $A$  de taille  $n \times (d+1)$  s'exprime en fonction des points d'apprentissage  $(\mathbf{x}_j^{(i)})_{(i,j) \in \llbracket 1, n \rrbracket \times \llbracket 1, d \rrbracket}$  par la relation :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & \dots & x_d^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & \dots & x_d^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_1^{(n)} & \dots & x_d^{(n)} \end{pmatrix}. \quad (8.38)$$

Pour le modèle quadratique, la réponse approchée devient :

$$\hat{y}(\mathbf{x}^*) = \beta_0 + \sum_{k=1}^d \beta_k x_k^* + \sum_{k=1}^d \sum_{j < k}^d \beta_{k,j} x_k^* x_j^*, \quad (8.39)$$

où le vecteur  $\beta$  s'obtient par la même formule (8.37) mais avec la matrice  $A$  de taille  $n \times m$  donnée par la relation :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & \dots & x_1^{(1)}x_2^{(1)} & \dots & (x_d^{(1)})^2 \\ 1 & x_1^{(2)} & \dots & x_1^{(2)}x_2^{(2)} & \dots & (x_d^{(2)})^2 \\ \vdots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 1 & x_1^{(n)} & \dots & x_1^{(n)}x_2^{(n)} & \dots & (x_d^{(n)})^2 \end{pmatrix}. \quad (8.40)$$

Le nombre de colonnes vaut donc  $m = (d + 1)(d + 2)/2$ .

Les modèles de surface de réponse et de krigeage considérés dans cette section ont tous été construits avec la toolbox **SMT** introduite dans la section 1.2.

### 2.3.1 Résultats pour le coefficient $C_{p,\text{stag}}$

Les résultats obtenus par krigeage et par surface de réponse linéaire et quadratique sont résumés dans le Tableau 8.2 où les erreurs RMSE et MRE sont définies comme suit :

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (8.41)$$

$$\text{MRE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i}, \quad (8.42)$$

où  $n$  désigne le nombre de points de validation, les  $(y_i)_{i=1..n}$  sont les valeurs obtenues par DSMC et les  $(\hat{y}_i)_{i=1..n}$  sont les valeurs prédites par les modèles réduits.

On remarque que les différents modèles réduits offrent des performances très proches, ce qui suggère une relation  $C_{p,\text{stag}} = f(Kn, M_\infty)$  quasi-linéaire. Cependant, sur la Figure 8.18, la comparaison des résultats 3D dans le domaine canonique pour la surface de réponse linéaire (Figure 8.18a) et le krigeage ordinaire avec noyau gaussien (Figure 8.18c) montre des tendances radicalement différentes pour un degré de précision similaire. Pour le modèle linéaire, malgré la faible erreur relative moyenne, la réponse plane demeure physiquement incorrecte. De même, le krigeage ordinaire avec noyau exponentiel (Figure 8.18b) offre le meilleur niveau de précision mais avec une surface très bruitée en contradiction avec l'allure attendue. Pour les modèles de krigeage ordinaires avec noyau gaussien et matern52<sup>9</sup>, on retrouve l'allure d'une courbe en  $S$  pour les Mach les plus élevés avec une tendance plus complexe pour les Mach plus faibles. Ces modèles semblent donc les plus pertinents en dépit du niveau de précision non-maximal.

Méthode d'apprentissage	RMSE	MRE (%)
Krigeage ordinaire avec noyau gaussien	0.0197	1.494
Krigeage ordinaire avec noyau exponentiel	0.0184	1.376
Krigeage ordinaire avec noyau matern52	0.0197	1.521
Surface de réponse linéaire	0.0194	1.517
Surface de réponse quadratique	0.0179	1.448

TABLEAU 8.2 – Erreurs d'estimation du coefficient  $C_{p,\text{stag}}$  pour différents modèles réduits.

Plus généralement, la précision de l'ensemble des modèles peut s'expliquer par la faible plage de variation du coefficient  $C_{p,\text{stag}}$  qui varie entre 1.8 et 2.2, laissant ainsi peu de place à une mauvaise prédiction. Toutefois, pour identifier l'origine des écarts entre les valeurs réelles et prédites,

9. Le noyau Matérn 5/2 noté ici matern52 a la forme suivante :

$$r(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = \prod_{k=1}^d \left( 1 + \sqrt{5}\theta_k |x_k^{(i)} - x_k^{(j)}| + \frac{5}{3}\theta_k^2 (x_k^{(i)} - x_k^{(j)})^2 \right) \exp(-\sqrt{5}\theta_k |x_k^{(i)} - x_k^{(j)}|).$$

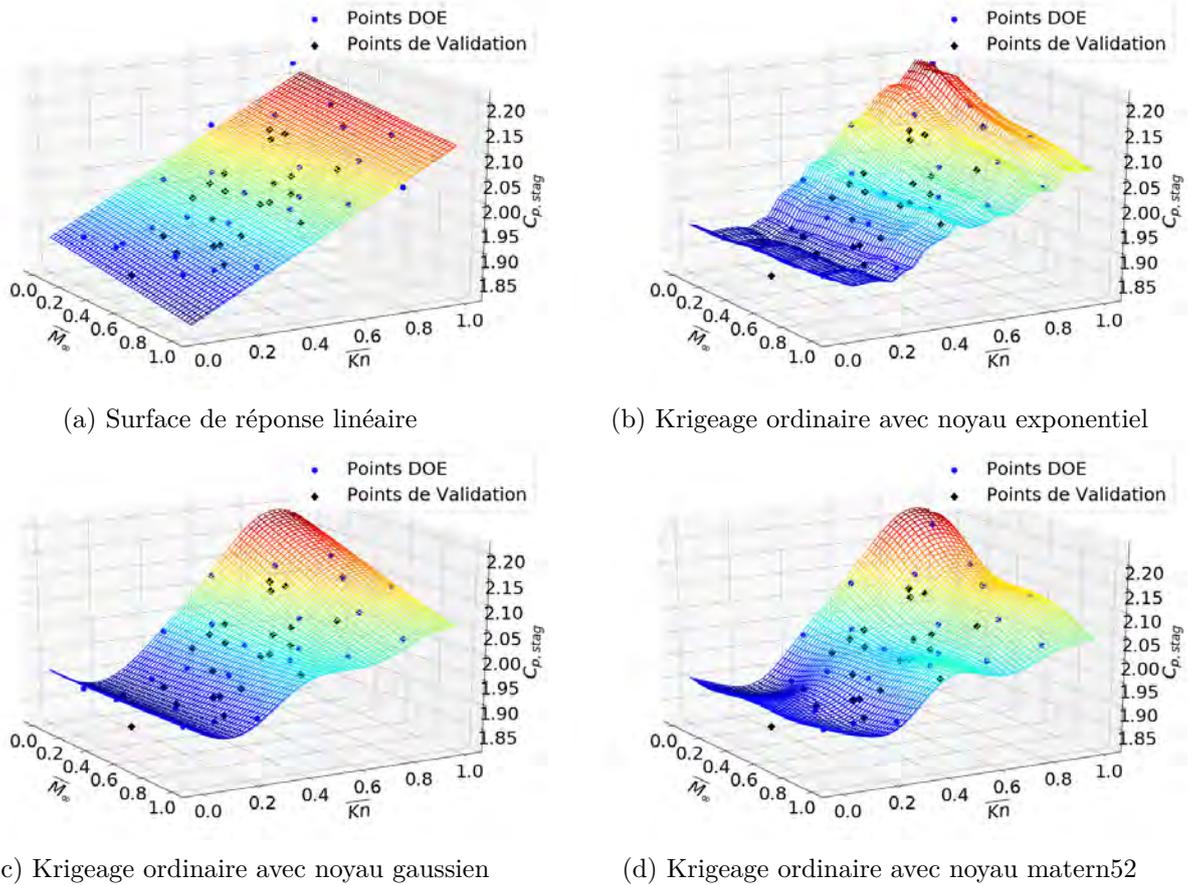


FIGURE 8.18 – Coefficients de pression au point d’arrêt  $C_{p,stag}$  obtenus pour différents modèles d’apprentissage.

3 outliers encerclés en rouge ont été identifiés sur la Figure 8.19. En remontant aux simulations 3D d’où proviennent ces résultats, on s’aperçoit que l’incohérence est liée à l’algorithme de détection automatique du point d’arrêt. En effet, pour l’extraction des valeurs au point d’arrêt lors de la validation du modèle, un algorithme de détection basé uniquement sur les caractéristiques géométriques de l’objet et son attitude (incidence, dérapage) a été utilisé. Ne tenant pas compte de la réalité physique de l’écoulement, cet algorithme commet des erreurs dans certains cas limites. Ainsi, dans le cas particulier où des simulations DSMC 3D sont utilisées pour la validation, des fluctuations de pression surfacique de l’ordre de quelques pourcents peuvent être observées autour du point d’arrêt, ce qui se traduit fatalement par l’extraction d’une valeur de  $C_{p,stag}$  différente de la valeur réelle (*i.e.* maximale). Pour ces points, la connaissance du  $C_{p,stag}$  réel se traduirait donc par un déplacement des outliers en direction de la nappe. Quand bien même, un tel ajustement n’a in fine qu’une influence faible sur l’erreur moyenne qui est déjà inférieure à 2%.

Pour améliorer la robustesse du modèle, la Variance Mean Ratio (VMR) permet d’évaluer la qualité d’exploration de l’espace de design avec le plan d’expériences utilisé. Elle se définit en tout point de l’espace de design par la relation :

$$VMR(x) = \frac{\sigma^2(x)}{\mu(x)}, \quad (8.43)$$

La Figure 8.20 montre les VMR obtenues avec différents modèles de krigeage ordinaire. Sans surprise, pour le krigeage avec noyau exponentiel (Figure 8.20a), la réponse bruitée identifiée plus tôt se retrouve au niveau de la VMR. Pour les noyaux gaussien (Figure 8.20b) et matern52 (Figure 8.20c), la VMR est beaucoup plus lisse. Ces résultats montrent également qu’au niveau des points rouges situés dans les zones sous-explorées du DOE (Figure 8.20d), la VMR est plus élevée. En

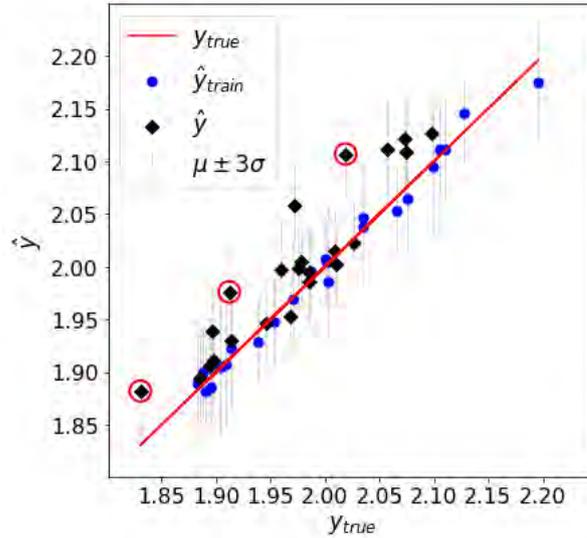


FIGURE 8.19 – Comparaison des  $C_{p,stag}$  estimés et réels pour le modèle de krigeage ordinaire avec noyau gaussien.

pratique, l'évaluation des points optimaux à ajouter au plan pour optimiser la réduction de VMR se fait par minimisation de l'intégrale de la VMR [48]. En première approche, l'ajout des points rouges permettrait déjà une diminution locale de la VMR mais étant donné le niveau de précision actuel, l'influence de l'ajout de ces points serait négligeable. En revanche, l'évaluation de l'erreur en ces points renforce la confiance en nos modèles de krigeage puisque malgré le niveau de variance élevé en ces points, l'erreur relative moyenne est inférieure à 1% contre 1.6 et 1.8% pour les surfaces de réponse quadratique et linéaire.

Les points de validation de la base BDD 3D (Figure 8.15) ont également été considérés avec **ARES**. Pour l'ensemble des cas, les simulations **ARES** ont été réalisées en considérant des sphères dont le rayon de nez  $R_n$  est identique au rayon de courbure au point d'arrêt des objets 3D. Pour les 23 points, l'erreur moyenne obtenue vaut 3.66%, soit un peu plus du double de celles obtenues avec les modèles d'apprentissage présentés ici.

Les différents modèles d'apprentissage offrent un niveau de précision supérieur au modèle actuellement disponible dans **ARES**. Néanmoins, seuls les modèles de krigeage gaussien et avec noyau matern52 ont une réponse physiquement pertinente. Le noyau gaussien donnant un niveau de précision supérieur, ce modèle semble donc être le plus judicieux à conserver.

### 2.3.2 Résultats pour le coefficient $C_{h,stag}$

Pour le coefficient de flux de chaleur au point d'arrêt, deux bases de validation ont été considérées : les données de Singh et Schwartzentruber [56], et les calculs 3D utilisés pour l'entraînement des réseaux de neurones. Les résultats obtenus avec les méthodes d'apprentissage sont résumés dans le Tableau 8.3. Contrairement au cas de la pression, les erreurs montrent une performance considérablement meilleure des modèles de krigeage par rapport aux modèles simples. Ainsi, la vue 3D des résultats sur la Figure 8.21 confirme l'évolution non-linéaire de la réponse. Cependant, la position des points de validation localisés sur la partie légèrement raréfiée explique aussi pourquoi le modèle quadratique est précis pour cette base de validation. Comme attendu, une forme globale en  $S$  est bien observée et la solution suggère une dépendance faible au nombre de Mach<sup>10</sup>. Cette fois encore, la réponse du krigeage ordinaire avec noyau gaussien est la plus lisse et correspond le

10. Cette observation ne se généralise pas aux nombres de Mach plus faibles. Les  $C_{h,stag}$  obtenus par Singh et Schwartzentruber [56] pour des conditions  $M_\infty = 5$  montrent une forte diminution de l'amplitude de la courbe en  $S$  dans la direction des faibles Mach.

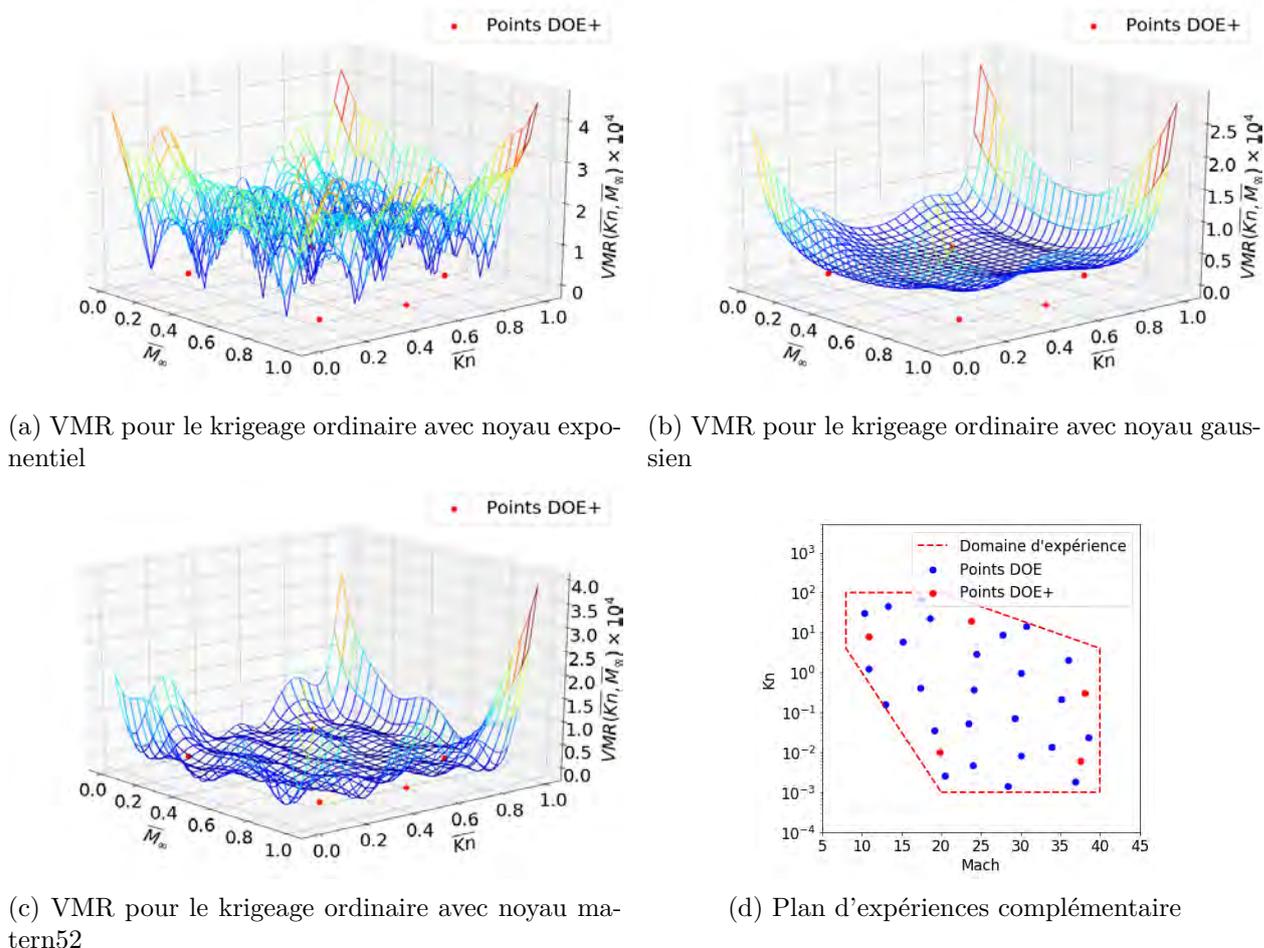


FIGURE 8.20 – VMR du coefficient  $C_{p,stag}$  pour différents modèles de krigeage (a)-(c) et plan d'expériences complémentaire (d).

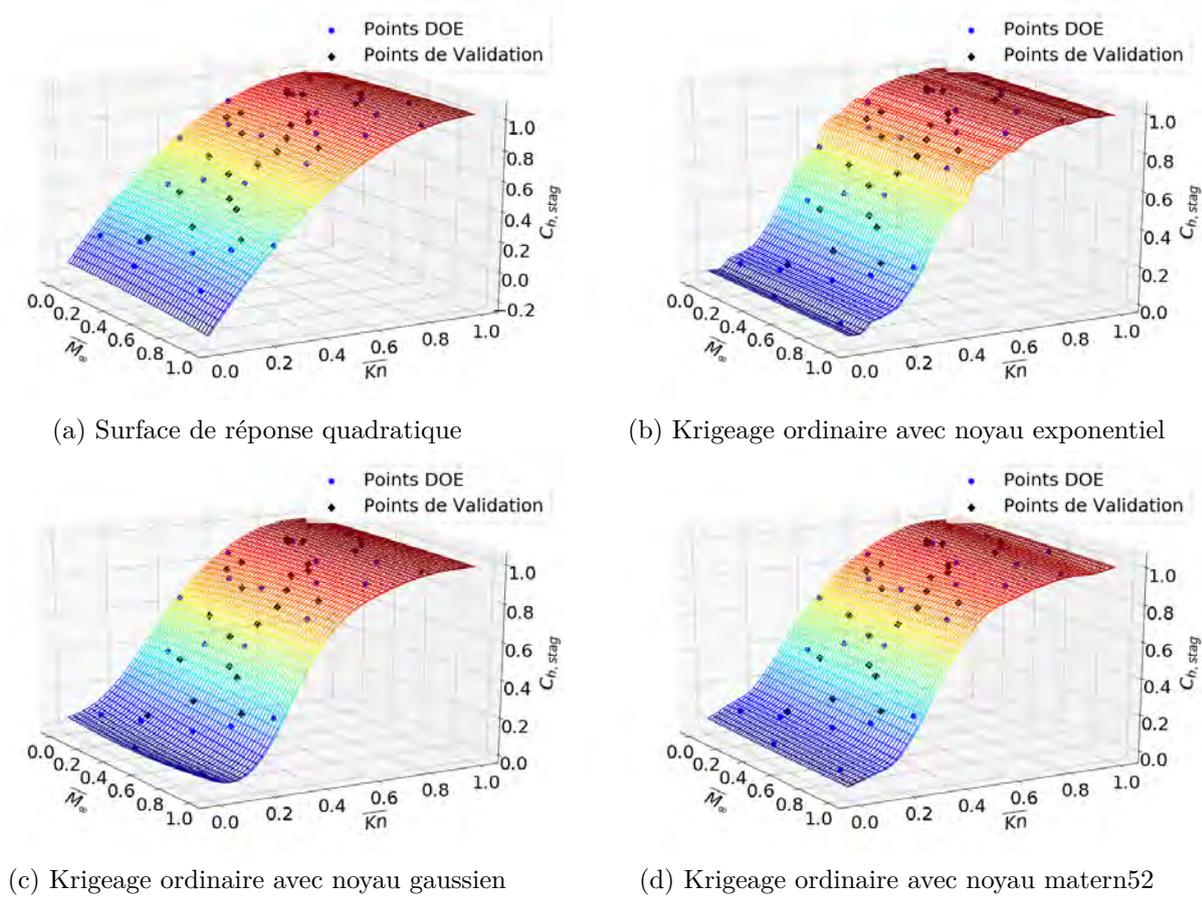
mieux à l'allure physique attendue tandis celle du krigeage avec noyau exponentiel est plus bruitée.

Méthode d'apprentissage	RMSE (%)	MRE (%)	RMSE	MRE(%)
	[Singh]	[Singh]	[BDD 3D]	[BDD 3D]
Krigeage ordinaire avec noyau gaussien	0.056	4.349	0.0541	6.046
Krigeage ordinaire avec noyau exponentiel	0.064	5.534	0.0529	5.789
Krigeage ordinaire avec noyau matern52	0.0576	4.499	0.0531	5.803
Surface de réponse linéaire	0.149	13.78	0.145	14.43
Surface de réponse quadratique	0.0657	5.68	0.0798	9.146

L'origine de la base de données de validation est indiquée entre crochets.

TABEAU 8.3 – Erreurs d'estimation du coefficient  $C_{h,stag}$  pour différents modèles réduits.

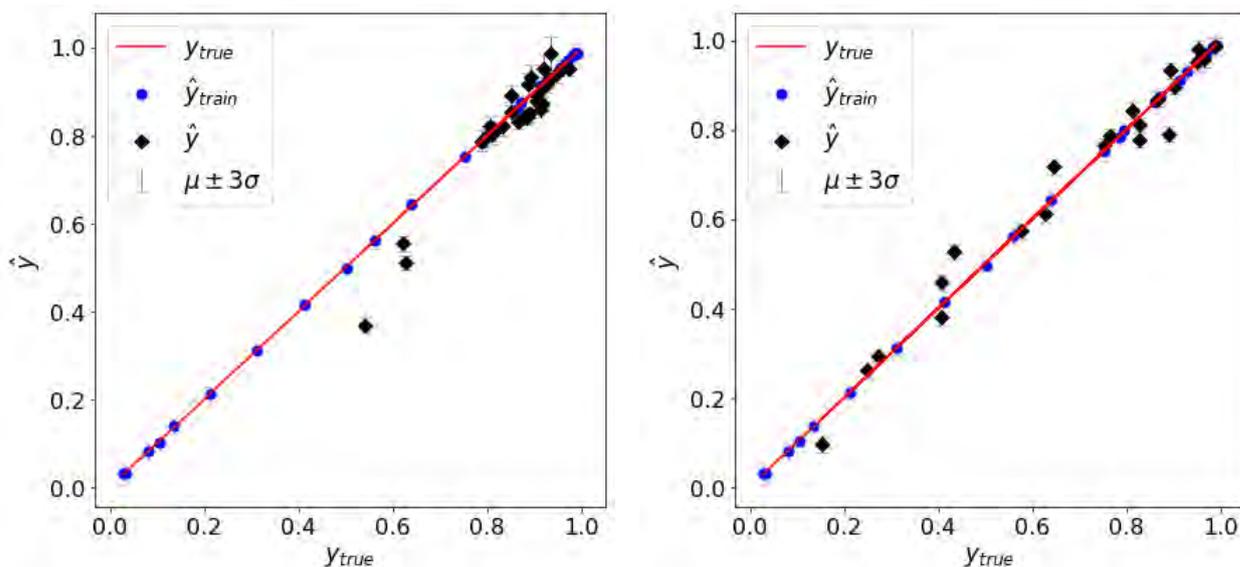
Pour la base de données de Singh et Schwartzentruber, il apparaît sur la Figure 8.22a que pour les conditions les moins raréfiées, l'écart entre la solution du krigeage avec noyau gaussien et leurs résultats de calcul se creuse fortement. Cependant, la sous-estimation des résultats par le krigeage ne se retrouve pas pour les résultats de la base de données 3D (Figure 8.22b). Ce comportement pourrait donc s'expliquer par une différence dans le choix des paramètres du modèle VHS. En effet, pour leurs calculs, Singh et Schwartzentruber ont utilisé le paramétrage de Bird qui conduit à des flux de chaleur plus importants que le paramétrage de Stephani lorsque  $Kn < 10^{-1}$ . Pour les deux bases de données, l'erreur relative moyenne est de l'ordre de 5% ce qui, compte tenu de la vaste plage de variation des  $C_{h,stag}$ , constitue un très bon niveau de précision.


 FIGURE 8.21 – Calcul du coefficient  $C_{h,stag}$  pour différents modèles d'apprentissage.

Finalement, le tracé de la VMR pour cette grandeur (Figure 8.23) montre un niveau d'incertitude significativement plus élevé pour le krigeage avec noyau exponentiel qu'avec les autres noyaux. Cette fois, les zones de VMR les plus importantes se trouvent principalement dans la région des faibles Knudsen. Ce résultat est assez cohérent puisque pour le plan d'expériences considéré, l'allure asymptotique  $C_{h,stag} \rightarrow 1$  lorsque  $Kn \rightarrow 100$  est bien assimilée par les différents modèles de krigeage. Pour les points rouges sur la Figure 8.20d, l'erreur moyenne relative pour le krigeage est inférieure à 4% ce qui confirme la qualité du plan d'expériences utilisé.

Enfin, comme pour le coefficient de pression au point d'arrêt, les calculs **ARES** permettent d'obtenir une estimation du coefficient de flux de chaleur au point d'arrêt pour les points issus de la base de validation BDD 3D. A la différence de la pression, plusieurs corrélations sont disponibles pour calculer le flux de chaleur au point d'arrêt en régime continu (cf. chapitre 7). Or, en régime raréfié, le flux de chaleur se calcule à partir des fonctions de raccord dépendantes des valeurs en régime continu et moléculaire libre, c'est pourquoi plusieurs corrélations ont été considérées. Pour les mêmes raisons que celles évoquées dans la section 2.5 du chapitre 7, seuls les points de vol pour lesquels les effets de catalycité sont négligeables ont été considérés. Les erreurs relatives moyennes ainsi obtenues varient entre 12.2% pour la corrélation de Johnston et Brandis, et jusqu'à 13.1% pour la corrélation de Sutton-Graves. Cette fois, l'erreur relative moyenne est un peu plus du double de l'erreur obtenue avec les modèles de krigeage et du même ordre que les modèles de surface de réponse.

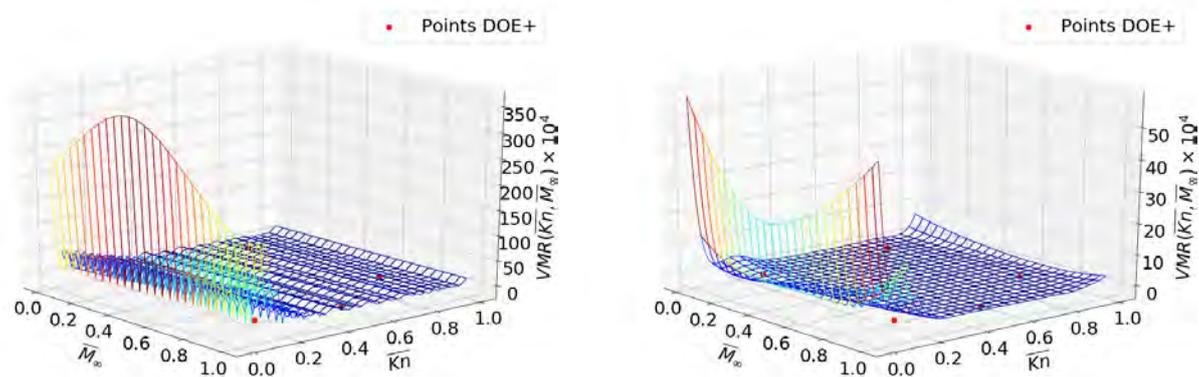
Les modèles réduits développés dans cette section constituent une première amélioration significative des modèles existants. En effet, les différents modèles de krigeage obtenus permettent de réduire par plus de 2 l'erreur commise sur les deux coefficients considérés en régime raréfié. Dans les deux cas, les modèles de krigeage avec noyaux gaussien et matern52 offrent un très bon niveau



(a) Résultats pour la base de données de Singh et Schwartzenuber [56]

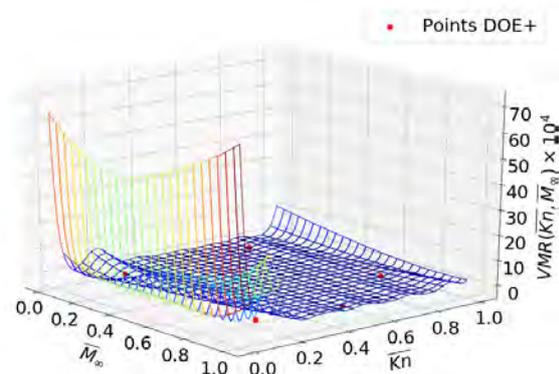
(b) Résultats pour la base numérique 3D

FIGURE 8.22 – Comparaison des  $C_{h,stag}$  estimés et réels pour le modèle de krigeage ordinaire avec noyau gaussien sur deux bases de validation.



(a) VMR pour le krigeage ordinaire avec noyau exponentiel

(b) VMR pour le krigeage ordinaire avec noyau gaussien



(c) VMR pour le krigeage ordinaire avec noyau matern52

FIGURE 8.23 – VMR du coefficient  $C_{h,stag}$  pour différents modèles de krigeage.

de précision avec une solution de forme physiquement cohérente. Ces modèles apparaissent donc comme l'alternative la plus pertinente pour prédire les coefficients de pression et de flux de chaleur

au point d'arrêt.

### 3 Développement de modèles réduits pour les distributions

Cette section porte sur le développement de réseaux de neurones pour le calcul des distributions des coefficients de pression, de frottement et de flux de chaleur. La structure est la même que pour la section précédente. Une première discussion présente le raisonnement à l'origine des choix de variables de design de chaque modèle. La deuxième partie présente la base de données de calculs 3D utilisée pour l'entraînement, la validation et le test. La dernière partie se consacre finalement à l'évaluation des modèles construits.

#### 3.1 Choix des variables de design

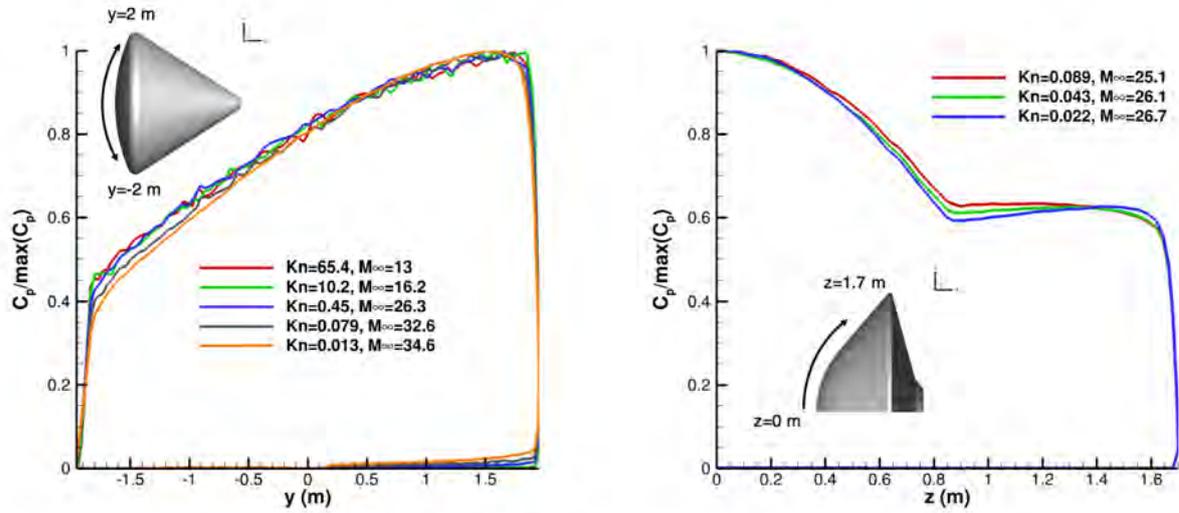
Dans un premier temps, l'analyse des modèles réduits existants pour le calcul des distributions des grandeurs pariétales et présentés dans le chapitre 7, peut permettre d'identifier les variables de design à considérer. En complément, l'analyse des résultats numériques DSMC obtenus (chapitres 5 et 6) avec le code **SPARTA** peut permettre de confirmer le choix des variables mais également d'en ajouter d'autres. Cette analyse de la base de données numériques est d'autant plus riche qu'elle est composée de véhicules géométriquement très différents (à l'image d'Apollo et de l'IXV) comme l'illustre le Tableau 8.4. L'objectif adopté ici est d'identifier les variables de design pertinentes pour le développement d'un modèle réduit à partir des données obtenues sur ce type de géométries.

Type de géométrie	Exemples de véhicules
<b>Sphère-cône</b>	OREX, Stardust, Ram-C, Pathfinder
<b>Véhicule planant</b>	IXV, Space Shuttle, Spaceliner
<b>Calotte sphérique</b>	Apollo, ARD, Orion, Crew Dragon

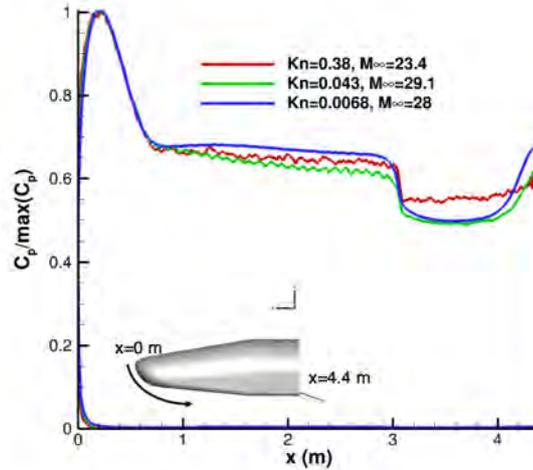
TABLEAU 8.4 – Typologie des véhicules de rentrée.

Pour le coefficient de pression en régime hypersonique continu, la méthode de Newton modifiée calcule la valeur de la pression en chaque point de l'objet à partir de la valeur du coefficient de pression au point d'arrêt ( $C_{p,stag}$ ) et de l'incidence locale de la paroi par rapport à l'écoulement infini amont ( $\alpha$ ). En régime moléculaire libre, l'expression de la distribution de pression (équation 7.48) dépend de variables atmosphériques ( $T_\infty$ ,  $\rho_\infty$ ,  $U_\infty$ ), du coefficient d'accommodation normale ( $\sigma_n$ ) et de l'angle d'incidence locale ( $\alpha$ ). Cette dépendance commune à  $\alpha$  dans les régimes limites suggère donc que ce paramètre a très probablement un rôle important en régime transitionnel. Quant au paramètre  $C_{p,stag}$ , il apparaît explicitement dans la méthode de Newton modifiée. Dans le cas limite où  $\alpha = 90^\circ$ , la formule analytique montre le lien entre les variables atmosphériques et la pression au point d'arrêt. Cette observation indique que, dans les deux cas, le paramètre  $C_{p,stag}$  permet d'établir le niveau de pression pour le régime considéré. Sa prise en compte par le modèle semble donc nécessaire. Concernant le coefficient d'accommodation normale, les résultats du chapitre 6 ont montré qu'avec le modèle de Maxwell (*i.e.* avec  $\sigma_n \equiv w$ ) son importance diminue avec  $Kn$ . Il serait théoriquement possible d'ajouter un coefficient  $\sigma_n$  aux paramètres du modèle. Toutefois, l'apprentissage de son influence en fonction du degré de raréfaction indiqué par  $C_{p,stag}$  n'est pas trivial en régime raréfié. En effet, les résultats des modèles de krigeage (Figure 8.18) montrent que lorsque  $Kn > 1$ , il n'y a pas unicité du coefficient  $C_{p,stag}$  pour un niveau de raréfaction donné. De plus, la prise en compte de l'accommodation nécessite une base de données considérablement plus riche (simulations avec différents coefficients d'accommodation  $w$ ). Ce paramètre n'a donc pas été pris en compte en première approche. Les données de rentrée véhiculaires permettent de fournir des éléments de réponse quant à un besoin éventuel de paramètres complémentaires. Lorsque  $Kn < 10^{-1}$ , la Figure 8.24 fait apparaître un léger raidissement de la distribution et une légère augmentation de la distribution de  $C_p$  à l'ombre lorsque  $Kn$  diminue. Dans de telles conditions, la dépendance de  $C_{p,stag}$  au nombre de Mach est beaucoup plus faible ce qui suggère qu'il constitue

un bon indicateur du niveau de raréfaction. De plus, aucun effet de distance au point d'arrêt ou de rupture de courbure locale n'est observé. Par conséquent, l'ajout de variables supplémentaires ne semble pas nécessaire et un modèle de forme  $C_p = f(C_{p,stag}, \alpha)$  a donc été considéré.



(a) Apollo 6,  $\alpha = -25^\circ$ ,  $h \in [95; 200]$  km,  $U_\infty = 9.6$  km/s (b) OREX,  $\alpha = 0^\circ$ ,  $h \in [96.8; 105]$  km,  $U_\infty \simeq 7.5$  km/s



(c) IXV,  $\alpha \simeq 45^\circ$ ,  $h \in [90; 110]$  km,  $U_\infty \simeq 7.5$  km/s

FIGURE 8.24 – Evolution des coefficients de pression normalisés par leurs valeurs maximales, le long de la ligne centrale de plusieurs véhicules, sur une portion de leurs trajectoires de rentrée.

Pour le coefficient de flux de chaleur en régime continu, les formules de Vérant-Lefrançois (équation 7.58) et de **SCARAB** (équation 7.57) dépendent de l'angle d'incidence locale ( $\alpha$ ) et du coefficient de flux de chaleur au point d'arrêt ( $C_{h,stag}$ ). La formule de Vérant-Lefrançois dépend également de la courbure locale via le ratio  $R_n/R_{n,loc}$ . En régime moléculaire libre (équation 7.45), comme pour la distribution de pression, la distribution du flux de chaleur dépend de l'incidence locale, d'un coefficient d'accommodation et de variables atmosphériques. Pour les mêmes raisons que celles évoquées précédemment, les paramètres  $\alpha$  et  $C_{h,stag}$  doivent donc être inclus dans le nouveau modèle. Pour l'accommodation, cette fois les résultats des modèles de krigeage (Figure 8.21) montrent l'unicité du coefficient  $C_{h,stag}$  à un  $Kn$  donné. Ce coefficient constitue donc une mesure du niveau de raréfaction et l'apprentissage de l'influence du coefficient d'accommodation en

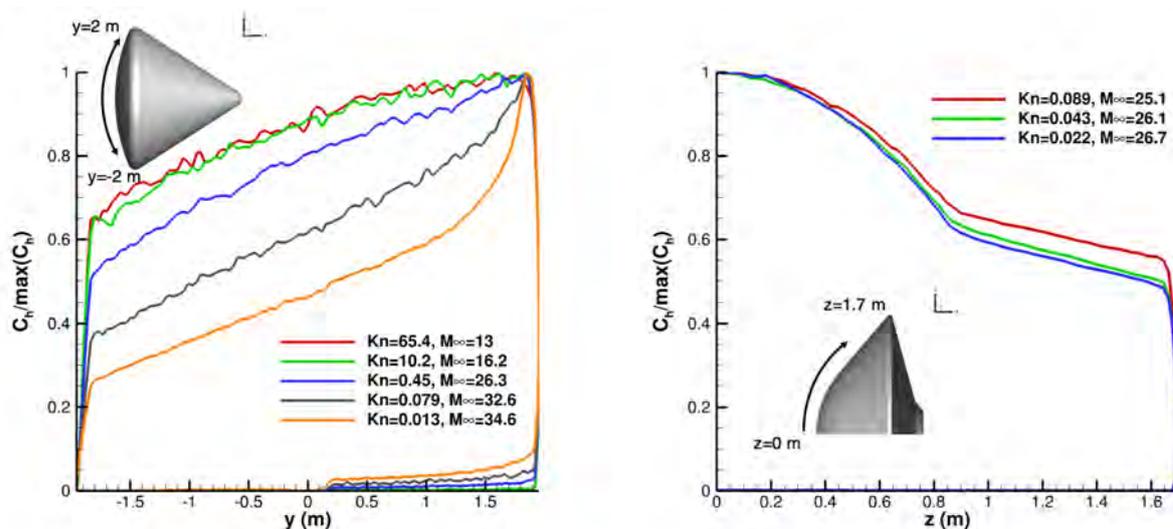
fonction du degré de raréfaction devrait alors être envisageable dans ce cas. Toutefois, pour garder une base données de taille raisonnable, ce paramètre n'a pas été considéré en première approche. Par ailleurs, la Figure 8.25 illustre l'évolution des  $C_h$  normalisés par la valeur maximale du coefficient de flux de chaleur, pour différents points de vol de la trajectoire de différents véhicules. Les valeurs sont celles obtenues le long de la ligne centrale de ces véhicules. Pour Apollo et l'IXV, on observe l'infléchissement de la courbe lorsque le niveau de raréfaction diminue et une diminution de la valeur du flux de chaleur à mesure que la distance au point d'arrêt augmente. De manière générale, ces résultats montrent que les phénomènes physiques mis en jeu varient en fonction du niveau de raréfaction. En particulier pour Apollo (Figure 8.25a), en régime proche continu ( $Kn = 0.079$  et  $Kn = 0.013$ ) et dans la zone de détente proche de l'épaule, l'accélération de l'écoulement entraîne l'apparition d'un pic du flux de chaleur en  $y \rightarrow 2$  m. La prise en compte de ces comportements nécessite donc qu'une certaine mesure du niveau de raréfaction, de la courbure locale et de la distance au point d'arrêt soit incluse parmi les paramètres du modèle. Cette observation confirme la pertinence d'inclure les paramètres  $C_{h,stag}$ ,  $R_n/R_{n,loc}$  et  $d_{stag}$ . Néanmoins, pour garantir la stabilité du modèle, il faut s'assurer que ce ratio de courbure ait une valeur finie au point d'arrêt ce qui, selon l'angle d'incidence, n'est pas toujours le cas pour des géométries présentant des surfaces planes, comme sur l'intrados ou le culot de l'IXV (où  $R_n \rightarrow \infty$ ). Un limiteur de la forme :

$$\left[ \frac{R_n}{R_{n,loc}} > 10 \right] \Rightarrow \left[ \frac{R_n}{R_{n,loc}} = 10 \right], \quad (8.44)$$

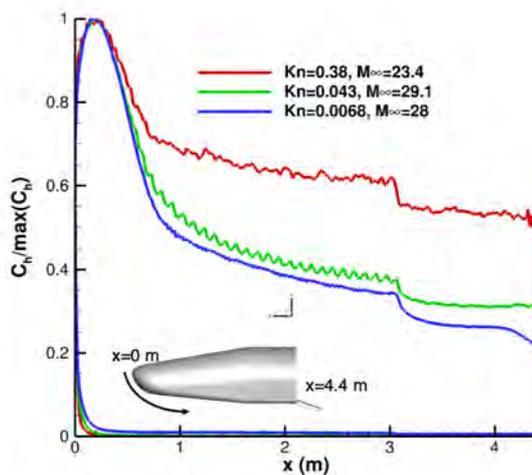
a donc été utilisé pendant la phase de pré-traitement des données. Pour ce qui est de la distance au point d'arrêt, il serait possible d'utiliser une abscisse curviligne ou une distance euclidienne simple  $d_{stag}$ . En première approche, c'est la deuxième option qui a été testée et les conséquences de ce choix sont discutées dans la partie résultats. Au final, le modèle retenu est de la forme  $C_h = f(C_{h,stag}, \alpha, d_{stag}, R_n/R_{n,loc})$ .

Pour terminer, le coefficient de frottement constitue une variable a priori plus complexe à traiter. En régime continu, aucun modèle classique générique ne permet de calculer rapidement cette distribution qui est simplement considérée comme nulle. En régime moléculaire libre, une formulation analogue à celle de la pression existe pour le frottement (équation 7.49). Cette formulation dépend de l'incidence locale et de plusieurs variables atmosphériques et a la particularité de s'annuler au point d'arrêt caractérisé par l'angle  $\alpha = 90^\circ$ . Par conséquent, l'utilisation d'une variable  $C_{f,stag}$  n'est pas possible mais l'inclusion du paramètre  $\alpha$  est justifiée. En parallèle, l'observation des courbes sur la Figure 8.26 montre, pour Apollo par exemple, une dépendance forte de la valeur de  $C_f$  au niveau de raréfaction. De même, pour l'IXV, entre le cas le plus raréfié et les deux autres points de vol représentés, un effet d'amplitude considérable est visible sur une grande partie de l'intrados ( $x < 4$  m). Pour cette raison, le coefficient  $C_{h,stag}$  a été considéré comme mesure du niveau de raréfaction. Les résultats pour l'IXV et OREX semblent indiquer une légère diminution du frottement lorsque la distance au point d'arrêt augmente. Elle reste toutefois marginale puisque pour l'IXV par exemple, cet effet s'estompe à 90 km ( $Kn = 0.0068$ ). La prise en compte du paramètre  $d_{stag}$  a donc été évaluée et n'a pas permis de confirmer sa pertinence pour les géométries considérées. Concernant l'importance de la courbure, l'observation des résultats pour les véhicules OREX ( $x \rightarrow 1$  m) et IXV ( $x \rightarrow 0.6$  et 3 m) montrent, pour les cas les moins raréfiés, un léger pic au niveau des ruptures de courbure ce qui nous a poussés à choisir le ratio  $R_n/R_{n,loc}$  parmi les variables de design. Finalement, le modèle retenu est de la forme  $C_f = f(C_{h,stag}, \alpha, R_n/R_{n,loc})$ .

A ce stade, on peut faire les remarques suivantes. Tout d'abord, pour les différentes formulations proposées, aucune n'emploie explicitement le paramètre  $Kn$  comme variable de design. En effet, l'objectif étant de s'affranchir d'une telle dépendance, le niveau de raréfaction est représenté par les coefficients au point d'arrêt appropriés ( $C_{p,stag}$  ou  $C_{h,stag}$ ). Ensuite, les modèles proposés ici consistent en trois modèles de régression scalaire. Par conséquent, n'importe quelle méthode d'apprentissage pourrait être a priori utilisée. Toutefois, les essais menés avec les simulations pré-



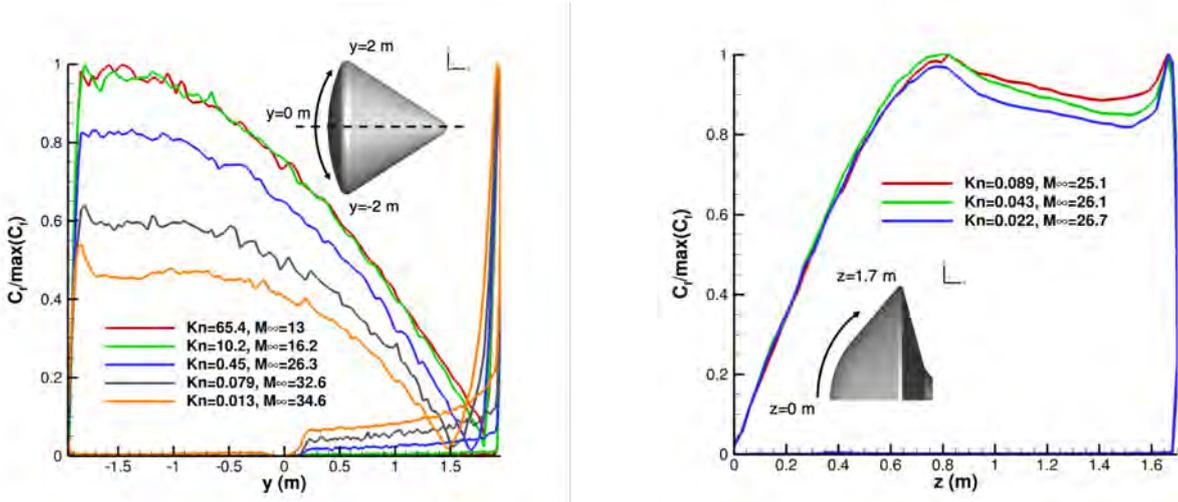
(a) Apollo 6,  $\alpha = -25^\circ$ ,  $h \in [95; 200]$  km,  $U_\infty = 9.6$  km/s  
 (b) OREX,  $\alpha = 0^\circ$ ,  $h \in [96.8; 105]$  km,  $U_\infty \simeq 7.5$  km/s



(c) IXV,  $\alpha \simeq 45^\circ$ ,  $h \in [90; 110]$  km,  $U_\infty \simeq 7.5$  km/s

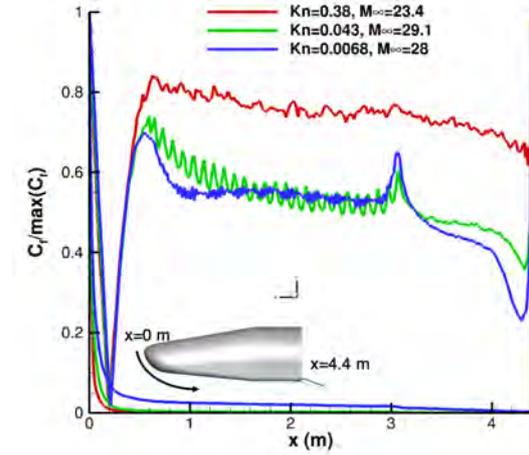
FIGURE 8.25 – Evolution des coefficients de flux de chaleur normalisés par leurs valeurs maximales, le long de la ligne centrale de plusieurs véhicules, sur une portion de leurs trajectoires de rentrée.

liminaires (cf. chapitres 5 et 6) ont mis en évidence la meilleure capacité des réseaux de neurones à gérer une base de données constituée de plusieurs milliers de points et à restituer plus fidèlement les comportements complexes relatifs aux coefficients  $C_h$  et  $C_f$ .



(a) Apollo 6,  $\alpha = -25^\circ$ ,  $h \in [95; 200]$  km,  $U_\infty = 9.6$  km/s

(b) OREX,  $\alpha = 0^\circ$ ,  $h \in [96.8; 105]$  km,  $U_\infty \simeq 7.5$  km/s



(c) IXV,  $\alpha \simeq 45^\circ$ ,  $h \in [90; 110]$  km,  $U_\infty \simeq 7.5$  km/s

FIGURE 8.26 – Evolution des coefficients de frottement normalisés par leurs valeurs maximales, le long de la ligne centrale de plusieurs véhicules, sur une portion de leurs trajectoires de rentrée.

## 3.2 Construction d'une base de données 3D

### 3.2.1 Génération du plan d'expériences

Contrairement aux modèles de la section 2 dont les variables de design sont globales ( $Kn, M_\infty$ ), les paramètres d'entrée considérés pour la modélisation des distributions de  $C_p$ ,  $C_h$  et  $C_f$  sont locaux. Une conséquence immédiate de cette différence est qu'au lieu d'obtenir un point d'apprentissage par simulation numérique, chaque simulation fournit autant de points d'apprentissage que d'éléments surfaciques. En effet, à chaque élément correspond un jeu de valeurs  $(\alpha, d_{stag}, R_n/R_{n,loc})$ . Par contre, chaque modèle dépend également d'un coefficient au point d'arrêt  $(C_{p,stag}, C_{h,stag})$ , dont chaque simulation ne donne qu'une seule valeur. Les dimensions de l'espace de design relatives aux paramètres géométriques sont donc beaucoup mieux explorées que celles relatives aux coefficients au point d'arrêt. Les conséquences de cette particularité sont discutées dans la partie résultats.

Dans ces conditions, la construction d'une base de données la plus complète possible, sous contrainte d'un nombre raisonnable de simulations, a été envisagée de deux manières. La première approche consiste à construire la base de sorte que l'exploration des différentes dimensions soit la

plus homogène possible. La deuxième approche vise plutôt à l'élaboration d'une base offrant une représentativité la plus large possible des phénomènes à assimiler. Du fait de la grande difficulté à faire varier l'ensemble des paramètres géométriques de façon régulière et à travers l'intégralité de leur plage de variation ( $\alpha \in [-90^\circ; 90^\circ]$ ,  $R_n/R_{n,loc} \in [0; 10]$ ,  $d_{stag} \in [0; 4.4]$  m) pour les trois géométries étudiées (Apollo, OREX, IXV), le choix s'est porté sur la deuxième option.

La base de données 3D a donc été construite à partir de 27 simulations choisies par tirage pseudo-aléatoire d'un véhicule, d'une altitude ( $h \in [95; 150]$  km), d'une vitesse ( $U_\infty \in [6; 10]$  km/s) et d'un angle d'incidence ( $\alpha \in [0^\circ; 180^\circ]$ ). Pour les véhicules considérés, cet intervalle d'altitude permet une bonne couverture du régime transitionnel tout en garantissant le respect des critères de précision des calculs DSMC. De même, l'intervalle de vitesse vise à représenter les différentes vitesses de rentrée propres aux conditions de vol d'intérêt, c'est-à-dire avec des vitesses orbitales réalistes et où les effets d'ionisation sont négligeables. Concernant l'intervalle d'angle d'incidence, pour des véhicules de rentrée, des valeurs aussi grandes n'ont a priori pas de sens d'un point de vue trajectographie mais ce choix a pour but d'améliorer la robustesse du modèle grâce à une exploration plus complète de l'espace de design. Des variations de dérapage auraient également permis d'enrichir l'exploration de l'espace mais à un coût de calcul déraisonnable (perte de la symétrie).

Les données atmosphériques correspondantes ont ensuite été extraites du modèle **Jacchia77** (modèle global le plus récent). En complément, trois simulations issues des calculs préliminaires (chapitre 5) ont été utilisées pour compléter la base d'entraînement constituée d'un total de 30 simulations. La base de données d'apprentissage ainsi définie est présentée dans le Tableau 8.5 et la distribution des points d'apprentissage est illustrée sur la Figure 8.27. Dans le tableau, les  $Kn$  non-indiqués correspondent aux cas où le point d'arrêt est situé sur une surface plane en incidence, où une courbure locale équivalente n'est pas connue. Conformément à la discussion sur les bases de données pour les réseaux de neurones (fin de la section 1.3), un découpage triple entraînement-validation-test a été choisi. Pour la validation et le test, respectivement 5 et 8 simulations ont été utilisées. Les cas sélectionnés pour ces actions sont indiqués dans le Tableau 8.6. Comme indiqué au début du chapitre, pour répondre au problème de répétabilité, les algorithmes sont testés plusieurs fois et seul le réseau offrant les meilleures performances est conservé. Ainsi, il est nécessaire de définir une base de données de validation qui permette de sélectionner les modèles les plus précis, y compris sur des configurations (géométries, conditions de vol, phénomènes physiques) particulières. Les simulations de la base de validation sont alors choisies pour que chaque véhicule y soit représenté dans des conditions de vol caractéristiques de leur rentrée. La présence de différents points de vol d'Apollo a pour but de favoriser la sélection d'un modèle ayant assimilé les effets de raréfaction sur les dépendances aux différents paramètres de design géométriques. Pour la base de test, là encore les véhicules de la base d'entraînement sont tous représentés dans leurs conditions de rentrée et deux points de vol d'Apollo sont utilisés pour tester l'assimilation des effets de raréfaction. Ensuite, quatre autres géométries dites « nouvelles » sont utilisées pour évaluer la capacité de généralisation des modèles construits. En particulier, le Spaceliner (un véhicule hypersonique d'une longueur de 60 m) sert à mettre en évidence les limites des modèles construits pour une géométrie de grande taille.

### 3.2.2 Simulation numérique du plan d'expériences

Pour les nouvelles simulations, une procédure numérique analogue à celle des calculs 2D a été utilisée. Ainsi, pour chaque calcul, les critères numériques suivants ont été imposés à minima :  $\Delta t \leq \min(\tau_{coll})/5$ ,  $\Delta x \leq \lambda_\infty/4$  avec raffinement adaptatif de niveau 4 et  $N_{p/c} \geq 10$  dans les éléments en amont de la géométrie. Pour les calculs 3D, le raffinement adaptatif peut vite conduire à un nombre de particules par cellule trop faible et nécessiter un nombre de particules total exagérément grand, c'est pourquoi seules des altitudes  $h \geq 95$  km ont été simulées. Par ailleurs, l'absence de dérapage a permis de réduire de moitié la taille des domaines de calcul pour l'ensemble du plan d'expériences. Finalement, pour limiter les effets du bruit statistique qui apparaissent lorsque la taille des mailles volumiques est trop grande par rapport aux mailles surfaciques, une attention

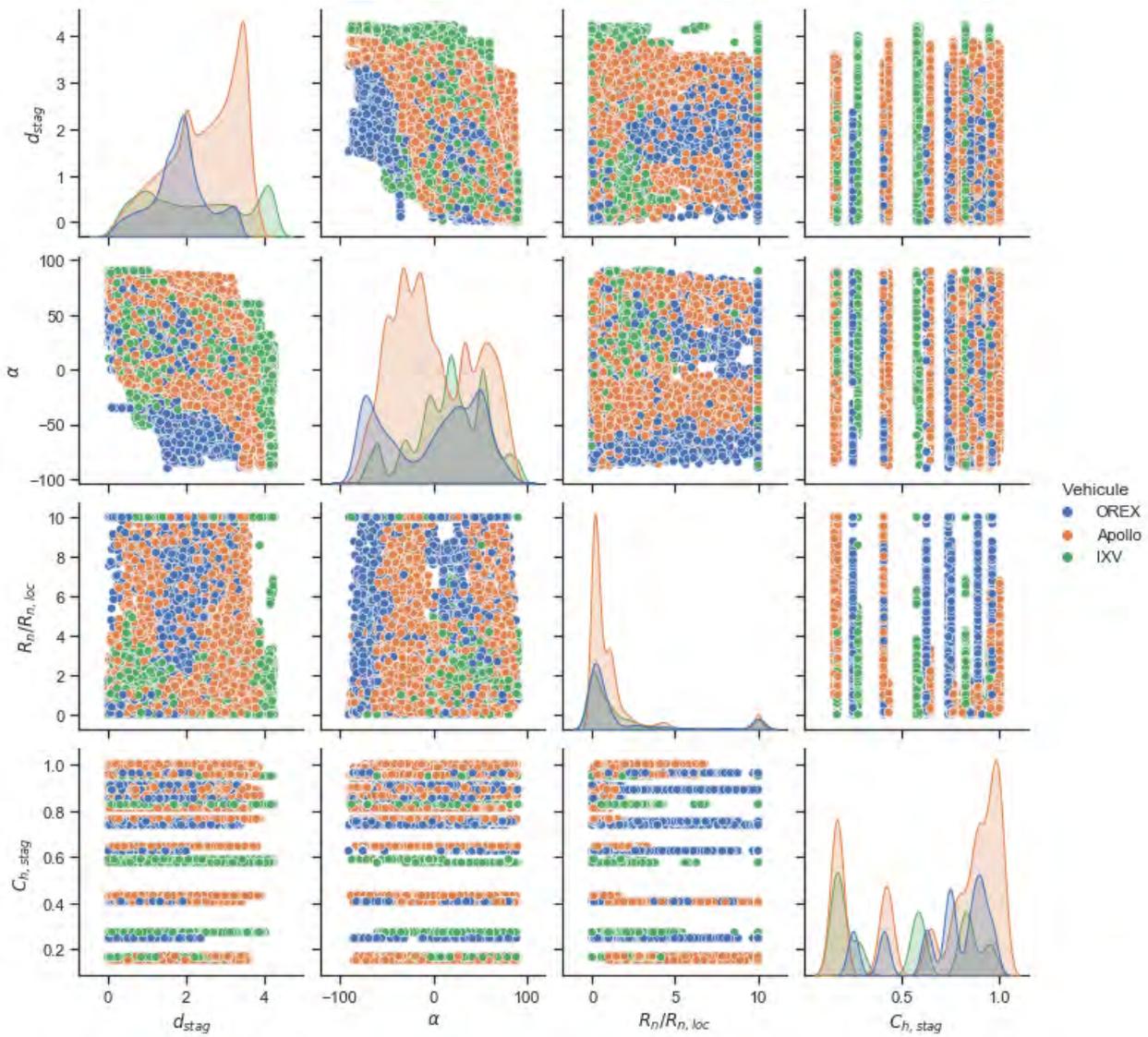


FIGURE 8.27 – Représentation de l’exploration de l’espace de design avec les simulations de la base d’entraînement.

Id	Véhicule	Altitude (km)	Vitesse (km/s)	Angle d'attaque	$Kn$	$M_\infty$
1	IXV	95	9.4	60	$2.1 \times 10^{-2}$	33.9
2	IXV	100	7.1	170	-	25.1
3	IXV	100	7.4	30	$7.5 \times 10^{-2}$	26.2
4	IXV	110	9.3	20	$4 \times 10^{-1}$	28.6
5	IXV	120	6.9	180	$3.9 \times 10^{-1}$	17
6	IXV	130	7.0	30	5.4	14.6
7	*IXV	90	7.46	47	$7.9 \times 10^{-3}$	28.2
8	OREX	100	8.5	130	-	30.1
9	OREX	105	6.2	100	-	21.1
10	OREX	140	8.9	110	-	16.4
11	OREX	95	7.5	20	$1.6 \times 10^{-2}$	27.1
12	OREX	110	9.5	10	$2.5 \times 10^{-1}$	29.2
13	OREX	120	8.0	40	$4.1 \times 10^{-1}$	19.8
14	OREX	100	8.5	30	$4.2 \times 10^{-2}$	30.1
15	OREX	105	6.2	0	$1 \times 10^{-1}$	21.1
16	OREX	140	8.9	10	6.6	16.4
17	Apollo	95	7.6	100	$5.8 \times 10^{-2}$	27.4
18	Apollo	105	6.0	90	$3.7 \times 10^{-1}$	20.4
19	Apollo	105	9.7	140	$5.6 \times 10^{-1}$	32.9
20	Apollo	110	8.2	80	$9.3 \times 10^{-1}$	25.2
21	Apollo	130	9.2	150	18	19.2
22	Apollo	140	7.4	120	6.2	13.7
23	Apollo	150	9.5	40	35.2	16
24	Apollo	120	9.0	40	3.2	22.2
25	Apollo	95	7.0	20	$4.7 \times 10^{-3}$	25.3
26	Apollo	105	8.0	30	$1.8 \times 10^{-1}$	27.2
27	Apollo	105	6.5	0	$2.9 \times 10^{-2}$	22.1
28	Apollo	110	8.6	180	1.5	26.5
29	*Apollo	200	9.6	-25	65.4	13
30	*Apollo	95	8.3	-19.4	$4.0 \times 10^{-3}$	30

\*Simulations réalisées dans le cadre des études sur Apollo et l'IXV et présentées dans les chapitres 5 et 6.

TABLEAU 8.5 – Cas inclus dans la base de données d'entraînement des réseaux de neurones.

particulière a été portée, lors de la réalisation des nouveaux maillages, à la construction de la base de données. Pour le cas particulier de l'IXV dont l'effet de l'inclinaison des gouvernes se manifeste sur les grandeurs surfaciques, une géométrie sans gouverne a été construite. De même, pour éviter que cet effet présent pour le calcul préliminaire ne pollue la base d'entraînement, seule la géométrie tronquée ( $x < 3.4$  m) a été considérée pour ce cas.

Au niveau des modèles physiques, là aussi un paramétrage identique à celui des calculs 2D a été utilisé pour les nouvelles simulations. Comme indiqué dans la partie 2 (section 2.2.2), on notera toutefois que certaines simulations préliminaires réutilisées ici ont été obtenues avec le paramétrage de Bird pour le modèle VHS. Par conséquent, ces calculs présentent des flux de chaleur plus élevés que ceux obtenus dans les mêmes conditions avec le paramétrage de Stephani. Néanmoins, cet aspect n'est a priori pas problématique.

Id	Véhicule	Altitude (km)	Vitesse (km/s)	Angle d'attaque	$Kn$	$M_\infty$
Validation						
A	*IXV	105	7.5	45	$1.3 \times 10^{-1}$	26.9
B	*OREX	101	7.5	0	$4.3 \times 10^{-2}$	26.1
C	*Apollo	105	8.3	-25.2	$9.6 \times 10^{-2}$	28.1
D	*Apollo	115	9.6	-25	$4.5 \times 10^{-1}$	26.3
E	*Apollo	170	9.6	-25	25.1	14.4
Test						
I	*Apollo	100	8.3	-24.6	$3.3 \times 10^{-2}$	29.3
II	*Apollo	130	9.6	-25	2.6	20.1
III	*IXV	115	7.4	47	$9.1 \times 10^{-1}$	20.3
IV	*OREX	105	7.5	0	$8.9 \times 10^{-2}$	25.1
V	Sphere	110	8	0	$3.3 \times 10^{-1}$	24.6
VI	Ram-C	105	10	0	$8.4 \times 10^{-1}$	34
VII	Orion	100	7.6	-25	$4.5 \times 10^{-2}$	26.9
VIII	Spaceliner	150	7	45	70.3	16

\*Simulations réalisées dans le cadre des études sur Apollo et l'IXV et présentées dans les chapitres 5 et 6.

TABLEAU 8.6 – Cas inclus dans la base de données de validation et de test des réseaux de neurones.

### 3.3 Résultats

On s'intéresse maintenant aux résultats obtenus avec les différents réseaux de neurones construits avec la librairie open-source **keras** écrite en Python [33]. Compte tenu de la structure spécifique des bases de données considérées, pour tous les réseaux, l'entraînement a été accéléré en considérant une sélection aléatoire de 50% des données d'apprentissage seulement. Cette procédure permet d'estimer rapidement le potentiel des modèles sans compromettre leur précision. Pour chaque modèle ainsi construit, la précision a ensuite été évaluée par comparaison avec les résultats DSMC. Les résultats sont donc présentés de la manière suivante. D'abord les distributions prédites par les réseaux de neurones sont comparées aux contours issus des simulations DSMC. Ensuite, les distributions le long de la ligne centrale sont comparées à celles estimées avec les modèles présents dans **ARES**. Pour distinguer la capacité des modèles à restituer les distributions indépendamment de la valeur au point d'arrêt, la comparaison des méthodes se fait sous forme normalisée. On notera finalement que pour cette section, l'angle  $\theta$  est utilisé pour décrire la position le long de la sphère et l'angle  $\alpha$  représente l'incidence locale dont dépendent les trois modèles. Ainsi pour les résultats de chaque coefficient (Figures 8.28 à 8.33), la distribution à la paroi est visualisée en 3D (colonne de gauche) et le long de la ligne centrale de l'objet considéré (colonne de droite).

#### 3.3.1 Résultats pour le coefficient $C_p$

Pour rappel, le premier réseau de neurones est un modèle de type  $C_p = f(C_{p,stag}, \alpha)$ . Du fait de la simplicité de cette formulation et de la régularité du coefficient de pression dans les conditions considérées, on ne s'attend pas, a priori, à ce que la précision du réseau surpasse celle des méthodes existantes. Les résultats présentés ici ont été obtenus avec un réseau comportant 3 couches cachées [32, 64, 128] et des fonctions d'activation **ReLU**. L'entraînement s'est fait sur 20 epochs avec un optimiseur de type Adam, un pas d'apprentissage  $\lambda = 1 \times 10^{-4}$  et des batchs de taille 64. Comme préconisé par Chollet [33], les chances d'overfitting sont réduites par une régularisation  $l2$  aussi appelée *weight decay* activée pour chaque couche cachée. Pour une telle régularisation, la pénalisation de la fonction de coût est proportionnelle au carré des valeurs des poids du réseau.

La Figure 8.28 (page 251) illustre les résultats pour les 4 simulations préliminaires (Cas I, II, III et IV du Tableau 8.6) de la base de test. Pour le cas Apollo à 100 km (cas I), on constate

au niveau des contours que la région d'arrêt caractérisée par la région des  $C_p$  les plus élevés n'est pas adéquatement restituée par le réseau. Cette discordance vient du fait que, par construction, le modèle réduit place le point d'arrêt dans la zone où l'angle d'incidence locale  $\alpha$  est le plus proche d'une valeur de  $90^\circ$ . Dans ce cas, cette détection du point d'arrêt ne correspond pas au résultat DSMC. La différence principale entre les deux modèles réduits se situe dans l'allure de la courbe qui est trop linéaire pour le cas du réseau. Pour le cas Apollo à 130 km (cas II), on note cette fois l'excellente correspondance entre les modèles (**ARES** et réseau de neurones) et les résultats DSMC.

Pour le cas de l'IXV, l'absence d'ambiguïté par rapport à la position du point d'arrêt conduit à un bon accord entre les différents résultats. On notera le fait que les deux modèles réduits produisent une distribution lisse là où le bruit statistique du calcul DSMC se traduit par un creux physiquement absurde au point d'arrêt. La comparaison des deux modèles réduits met en avant une tendance à la surestimation pour **ARES** et une tendance à la sous-estimation pour le réseau.

Pour le véhicule OREX, les deux modèles réduits donnent des résultats équivalents. Comme attendu, l'allure courbe du  $C_p$  le long de la partie conique ( $\alpha$  constant) n'est pas restituée par les modèles réduits.

La Figure 8.29 (page 252) montre les résultats pour les 4 « nouvelles » géométries sur lesquelles le réseau n'a pas été entraîné (Cas V, VI, VII et VIII du Tableau 8.6). Le cas le plus élémentaire est celui de la sphère qu'il est fondamental de savoir modéliser précisément. Pour cette géométrie, les résultats montrent un très bon accord entre la solution DSMC et la prédiction du réseau. Par rapport à **ARES**, on peut noter une légère différence dans l'estimation du  $C_p$  dans la région  $\theta \in [60^\circ; 90^\circ]$  où le réseau prédit la distribution de façon plus précise.

Pour le sphère-cône de  $9^\circ$  correspondant au véhicule Ram-C, un très bon accord est encore obtenu entre les résultats des modèles (**ARES** et réseaux de neurones) et DSMC. Pour **ARES**, la tendance est à une légère sous-estimation sur la partie conique et à une légère sur-estimation pour le réseau.

Pour le cas d'Orion à 100 km, le même comportement que pour le cas Apollo à 100 km est observé. Cette fois encore, avec le modèle du réseau de neurone, l'allure est trop linéaire et le point d'arrêt n'est pas situé au bon endroit. Par rapport au modèle **ARES**, la seule amélioration offerte par le réseau se situe au niveau de l'épaule, dans la zone à l'ombre ( $z \in [-2.5; -1]$  m), où un  $C_p$  non nul est capturé par le réseau.

Finalement, pour le cas particulier du Spaceliner, les contours montrent une différence d'amplitude importante entre le réseau et la solution DSMC. Cette différence provient du maillage relativement grossier du Spaceliner. Ainsi, pour les résultats DSMC, la valeur  $C_{p,stag}$  est située au niveau d'un élément d'incidence locale  $\alpha \simeq 76^\circ$ . A cette position, le  $C_p$  prédit par le réseau est donc considérablement plus faible (écart relatif de 9%) que la valeur  $C_{p,stag}$  adéquatement restituée lorsque  $\alpha \rightarrow 90^\circ$ . Au niveau de l'allure, on note toutefois un excellent accord entre la solution DSMC et le réseau contrairement au résultat d'**ARES**.

### 3.3.2 Résultats pour le coefficient $C_h$

Le second réseau de neurones est un modèle du type  $C_h = f(C_{h,stag}, \alpha, d_{stag}, R_n/R_{n,loc})$ . L'architecture choisie est composée de 4 couches cachées [32, 64, 128, 256]. Les fonctions d'activation sont encore de type **ReLU**, l'optimiseur est de type Adam et le pas d'apprentissage vaut  $\lambda = 1 \times 10^{-3}$ . L'entraînement est effectué sur des batchs de taille 128 et sur 20 epochs. Une régularisation  $l2$  est aussi activée pour chaque couche cachée.

Comme indiqué dans la section 2.5 du chapitre 7, les comparaisons entre **ARES** et les calculs DSMC sont légitimes seulement si les effets de catalycité sont négligeables. Pour certains points de vol de la base de test, cet aspect n'est pas vérifié et les résultats DSMC sont seulement comparés aux résultats du réseau.

La Figure 8.30 (page 253) donne les résultats pour les quatre simulations préliminaires de la base de test. Pour le cas Apollo à 100 km, les contours montrent l'excellent accord entre l'amplitude du pic de flux de chaleur de la solution DSMC et celle prédite par le réseau. Plus bas sur la

portion sphérique, on note un certain décalage dans l’allure des courbes de  $C_h$ . Cette tendance peut être visualisée plus précisément à l’aide du graphique représentant l’évolution du flux de chaleur adimensionné le long de la ligne centrale. Malgré cela, l’accord entre les résultats DSMC et ceux du réseau de neurones est correct et offre une nette amélioration de comportement pour ce type de géométrie et ces conditions de vol par rapport au modèle existant (cf. Figure 7.5 du chapitre 7). Pour le cas à 130 km, on constate un bon accord au niveau des contours mais un léger pic est prédit par le réseau au niveau de l’épaulement. Comme l’illustrent les résultats le long de la ligne d’arrêt, l’amplitude du pic est en réalité assez faible et l’allure est plutôt bien restituée par le réseau. Le résultat donné par **ARES** est en bon accord avec la solution DSMC, avec tout de même une légère surestimation du flux de chaleur.

Pour l’IXV, les contours montrent un bon accord entre les résultats DSMC et la prédiction du réseau. Les résultats le long de la ligne centrale, font apparaître la dépendance au paramètre  $d_{stag}$  du réseau. Ce comportement attendu pour un niveau de raréfaction plus faible n’est pas cohérent avec le point de vol à 115 km. Cela montre que la diminution de l’influence de  $d_{stag}$  lorsque  $C_{h,stag}$  (*i.e*  $Kn$ ) augmente n’a pas été correctement apprise. Relativement à la distribution prédite par **ARES**, la sous-estimation du réseau est d’un niveau inférieur à la surestimation d’**ARES** sur la portion  $1 < x < 3$  m et équivalente au-delà.

Pour le cas OREX, on voit sur les contours une différence d’amplitude non négligeable dans la région d’arrêt (entre 3 et 8%). La sous-estimation par le réseau provient probablement d’une influence conjointe et concurrentielle entre les paramètres  $\alpha$  et  $d_{stag}$  dans cette région. Concernant la distribution de  $C_h$  le long de la ligne d’arrêt, les résultats montrent le bon accord entre les résultats DSMC et ceux obtenus avec le réseau de neurones. Cette fois encore, le comportement visé a bien été appris par le réseau qui offre une amélioration significative de la prédiction du flux de chaleur sur cette configuration par rapport au modèle existant.

En se concentrant maintenant sur les « nouvelles » géométries, les résultats de la Figure 8.31 (page 254) montrent les points suivants. Par rapport à la sphère, les contours indiquent un bon accord en terme d’amplitude dans la région d’arrêt malgré une décroissance prématurée du  $C_h$  pour  $\theta \in [0^\circ; 30^\circ]$ . Compte tenu des résultats obtenus pour le  $C_p$  dans cette région, cette incohérence est probablement due au paramètre  $d_{stag}$ . Plus loin ( $\theta \in [50^\circ; 110^\circ]$ ) on note que l’allure restituée par le réseau est plus juste que celle d’**ARES**.

Pour le sphère-cône, les contours montrent cette fois la surestimation du  $C_h$  dans la région d’arrêt (écart relatif de 4%). Ce comportement est inverse à celui du cas OREX mais est probablement aussi une conséquence d’une influence conjointe et concurrentielle entre  $d_{stag}$  et  $\alpha$ . La représentation des résultats sous forme adimensionnée illustre néanmoins la très bonne restitution de l’allure.

Pour Orion, comme pour le cas Apollo à 100 km, les contours témoignent de l’excellent accord entre le pic de chaleur calculé par DSMC et celui prédit par le réseau. Le long de la ligne centrale, la même tendance est visible, avec une variation décroissante linéaire pour les régions au vent. Relativement au comportement d’**ARES** pour ce type de conditions, ce résultat est très satisfaisant.

Concernant le Spaceliner, les résultats montrent que la valeur du flux de chaleur au point d’arrêt est correctement prédite par le réseau mais la décroissance le long de la ligne d’arrêt n’est pas cohérente. Pour cette géométrie, le paramètre  $d_{stag}$  permet donc, contrairement à l’observation pour  $C_p$ , de retrouver la position du point d’arrêt mais les résultats le long de la ligne centrale indiquent que la dépendance apprise du flux de chaleur à cette distance se généralise mal pour des géométries aussi grandes. Ce constat n’est pas surprenant du fait de l’utilisation d’une distance absolue. A l’ombre, l’erreur est exacerbée par la mauvaise qualité du maillage le long de la dérive.

### 3.3.3 Résultats pour le coefficient $C_f$

Le troisième réseau de neurones est un modèle du type  $C_f = f(C_{h,stag}, \alpha, R_n/R_{n,loc})$ . L’architecture retenue est composée de 3 couches cachées [32, 64, 128]. Les fonctions d’activation sont de type **ReLU**, l’optimiseur est de type Adam et le pas d’apprentissage vaut  $\lambda = 1 \times 10^{-4}$ . L’entraînement est effectué sur des batchs de taille 64 et sur 20 epochs. Une régularisation  $l2$  est activée pour chaque couche cachée.

La Figure 8.32 (page 255) montre les résultats pour les quatre simulations préliminaires de la base de test. Pour le cas Apollo à 100 km, on observe un phénomène similaire à celui souligné pour le coefficient  $C_p$ . La position effective du point d'arrêt, caractérisée par la région où  $C_f \simeq \min(C_f)$ , ne correspond pas à la position  $\alpha \simeq 90^\circ$ . La position du point d'arrêt est mal restituée par le réseau et **ARES**. En terme d'amplitude par contre, l'augmentation du frottement dans la région  $y \in [-2; 0]$  m est mieux représentée par le réseau que par les modèles d'**ARES**. A 130 km, la position du point d'arrêt où  $C_f \simeq \min(C_f)$  est mieux restituée mais le réseau en surestime la valeur. Le long de la ligne d'arrêt, l'allure des résultats d'**ARES** est globalement plus fidèle au calcul DSMC.

Pour le cas de l'IXV à 115 km, la valeur minimale de  $C_f$  au point d'arrêt est encore légèrement surestimée ce qui suggère un souci lié au niveau de raréfaction. Dans l'ensemble, les résultats DSMC sont tout de même bien reproduits. Le tracé de la distribution le long de la ligne d'arrêt indique que relativement à la valeur maximale de  $C_f$ , l'allure du résultat obtenu avec le réseau est plus proche du calcul DSMC que les modèles d'**ARES**.

Pour OREX à 105 km, un mauvais accord est obtenu pour l'amplitude au point d'arrêt mais une bonne cohérence est observée pour l'allure. En effet pour ce cas, le pic de frottement à l'épaulement est bien restitué et l'allure globale est plus précise que celle d'**ARES** pour la partie conique.

Pour les « nouvelles » géométries, les résultats sont donnés en Figure 8.33 (page 256). Pour la sphère, les contours montrent encore une légère surestimation du frottement au point d'arrêt et une sous-estimation de la valeur maximale de  $C_f$ . L'allure globale est tout de même cohérente. Pour Ram-C, le frottement est légèrement surestimé au niveau du point d'arrêt mais une bonne allure est prédite par le réseau.

Pour Orion (comme pour Apollo), on constate que la position du point d'arrêt n'est pas bien restituée, comme attendu. Par rapport à l'allure le long de la ligne centrale, l'augmentation du frottement dans la région  $z \in [0; 2.5]$  m est mieux représentée par le réseau que par les modèles d'**ARES**.

Pour le Spaceliner, l'absence du paramètre de distance permet de garder une réponse stable mais empêche de capturer la décroissance du frottement le long de la paroi. Pour ce cas particulier, la valeur au point d'arrêt ne tend pas vers zéro et l'écart avec la valeur prédite par le réseau est de 6%.

### 3.3.4 Discussion

Globalement, les conclusions suivantes peuvent être tirées. Par rapport à la base d'entraînement, le tirage pseudo-aléatoire des conditions de vol a été effectué de sorte à augmenter la représentativité des phénomènes complexes en conditions faiblement raréfiées. Comme on peut le voir dans le Tableau 8.5, les altitudes les plus élevées sont peu représentées. Compte tenu du nombre relativement faible de simulations utilisées pour l'apprentissage, cette particularité explique très certainement pourquoi les comportements en conditions plus raréfiées sont moins bien assimilés pour  $C_h$  (cf. la dépendance à la distance pour le cas IXV à 115 km) et pour  $C_f$  (cf. la surestimation du  $\min(C_f)$  pour les cas Apollo et IXV à 130 et 115 km). Un enrichissement de la base de données avec des simulations en régime plus raréfié ( $Kn \geq 10^{-1}$ ) améliorerait très probablement cet aspect.

Les résultats ont également mis en avant, pour les géométries en incidence nulle (OREX, Sphère et Ram-C), une difficulté du modèle de réseau de neurones à ajuster la valeur de  $C_h$  au point d'arrêt. Pour ce type de conditions, une façon simple d'améliorer la précision du réseau est d'effectuer la correction  $C_h = C_{h,stag}/C_h^* \times C_h$  où  $C_h^*$  est la valeur de l'élément où la distance  $d_{stag}$  est minimale.

Concernant l'utilisation d'un paramètre de distance  $d_{stag}$  absolu, les résultats soulignent les limites de généralisation des modèles qui en dépendent lorsqu'ils sont évalués sur des géométries de tailles trop éloignées de celles de la base d'apprentissage. Une manière de résoudre ce problème serait alors d'utiliser un paramètre adimensionné. Un tel adimensionnement n'est toutefois pas trivial et le choix d'une distance maximale appropriée (mesurée sur les parties au vent par exemple) doit être investigué.

Dans l'ensemble, les trois modèles présentés ici donnent des résultats très encourageants. Pour le modèle de  $C_p$ , un niveau de précision très proche des modèles classiques est obtenu. De plus, la

précision obtenue pour les parties à l'ombre ouvre la voie à une utilisation de tels modèles pour le régime continu où les sollicitations à l'ombre peuvent être non négligeables et où l'hypothèse de la méthode de Newton  $C_p = 0$  (*i.e.*  $p = p_\infty$ ) peut conduire à des erreurs significatives. Pour le flux de chaleur, le modèle construit permet d'augmenter considérablement la précision des résultats par rapport aux modèles classiques pour les cas limitants du régime faiblement raréfié ( $Kn \lesssim 10^{-1}$ ) tels qu'une calotte sphérique en incidence ou pour un sphère-cône ouvert. Pour le frottement, le modèle permet de s'affranchir de l'influence sur le régime de transition de l'hypothèse  $C_{f,\text{cont}} = 0$  induite par les fonctions de raccord. Là aussi, pour les cas d'une calotte sphérique en incidence et d'un sphère-cône ouvert en régime faiblement raréfié ( $Kn \lesssim 10^{-1}$ ), le modèle donne de très bons résultats.

## 4 Résumé

Après un bref état de l'art sur les plans d'expériences ainsi que sur deux méthodes d'apprentissage statistique, un ensemble de modèles réduits de type Machine Learning a été développé. Ainsi, deux modèles de krigeage ont d'abord été construits pour prédire les coefficients de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt à partir des nombres de Mach et de Knudsen. En basant la longueur de référence sur le rayon de courbure au point d'arrêt, ces modèles permettent de supprimer l'ambiguïté principale lors de la définition du nombre de Knudsen. Relativement aux modèles classiques d'**ARES**, ces modèles de krigeage permettent de passer d'une erreur relative de respectivement 3.76 à 1.5% pour  $C_{p,\text{stag}}$  et de 12.2 à 5% pour  $C_{h,\text{stag}}$ .

Ensuite, trois réseaux de neurones ont été construits pour calculer les distributions pariétales de  $C_p$ ,  $C_h$  et  $C_f$  pour des géométries émoussées et dans des conditions de vol quelconques. Pour ces modèles, l'objectif était d'évaluer le potentiel des méthodes d'apprentissage pour améliorer la précision des méthodes classiques sur des cas particulièrement difficiles à simuler correctement. Les résultats obtenus sont très encourageants et ce travail constitue une première étape vers une généralisation de ces approches pour l'amélioration des codes de rentrée.

Ensemble, le couplage des modèles de krigeage et des réseaux de neurones permet de répondre aux limitations majeures des fonctions de raccord. En effet, le choix des nombres de Knudsen des régimes limites, les problèmes de généralisation liés au choix de la longueur de référence et la propagation des erreurs commises en régime continu sont des aspects propres aux fonctions de raccord qui n'affectent pas ces nouveaux modèles. De plus, ces modèles permettent également de modéliser le flux de chaleur pariétal pour des conditions de paroi non-catalytique, ce qui n'est pas possible avec les codes de rentrée classiques.

Tels quels, les modèles développés ici souffrent tout de même de quelques défaillances liées au choix de certaines variables de design et à la structure de la base d'apprentissage. Toutefois, des pistes ont été évoquées pour ouvrir la voie vers un déploiement de telles méthodes dans un code de rentrée quelconque.

Pour finir, les modèles développés ont été conçus pour améliorer la précision des modèles existants sur des géométries émoussées. Néanmoins, la place importante qu'occupe la simulation de débris aux formes plus atypiques (planes, concaves, etc.), non conçues pour résister à la rentrée, constitue un enjeu majeur pour les codes de rentrée. Pour ce type de géométries, les comportements particuliers pourraient être appris par des modèles statistiques en adaptant légèrement le choix et le traitement des variables de design. En effet, les travaux de Falchi [247] montrent que pour des géométries cylindriques ou cubiques dont une courbure équivalente est connue pour les faces planes, la restitution de la distribution du flux de chaleur peut se faire à partir de la distribution lissée de courbure locale. La construction de réseaux de neurones spécifiquement pour traiter ce genre de cas est donc une piste d'étude très prometteuse.

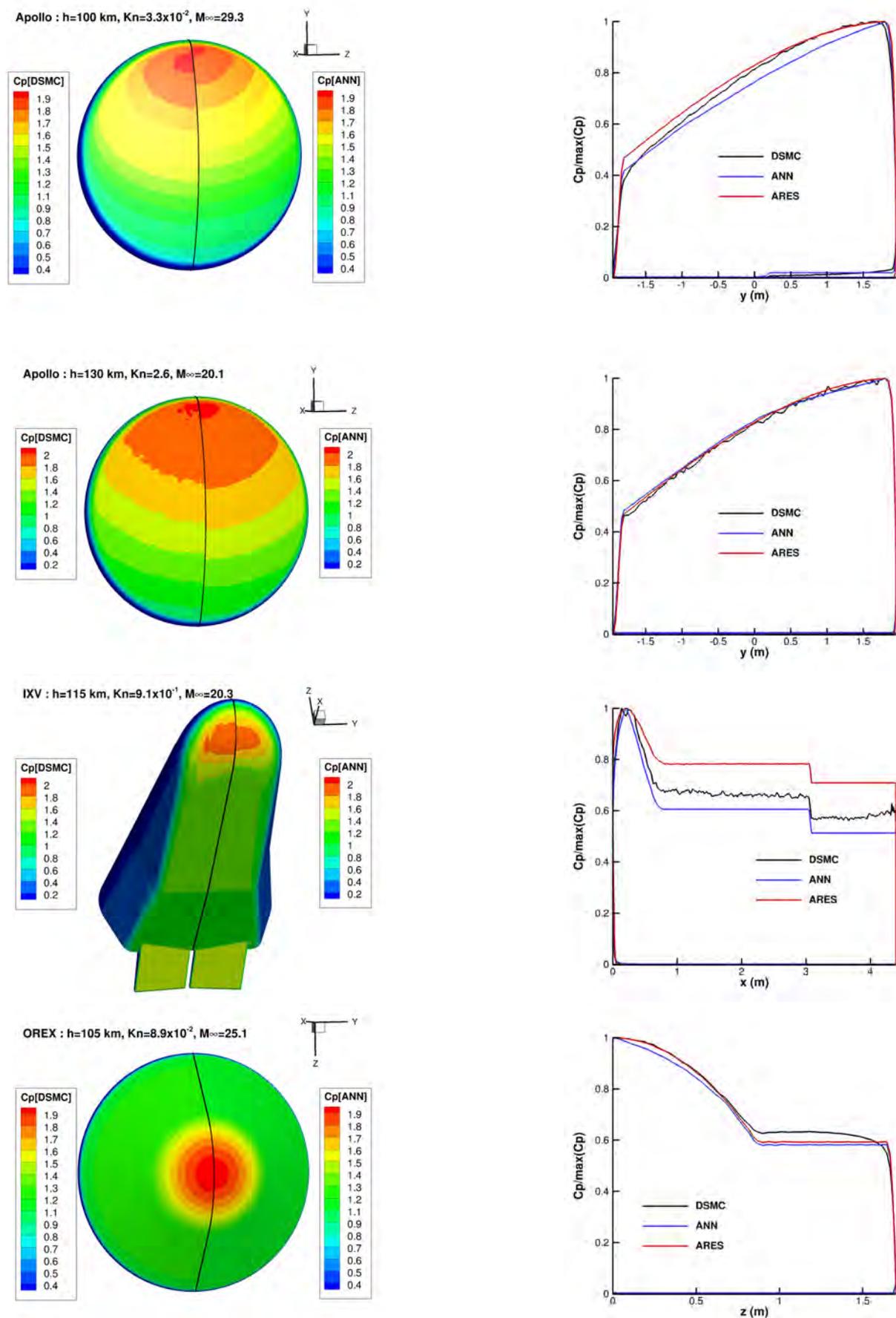


FIGURE 8.28 – Comparaison du coefficient  $C_p$  obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec **ARES** pour Apollo à 100 km (1<sup>ère</sup> ligne), Apollo à 130 km (2<sup>ième</sup> ligne), l'IXV à 115 km (3<sup>ième</sup> ligne), OREX à 105 km (4<sup>ième</sup> ligne).

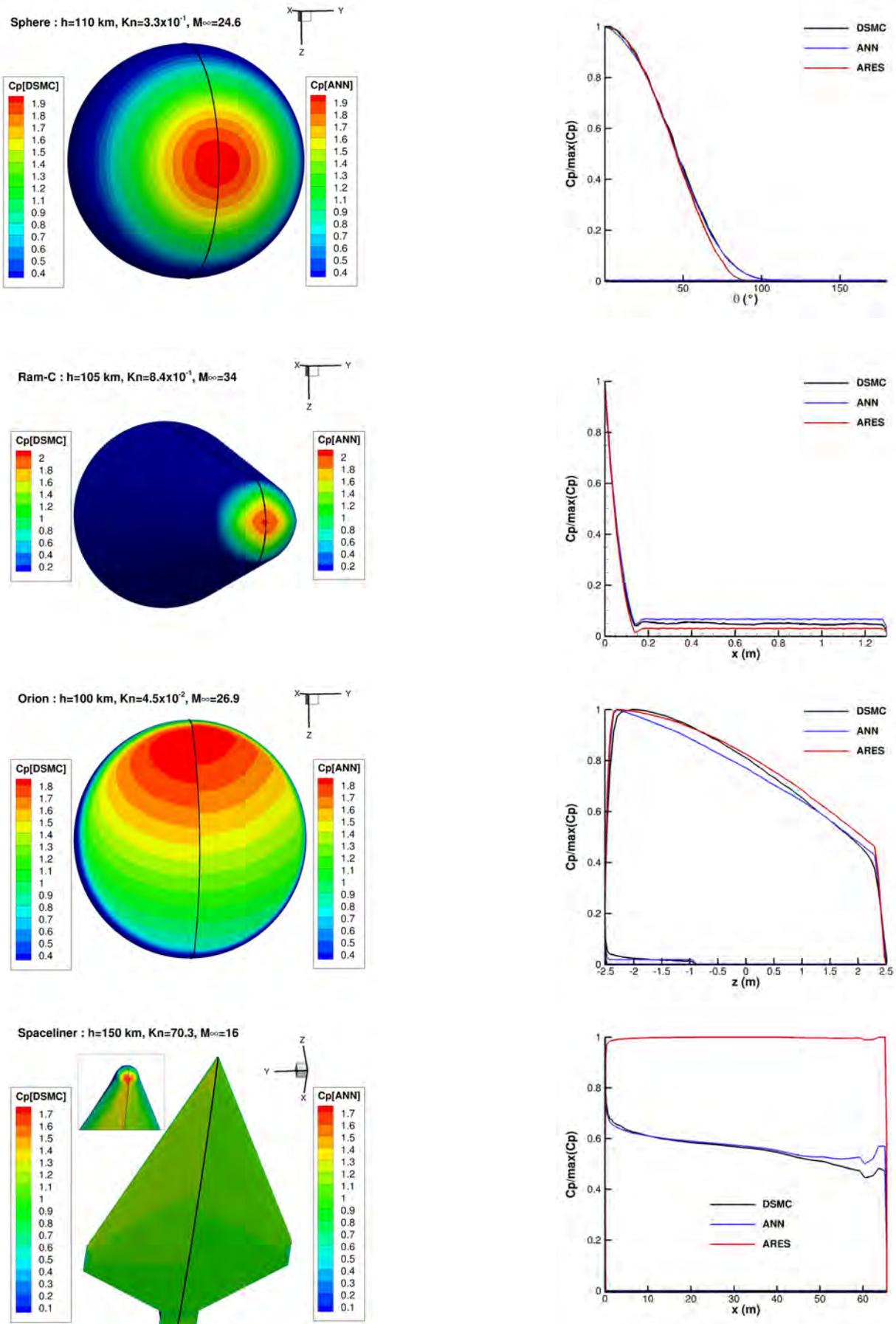


FIGURE 8.29 – Comparaison du coefficient  $C_p$  obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec **ARES** pour une Sphère à 110 km (1<sup>ère</sup> ligne), Ram-C à 105 km (2<sup>ième</sup> ligne), Orion à 100 km (3<sup>ième</sup> ligne), le Spaceliner à 150 km (4<sup>ième</sup> ligne).

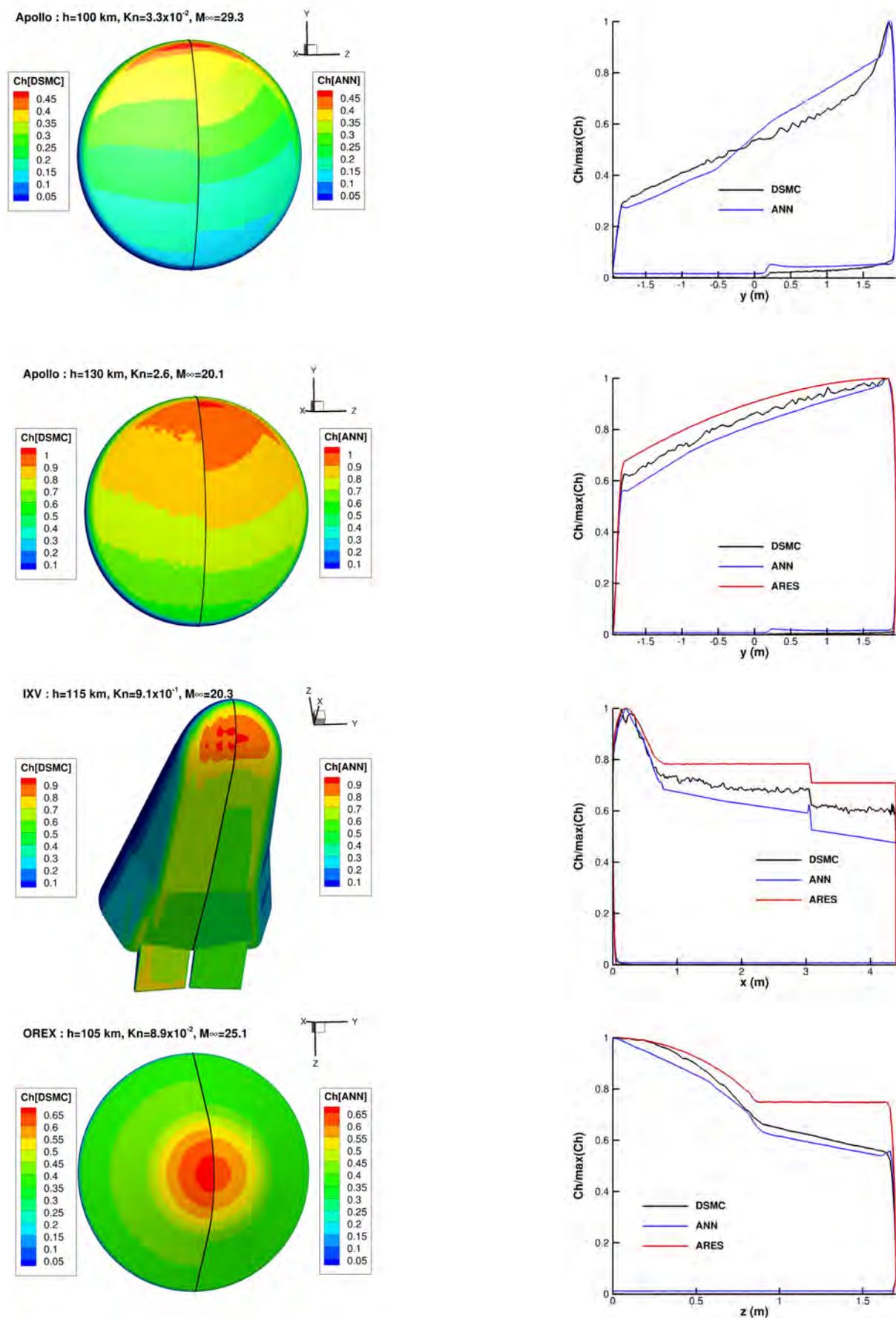


FIGURE 8.30 – Comparaison du coefficient  $C_h$  obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec **ARES** pour Apollo à 100 km (1<sup>ère</sup> ligne), Apollo à 130 km (2<sup>ième</sup> ligne), l'IXV à 115 km (3<sup>ième</sup> ligne), OREX à 105 km (4<sup>ième</sup> ligne).

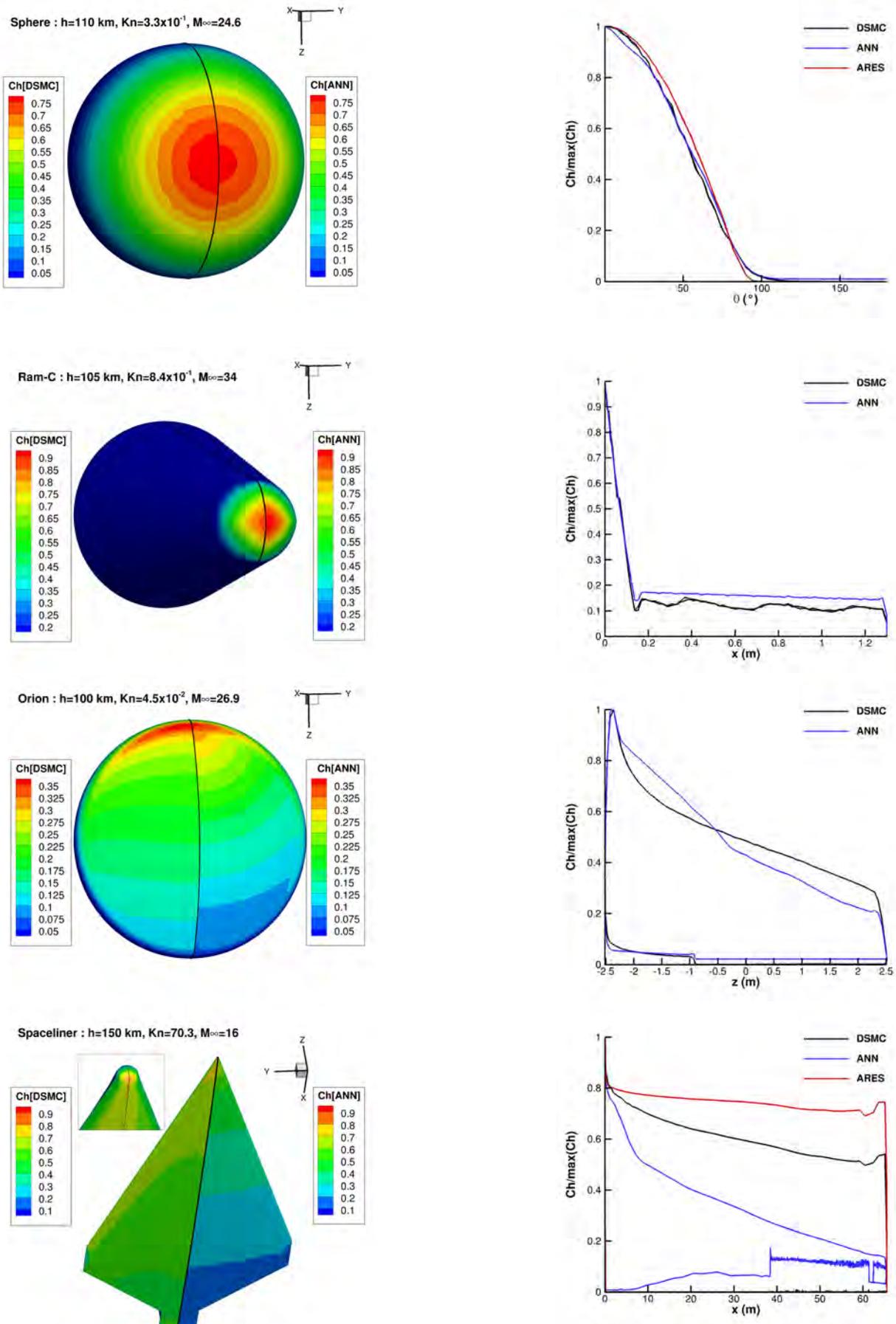


FIGURE 8.31 – Comparaison du coefficient  $C_h$  obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec **ARES** pour une Sphère à 110 km (1<sup>ère</sup> ligne), Ram-C à 105 km (2<sup>ième</sup> ligne), Orion à 100 km (3<sup>ième</sup> ligne), le Spaceliner à 150 km (4<sup>ième</sup> ligne).

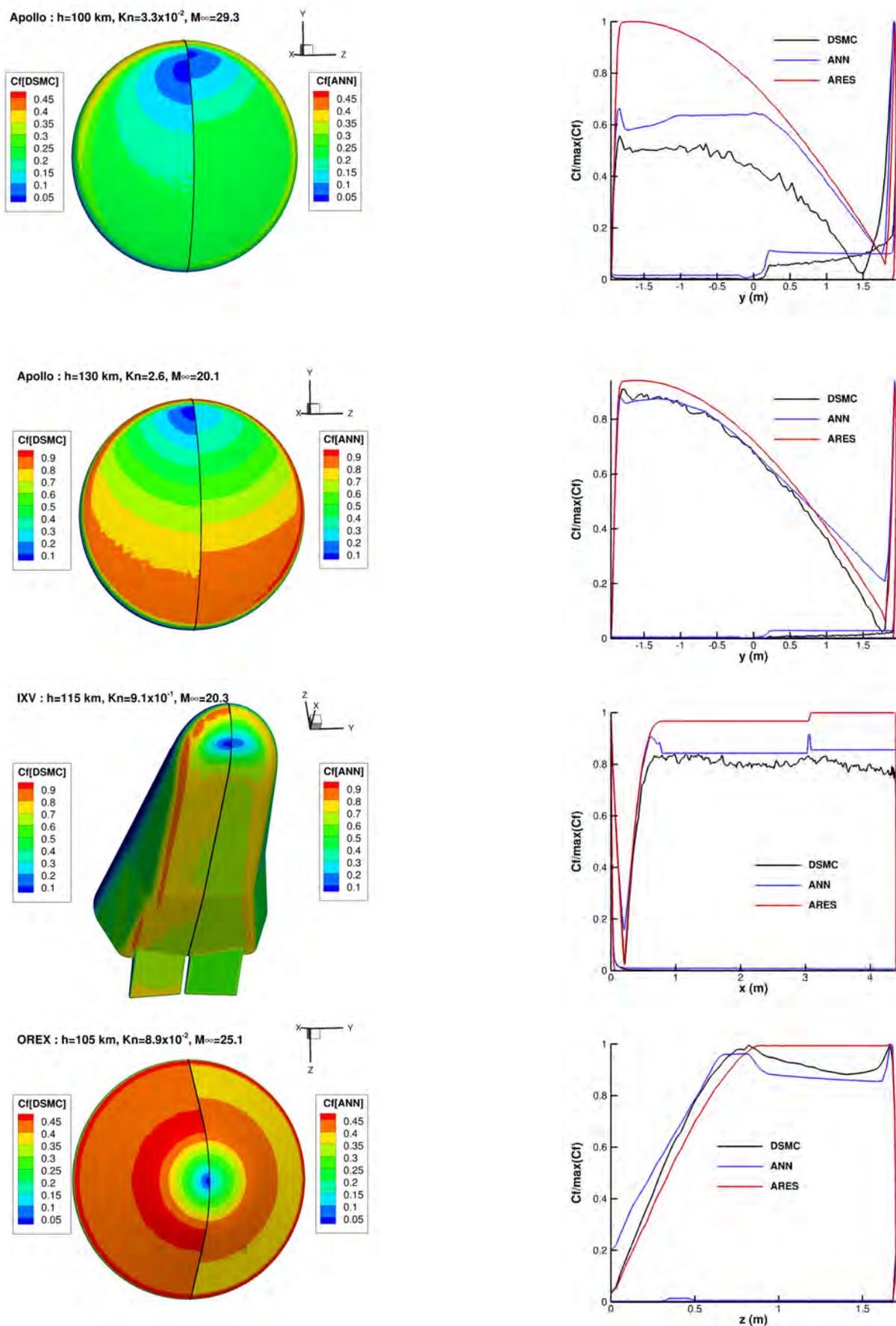


FIGURE 8.32 – Comparaison du coefficient  $C_f$  obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec **ARES** pour Apollo à 100 km (1<sup>ère</sup> ligne), Apollo à 130 km (2<sup>ième</sup> ligne), l'IXV à 115 km (3<sup>ième</sup> ligne), OREX à 105 km (4<sup>ième</sup> ligne).

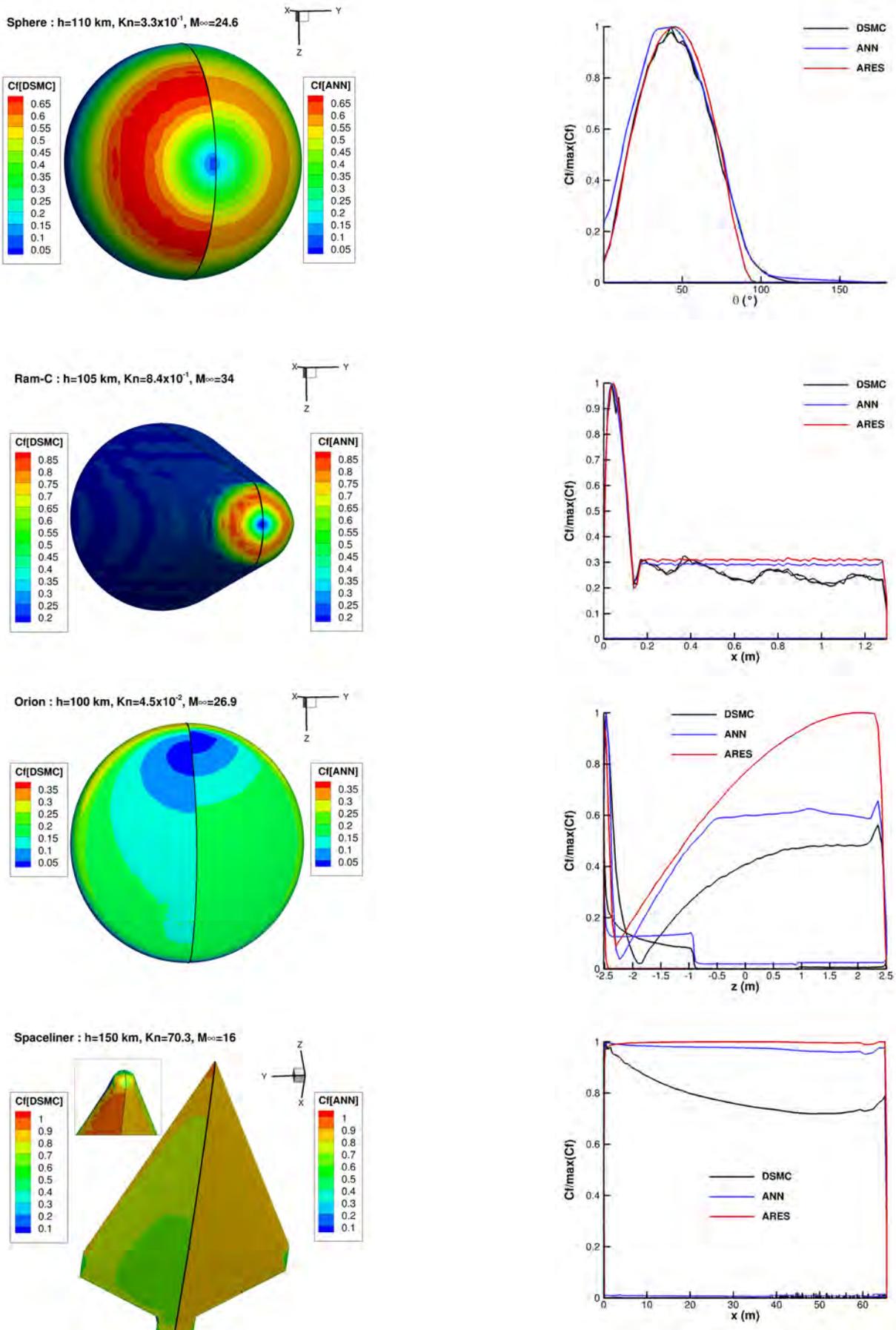


FIGURE 8.33 – Comparaison du coefficient  $C_f$  obtenu par réseau de neurones (ANN), par DSMC et avec **ARES** pour une Sphère à 110 km (1<sup>ère</sup> ligne), Ram-C à 105 km (2<sup>ième</sup> ligne), Orion à 100 km (3<sup>ième</sup> ligne), le Spaceliner à 150 km (4<sup>ième</sup> ligne).

# Conclusion et perspectives

## Bilan

La modélisation numérique des écoulements raréfiés a connu un premier tournant dans les années 60 suite au développement de la méthode Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) de Bird. Cependant, malgré le nombre croissant de travaux menés sur la cinétique des gaz, l'étude des écoulements hypersoniques raréfiés représente encore une activité de recherche minoritaire en mécanique des fluides. Du fait des nouvelles contraintes législatives et des progrès technologiques, l'étude des écoulements raréfiés connaît un nouvel essor depuis quelques années. En effet, certains aspects des méthodes d'ingénierie, jugées jusque là suffisantes, constituent désormais des points limitants pour atteindre les nouvelles exigences. L'amélioration des méthodes actuelles passe donc par une meilleure compréhension des mécanismes propres aux conditions hypersoniques raréfiées, une meilleure connaissance des points clés de la méthode DSMC et par le développement de modèles réduits alternatifs. Cette thèse a cherché à atteindre ces différents objectifs en suivant deux axes d'étude principaux.

Pour le premier qui correspond à la deuxième partie du manuscrit, une grande variété d'écoulements hypersoniques raréfiés a été simulée et analysée. Ainsi, dans le chapitre 4, une discussion sur les critères de convergence a été menée pour ce type d'applications. Cette discussion a notamment mis en évidence que les critères de convergence généralement admis dépendent en réalité du niveau de raréfaction et des quantités étudiées. Dans le même chapitre, une première étape de validation a permis d'attester de la fiabilité de **SPARTA** relativement à d'autres codes DSMC. Les résultats obtenus pour des écoulements non-réactifs sur une plaque plane et un sphère-cône ont également montré que, dans de telles conditions, la reconstruction des coefficients aérodynamiques et aérothermodynamiques peut s'avérer difficile, en particulier pour le cas du sphère-cône en incidence.

Ensuite, les chapitres 5 et 6 ont permis d'aller plus loin dans cette démarche d'évaluation de la méthode par confrontation à des données de vol. Ainsi, pour les programmes Mercury, Apollo, OREX et quelques missions de la navette spatiale américaine, les résultats ont montré plusieurs aspects importants de la DSMC. Tout d'abord, la reconstruction du flux de chaleur sur les parois à l'ombre a montré l'influence non-négligeable de la température de paroi. Pour la capsule OREX et la navette spatiale américaine, les données de vol aérodynamiques ont été correctement reproduites par les calculs DSMC. Pour le flux de chaleur en face avant, l'adéquation entre les mesures et les résultats numériques est plus mitigée. En effet, pour le cas de la navette, des écarts très importants ont été observés pour les points de vol d'altitudes supérieures à 95 km et même avec des valeurs du coefficient d'accommodation faibles et physiquement discutables. Pour la capsule OREX, la diminution du coefficient d'accommodation a permis d'améliorer la précision des calculs DSMC à 105 km mais, pour les points de vols situés à 101 et 96 km, les écarts relatifs restent conséquents. Pour les deux véhicules, une très bonne cohérence est finalement obtenue pour les altitudes proches de 90 km.

Grâce à la reconstruction numérique de l'historique du flux de chaleur subi par l'Intermediate eXperimental Vehicle (IXV) lors de sa rentrée, l'analyse de la portion raréfiée de ce vol présentée dans le chapitre 6 a contribué à confirmer certaines observations, hypothèses et lacunes mises en lumière dans le chapitre 5. Comme pour la navette, le flux de chaleur aux altitudes supérieures à 95 km n'a pas pu être reproduit numériquement de manière satisfaisante. Ce cas d'étude a montré que les moyens expérimentaux mais aussi la connaissance des conditions atmosphériques en de telles altitudes ne sont pas suffisants. A 90 km en revanche, la comparaison des résultats DSMC, CFD et des mesures sont beaucoup plus satisfaisants. Ce travail a ainsi montré l'importance du

---

paramétrage des modèles de collision en régime proche continu pour assurer la cohérence entre les résultats DSMC et CFD d'une part, et les résultats DSMC et les mesures d'autre part. Pour le cas de l'IXV, l'influence des paramètres du modèle de collision utilisé est même supérieure à celles évoquées par Bird et Moss dans leurs travaux sur la navette spatiale. Finalement ce chapitre a mis en avant le rôle fondamental des modèles d'atmosphère et le besoin d'améliorer considérablement notre connaissance des conditions atmosphériques à haute altitude pour espérer conclure quant à la précision de la DSMC dans ces conditions.

Les enseignements et les simulations résultant de ce travail préliminaire ont ensuite permis d'étudier le développement d'une nouvelle génération de modèles réduits (chapitre 8) capables de répondre à certaines limitations des modèles actuels. Grâce à une approche en deux temps, des modèles de krigeage ont d'abord été construits pour le calcul des coefficients de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt. Pour ces modèles, un gain de précision significatif a été obtenu, ce qui constitue déjà un moyen d'améliorer les modèles existants. L'utilisation de ces coefficients pour alimenter des réseaux de neurones a ensuite permis de calculer les distributions des coefficients de pression, de frottement et de flux de chaleur. Les résultats montrent la pertinence d'une telle approche qui, bien que construite à partir de bases de données de taille modeste, permet d'améliorer la précision des modèles actuels dans les cas où ils ne donnent pas de bons résultats. En effet, pour les coefficients de pression, des résultats d'un niveau équivalent aux modèles classiques ont été obtenus pour la plupart des véhicules considérés. Pour les parties à l'ombre, cette nouvelle formulation fournit même des résultats nettement plus précis. Pour des parois non-catalytiques, le nouveau modèle pour le flux de chaleur est cohérent pour la majorité des véhicules à l'exception du Spaceliner dont la grande taille, relativement aux véhicules de la base d'entraînement, montre les limites d'utiliser un paramètre de distance absolue. Pour les cas particuliers des calottes sphériques en incidence et d'un sphère-cône ouvert, le nouveau modèle offre un niveau de précision supérieur aux modèles existants conformément à l'objectif initial. Pour le frottement en revanche, la précision du nouveau modèle n'est pas totalement convaincante. En effet, des écarts importants au point d'arrêt et dans la zone de frottement maximal ont été observés même pour des géométries simples.

## Perspectives

### La simulation de rentrées raréfiées par DSMC

Concernant la DSMC, sa validation et ses voies de développement, les résultats de cette thèse ont mis en évidence qu'une meilleure connaissance des conditions atmosphériques était primordiale pour une reconstruction fiable des données de vol. De la même manière, le manque de précision des mesures en vol de flux de chaleur et de pression en régime hypersonique raréfié a été mis en avant. Il semble donc nécessaire d'adapter les moyens de mesure expérimentaux pour atteindre un niveau de précision suffisant pour mesurer les faibles sollicitations caractéristiques des hautes altitudes. Toutefois, tant que les modèles d'atmosphère souffriront d'un tel niveau d'incertitude à haute altitude, une alternative à la reconstruction des données de vol doit être envisagée. Comme en témoignent les rentrées de la navette spatiale américaine et de la capsule OREX, il est techniquement difficile mais pas impossible de mesurer les contraintes relatives à la pression sur des altitudes supérieures à 100 km. Une évaluation croisée des grandeurs aérodynamiques et aérothermodynamiques permettrait d'évaluer pour une grandeur, la déviation des conditions atmosphériques prédites par rapport aux conditions réelles, puis d'évaluer les effets des modèles sur une deuxième grandeur en s'affranchissant de l'incertitude sur la masse volumique.

D'un point de vue numérique, le développement d'un algorithme pour, comme en CFD, converger progressivement vers une distribution réaliste de température, pourrait vraisemblablement améliorer la qualité des reconstructions du flux de chaleur. Par ailleurs, la caractérisation des coefficients d'accommodation d'une grande variété de matériaux aérospatiaux devrait permettre, à terme, d'atteindre un meilleur niveau de compréhension des interactions gaz-surface qui sont fondamentales

dans le régime transitionnel. L'homogénéisation des résultats DSMC et CFD en régime proche continu nécessite, quant à elle, de poursuivre les efforts de modélisation des propriétés de transport. A cet effet, la construction de bases de données plus complètes pour l'ajustement des paramètres des modèles de collision devrait permettre d'améliorer plus encore la précision des modèles DSMC. Finalement, l'augmentation des données de vol disponibles pour la validation permettrait de prendre en compte les phénomènes d'interactions gaz-surface chimiques telle que la catalycité de paroi qui a été omise dans ce travail.

### Les modèles réduits de type machine learning

Pour les codes de rentrée, l'objectif est d'accéder à des modèles réduits toujours plus précis et toujours plus robustes. Pour les modèles développés dans le cadre de cette thèse, plusieurs perspectives sont envisageables. D'un côté, l'augmentation continue des moyens de calculs HPC suggère que la réalisation de simulations d'ensemble et l'automatisation complète des procédures de génération de larges bases de données est à portée de main. Ce premier constat indique que les contraintes sur le nombre de simulations évoquées ici pourraient être considérablement relaxées. Par ailleurs, une étude approfondie des paramètres de design devrait également offrir une amélioration des résultats et des capacités de généralisation sans nécessiter de calculs complémentaires.

De façon générale, les formulations locales (nouvelles et existantes) souffrent d'un inconvénient de taille, la non-unicité de la réponses à un jeu de paramètres de design donné. Cet aspect suggère donc qu'un enrichissement de la base de données ne permettrait pas d'améliorer continuellement la précision des modèles d'apprentissage. Le comportement de fonction de régression conduirait fatalement à l'assimilation de tendances moyennes et à un niveau de précision maximal limité. Les réseaux construits à partir des calculs préliminaires (chapitres 5 et 6) ont, quant à eux, montré de très bons résultats pour des configurations de vol réduites (faibles variations de vitesse et d'incidence). A partir d'un nombre de calculs minimal (entre 2 et 10 points de vol par véhicule), ce genre de modèle peut donc être exploité pour des conditions plus restreintes (*e.g.* une rentrée véhiculaire) mais avec un meilleur niveau de précision.

Pour finir, les modèles développés dans le cadre de cette thèse ont été conçus pour améliorer la précision des modèles existants sur des géométries émoussées. Néanmoins, pour des géométries planes (cube, cylindre, plaque), les comportements particuliers pourraient être appris par des modèles statistiques en adaptant légèrement le choix et le traitement des variables de design. Comme évoqué à la fin du chapitre 8, lorsque des courbures équivalentes sont connues, les modèles de krigage seraient théoriquement capables de calculer les grandeurs de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt. Ensuite, les distributions pourraient simplement être obtenus avec des réseaux de neurones entraînés à partir de distributions lissées de la courbure locale. Le traitement de ce genre de cas par cette approche est donc une piste d'étude très prometteuse.



# Bibliographie

- [1] I. D. Boyd and T. E. Schwartzentruber, *Nonequilibrium gas dynamics and molecular simulation*. Cambridge : Cambridge University Press, 2017.
- [2] J. J. Bertin, “Hypersonic aerothermodynamics,” *Physics Today*, p. 627, 1994.
- [3] T. Schlegat, *Experimental Investigation of Rarefaction Effects on Aerodynamic Coefficients of Slender and Blunt Re-entry Vehicles*. PhD thesis, Fakultät der Justus-Liebig-Universität Gießen, 2018.
- [4] G. A. Bird, “Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas,” *Physics of Fluids*, vol. 6, no. 10, p. 1518, 1963.
- [5] Domenico Bruno, “Internal Energy Excitation and Chemical Reaction Models for Rarefied Gases,” tech. rep., 2011.
- [6] T. K. Mankodi, U. V. Bhandarkar, and B. P. Puranik, “Hypersonic flow over Stardust Re-entry Capsule using ab-initio based chemical reaction model,” *Acta Astronautica*, vol. 162, pp. 243–255, 2019.
- [7] I. B. Sebastião and W. F. Santos, “Gas-surface interaction effects on the flowfield structure of a high speed microchannel flow,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 52, no. 2, pp. 566–575, 2013.
- [8] T. Banyai, E. Torres, T. E. Magin, A. V. Kashkovsky, P. V. Vashchenkov, M. S. Ivanov, and P. Rambaud, “Evaluation of the aerodynamic properties of the intermediate experimental vehicle in the rarefied and transitional regime,” *Progress in Flight Physics*, vol. 5, pp. 425–440, 2013.
- [9] X. Ren, J. Yuan, B. He, M. Zhang, and G. Cai, “Grid criteria for numerical simulation of hypersonic aerothermodynamics in transitiona regime,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 881, pp. 585–601, 2019.
- [10] J. Allègre, D. Bisch, and J.-C. Lengrand, “Experimental Rarefied Heat Transfer at Hypersonic Conditions over 70 Degree Blunted Cone,” *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 34, no. 6, pp. 724–728, 1997.
- [11] R. C. Palharini, C. White, T. J. Scanlon, R. E. Brown, M. K. Borg, and J. M. Reese, “Benchmark numerical simulations of rarefied non-reacting gas flows using an open-source DSMC code,” *Computers and Fluids*, vol. 120, pp. 140–157, 2015.
- [12] M. J. Wright, F. S. Milos, and P. Tran, “Afterbody aeroheating flight data for planetary probe thermal protection system design,” *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 43, no. 5, pp. 929–943, 2006.
- [13] J. Murphy, “Flight Test Aerodynamic Heating Data for the Afterbody of the Project Mercury Spacecraft With Comparisons To Available Prediction Methods,” tech. rep., NASA, 1967.
- [14] D. B. Lee and W. D. Goodrich, “Apollo Experience Report - Aerothermodynamics Evaluation,” tech. rep., NASA, 1972.
- [15] J. N. Moss, C. E. Glass, and F. A. Greene, “DSMC simulations of apollo capsule aerodynamics for hypersonic rarefied conditions,” in *9th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference Proceedings*, vol. 3, pp. 1733–1750, 2006.
- [16] G. A. Bird, “Application of the Direct Simulation Monte Carlo Method to the Full Shuttle Geometry,” in *AIAA/ASME 5th Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference*, 1990.
- [17] D. RAULT, “Aerodynamics of Shuttle Orbiter at high altitudes,” *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 31, no. 6, pp. 944–952, 1994.
- [18] Unknown, *Aerodynamic Design Data Book - Vol. I : Orbiter Vehicle*. JSC-19654, 1978.
- [19] R. C. Blanchard, “Rarefield Flow Lift-to-Drag Measurements of the Shuttle Orbiter,” in *Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences*, vol. 2, pp. 1421–1430, 1986.
- [20] J. N. Moss, R. N. Gupta, and J. M. Price, “DSMC Simulations of OREX Entry Conditions,” tech. rep., NASA, 1996.
- [21] G. Pezzella, G. Marino, and G. C. Rufolo, “Aerodynamic database development of the ESA intermediate experimental vehicle,” *Acta Astronautica*, vol. 94, no. 1, pp. 57–72, 2014.
- [22] R. Angelini and A. Denaro, “IXV re-entry demonstrator : Mission overview, system challenges and flight reward,” *Acta Astronautica*, vol. 124, pp. 18–30, 2016.
- [23] M. Fumo, R. Scigliano, M. Belardo, G. C. Rufolo, A. Esposito, and M. Linari, “Aero-Thermal Post Flight Analysis of IXV Control Surfaces,” in *7Th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (Eucass)*, no. February, pp. 1–11, 2015.
- [24] J. L. Shinn, J. N. Moss, and A. L. Simmonds, “Viscous-Shock-Layer Heating Analysis for the Shuttle Windward Plane with Surface Finite Catalytic Recombination Rates,” in *3rd Joint Thermophysics, Fluids, Plasma and Heat Transfer Conference*, 1982.

- [25] G. M. Kelly, M. L. Heck, J. G. McConnell, L. A. Waters, and P. A. Troutman, "Challenger STS-17 (41-G) Post-Flight Best Estimate Trajectory Products - Development and Summary Results," tech. rep., NASA, 1987.
- [26] G. C. Rufolo, F. Camarri, C. Pereira, R. Romano, and D. Vernani, "ESA intermediate experimental vehicle in-flight experimentation. Objectives, experiment implementation, qualification and integration," in *Proceedings of the International Astronautical Congress, IAC*, vol. 10, pp. 7488–7501, 2014.
- [27] L. Van Ghele, P. Reulet, J.-L. Verant, P. Millan, and J.-L. Battaglia, "Aerothermal Analysis of the Atmospheric Reentry of the Intermediate eXperimental Vehicle (IXV)," in *International Heat Transfer Conference 16*, (Connecticut), pp. 2699–2706, Begellhouse, 2018.
- [28] Y. Prévereaud, J. L. Vérant, M. Balat-Pichelin, and J. M. Moschetta, "Numerical and experimental study of the thermal degradation process during the atmospheric re-entry of a TiAl6V4 tank," *Acta Astronautica*, vol. 122, pp. 258–286, 2016.
- [29] M. Y. Ahmed and N. Qin, "Metamodels for aerothermodynamic design optimization of hypersonic spiked blunt bodies," *Aerospace Science and Technology*, vol. 14, no. 5, pp. 364–376, 2010.
- [30] N. Sia and P. M. Mehta, "Next-Generation Aerothermodynamic Modeling for Space Debris," in *8th European Conference on Space Debris*, no. April, (Darmstadt), pp. 20–23, 2021.
- [31] Loïc Le Gratiet, *Multi-fidelity Gaussian process regression for computer experiments*. PhD thesis, Université Paris-Diderot - Paris VII, 2013.
- [32] A. Forrester, A. Sobester, and A. Keane, *Engineering Design via Surrogate Modelling : A Practical Guide*. Wiley-VCH, 2008.
- [33] F. Chollet, *DEEP LEARNING with Python*. Manning Publications, 2018.
- [34] N. Azizan and B. Hassibi, "Stochastic Gradient/Mirror Descent : Minimax Optimality and Implicit Regularization." <http://www.its.caltech.edu/~nazizanr/papers/SMD.html>, 2019.
- [35] J. F. Padilla and I. D. Boyd, "Assessment of gas-surface interaction models in DSMC analysis of rarefied hypersonic flow," in *Collection of Technical Papers - 39th AIAA Thermophysics Conference*, vol. 1, pp. 1–15, 2007.
- [36] A. J. Lofthouse, *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics using Direct Simulation Monte-Carlo and Navier-Stokes*. PhD thesis, The University of Michigan, 2008.
- [37] L. Jacchia, "Thermospheric Temperature, Density, and Composition : New Models," tech. rep., NASA, 1977.
- [38] J. N. Moss and G. A. Bird, "Direct Simulation of Transitional Flow for Hypersonic Reentry Conditions," in *AIAA*, pp. 830–843, 1988.
- [39] N. H. Crisp, P. C. Roberts, S. Livadiotti, V. T. Oiko, S. Edmondson, S. J. Haigh, C. Huyton, L. A. Sinpetru, K. L. Smith, S. D. Worrall, J. Becedas, R. M. Domínguez, D. González, V. Hanessian, A. Mølgaard, J. Nielsen, M. Bisgaard, Y. A. Chan, S. Fasoulas, G. H. Herdrich, F. Romano, C. Traub, D. García-Almiñana, S. Rodríguez-Donaire, M. Sureda, D. Kataria, R. Outlaw, B. Belkouchi, A. Conte, J. S. Perez, R. Villain, B. Heißen, and A. Schwalber, "The benefits of very low earth orbit for earth observation missions," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 117, no. April, 2020.
- [40] P. Zheng, J. Wu, Y. Zhang, and B. Wu, "A comprehensive review of atmosphere-breathing electric propulsion systems," *International Journal of Aerospace Engineering*, vol. 2020, no. 4, 2020.
- [41] P. C. Roberts, N. H. Crisp, F. Romano, G. H. Herdrich, V. T. Oiko, S. Edmondson, S. J. Haigh, C. Huyton, S. Livadiotti, R. E. Lyons, K. L. Smith, L. A. Sinpetru, A. Straker, S. D. Worrall, J. Becedas, R. M. Domínguez, D. González, V. Cañas, V. Hanessian, A. Mølgaard, J. Nielsen, M. Bisgaard, A. Boxberger, Y. A. Chan, S. Fasoulas, C. Traub, D. Garcia-Almiñana, S. Rodriguez-Donaire, M. Sureda, D. Kataria, R. Outlaw, B. Belkouchi, A. Conte, J. S. Perez, R. Villain, B. Heißen, and A. Schwalber, "KeyNote : Discoverer - Making commercial satellite operations in very low earth orbit a reality," in *Proceedings of the International Astronautical Congress, IAC*, vol. 2019-October, 2019.
- [42] J. C. McDowell, "The edge of space : Revisiting the Karman Line," *Acta Astronautica*, vol. 151, no. May, pp. 668–677, 2018.
- [43] G. A. Bird, *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Clarendon Press, 1994.
- [44] M. Schouler, Y. Prévereaud, and L. Mieussens, "Survey of flight and numerical data of hypersonic rarefied flows encountered in earth orbit and atmospheric reentry," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 118, pp. –, 2020.
- [45] M. Schouler, Y. Prévereaud, and L. Mieussens, "IXV post-flight reconstruction and analysis of the aerothermodynamic measurements along the rarefied portion of the reentry trajectory," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 178, p. 121582, 2021.
- [46] M. Schouler, Y. Prévereaud, and L. Mieussens, "Atmospheric model effect on flight data reconstruction : application to the early phase of the IXV reentry," *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, submitted.
- [47] L. Van Ghele, *Analyse aérothermique de la rentrée atmosphérique de l'Intermédiaire eXperimental Vehicle (IXV)*. PhD thesis, ISAE-SUPAERO, 2020.

- [48] V. Drouet, *Modélisation aérothermodynamique des écoulements hypersoniques d'arrière-corps de débris orbitaux*. PhD thesis, ISAE-SUPAERO, 2019.
- [49] S. Livadiotti, N. H. Crisp, P. C. Roberts, S. D. Worrall, V. T. Oiko, S. Edmondson, S. J. Haigh, C. Huyton, K. L. Smith, L. A. Sinpetru, B. E. Holmes, J. Becedas, R. M. Domínguez, V. Cañas, S. Christensen, A. Mølgaard, J. Nielsen, M. Bisgaard, Y. A. Chan, G. H. Herdrich, F. Romano, S. Fasoulas, C. Traub, D. Garcia-Almiñana, S. Rodriguez-Donaire, M. Sureda, D. Kataria, B. Belkouchi, A. Conte, J. S. Perez, R. Villain, and R. Outlaw, "A review of gas-surface interaction models for orbital aerodynamics applications," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 119, 2020.
- [50] Unknown, "U.S Standard Atmosphere 1976," tech. rep., NOAA, NASA and US Air Force, Washington DC, 1976.
- [51] E. Josyula and J. Burt, "Review of Rarefied Gas Effects in Hypersonic Applications," tech. rep., NATO, 2011.
- [52] E. Kustova, A. Krylov, V. Lashkov, and M. Mekhonoshina, "Experimental Facilities and Modelling for Rarefied Aerodynamics," tech. rep., NATO, 2011.
- [53] H.-S. Tsien, "Superaerodynamics, mechanics of rarefied gases," *Journal of the Aeronautical Sciences*, vol. 13, no. 12, pp. 653–664, 1946.
- [54] M. Macrossan, "Scaling Parameters in Rarefied Flow : Breakdown of the Navier-Stokes Equations," tech. rep., University of Queensland, 2006.
- [55] V. Lago, A. Chpoun, and B. Chanetz, "Shock waves in hypersonic rarefied flows," in *High Temperature Phenomena in Shock Waves*, ch. 7, pp. 271–298, 2012.
- [56] N. Singh and T. E. Schwartzentruber, "Aerothermodynamic correlations for high-speed flow," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 821, pp. 421–439, 2017.
- [57] R. Probst, "Shock Wave and Flow Field Development in Hypersonic Re-Entry," *ARS Journal*, vol. 31, no. 2, pp. 185–194, 1961.
- [58] S. J. Plimpton, S. G. Moore, A. Borner, A. K. Stagg, T. P. Koehler, J. R. Torczynski, and M. A. Gallis, "Direct simulation Monte Carlo on petaflop supercomputers and beyond," *Physics of Fluids*, vol. 31, no. 8, pp. 1–18, 2019.
- [59] A. N. Molchanova, A. V. Kashkovsky, and Y. A. Bondar, "Effect of surface catalycity on high-altitude aerothermodynamics of reentry vehicles," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1770, 2016.
- [60] R. Votta, A. Schettino, G. Ranuzzi, and S. Borrelli, "Hypersonic low-density aerothermodynamics of Orion-like exploration vehicle," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 46, no. 4, pp. 781–787, 2009.
- [61] C. Navier, "Mémoire sur les lois du mouvement des fluides," *Académie Royale des Sciences*, vol. 6, pp. 389–440, 1822.
- [62] G. G. Stokes, "On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion, and of the Equilibrium and Motion of Elastic Solids," in *Mathematical and Physical Papers*, pp. 75–129, Cambridge : Cambridge University Press, 2009.
- [63] L. Boltzmann, "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen," in *Kinetische Theorie II*, pp. 115–225, Wiesbaden : Vieweg+Teubner Verlag, 1970.
- [64] F. Sharipov, *Rarefied Gas Dynamics : Fundamentals for Research and Practice*. Weinheim : Wiley-VCH, 2016.
- [65] S. F. Gimelshein and I. J. Wysong, "Bird's total collision energy model : 4 decades and going strong," *Physics of Fluids*, vol. 31, no. 7, pp. 1–16, 2019.
- [66] S. Harris, *An introduction to the theory of the Boltzmann equation*. Holt, Rinehart and Winston, 1971.
- [67] S. Chapman, "On the Law of Distribution of Molecular Velocities, and on the Theory of Viscosity and Thermal Conduction, in a Non-Uniform Simple Monatomic Gas," *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 216, pp. 279–348, jan 1916.
- [68] D. Enskog, "Kinetische Theorie der Vorgänge in mässig verdünnten Gasen.," 1917.
- [69] C. Borgnakke and P. S. Larsen, "Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture," *Journal of Computational Physics*, vol. 18, no. 4, pp. 405–420, 1975.
- [70] R. B. Bond, M. A. Gallis, and J. R. Torczynski, "DSMC predictions of non-equilibrium reaction rates," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1333, pp. 1203–1208, 2011.
- [71] A. L. Garcia, "Direct Simulation Monte Carlo : Theory, Methods, and Open Challenges," tech. rep., 2011.
- [72] V. Casseau, D. E. R. Espinoza, T. J. Scanlon, and R. E. Brown, "A two-temperature open-source CFD model for hypersonic reacting flows, part two : Multi-dimensional analysis," *Aerospace*, vol. 3, no. 4, pp. 1–15, 2016.
- [73] Z. X. Sun, Z. Tang, Y. L. He, and W. Q. Tao, "Proper cell dimension and number of particles per cell for DSMC," *Computers and Fluids*, vol. 50, no. 1, pp. 1–9, 2011.
- [74] I. D. Boyd, "Direct Simulation Monte Carlo for Atmospheric Entry 2. Code Development and Application Results," Tech. Rep. 2, 2009.
- [75] E. Chabut, *Simulation aérothermodynamique en régime d'écoulement raréfié par méthode de Monte-Carlo*. PhD thesis, Université d'Orléans, 2005.

- [76] H. Mertz, *Modélisation des réactions chimiques dans un code de simulation par la méthode Monte Carlo*. PhD thesis, L'Université Paris-Saclay, jan 2019.
- [77] M. A. Gallis and J. R. Torczynski, "Effect of collision-partner selection schemes on the accuracy and efficiency of the direct simulation Monte Carlo method," no. September 2010, pp. 1057–1072, 2011.
- [78] E. Roohi and S. Stefanov, "Collision partner selection schemes in DSMC : From micro/nano flows to hypersonic flows," *Physics Reports*, vol. 656, pp. 1–38, 2016.
- [79] K. Koura and H. Matsumoto, "Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential," *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, vol. 3, pp. 2459–2465, oct 1991.
- [80] C. Zhang and T. E. Schwartzentruber, "Inelastic collision selection procedures for direct simulation Monte Carlo calculations of gas mixtures," *Physics of Fluids*, vol. 25, no. 10, 2013.
- [81] I. D. Boyd, "Temperature dependence of rotational relaxation in shock waves of nitrogen," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 246, pp. 343–360, jan 1993.
- [82] B. K. Annis and A. P. Malinauskas, "Temperature Dependence of Rotational Collision Numbers from Thermal Transpiration," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 54, pp. 4763–4768, jun 1971.
- [83] J. G. Parker, "Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases," *Physics of Fluids*, vol. 2, pp. 449–462, nov 1959.
- [84] R. C. Millikan and D. R. White, "Systematics of vibrational relaxation," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 39, no. 12, pp. 3209–3213, 1963.
- [85] G. A. Bird and T. Abe, "A Comparison of Collision Energy-based and Temperature-based Procedures in DSMC," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1084, pp. 245–250, AIP, jan 2009.
- [86] G. A. Bird, "The Q-K model for gas-phase chemical reaction rates," *Physics of Fluids*, vol. 23, no. 10, pp. 1–13, 2011.
- [87] G. A. Bird, "Chemical reactions in DSMC," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1333, pp. 1195–1202, American Institute of Physics, may 2011.
- [88] M. A. Gallis, R. B. Bond, and J. R. Torczynski, "Assessment of collisional-energy-based models for atmospheric species reactions in hypersonic flows," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 24, no. 2, pp. 241–253, 2010.
- [89] C. Park, "Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions. I - Earth entries," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 7, pp. 9–23, jul 1993.
- [90] T. E. Schwartzentruber and I. D. Boyd, "Progress and future prospects for particle-based simulation of hypersonic flow," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 72, pp. 66–79, 2015.
- [91] K. Fujita and T. Abe, "Coupled Rotation-Vibration-Dissociation Kinetics of Nitrogen Using QCT Models," in *36th AIAA Thermophysics Conference*, (Reston, Virginia), American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2003.
- [92] T. Ozawa, D. A. Fedosov, D. A. Levin, and S. F. Gimelshein, "Quasi-Classical Trajectory Modeling of OH Production in Direct Simulation Monte Carlo," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 19, no. 2, pp. 235–244, 2008.
- [93] J. G. Kim and I. D. Boyd, "Monte Carlo simulation of nitrogen dissociation based on state-resolved cross sections," *Physics of Fluids*, vol. 26, no. 1, 2014.
- [94] J. F. Padilla, K.-C. Tseng, and I. D. Boyd, "Analysis of Entry Vehicle Aerothermodynamics Using the Direct Simulation Monte Carlo Method," in *38th AIAA Thermophysics Conference*, (Toronto), 2005.
- [95] J. F. Padilla, *Assessment of Gas-Surface Interaction Models for Computation of Rarefied*. PhD thesis, The University of Michigan, 2008.
- [96] R. G. Lord, "Application of the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel to direct simulation Monte Carlo calculations," in *17th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, 1990.
- [97] R. G. Lord, "Some extensions to the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel," *Physics of Fluids A*, vol. 3, no. 4, pp. 706–710, 1991.
- [98] R. G. Lord, "Some further extensions of the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model," *Physics of Fluids*, vol. 7, no. 5, pp. 1159–1161, 1995.
- [99] G. Zuppari, L. Morsa, R. Savino, M. Sippel, and T. Schwanekamp, "Rarefied aerodynamic characteristics of aero-space-planes : A comparative study of two gas-surface interaction models," *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, vol. 53, pp. 37–47, 2015.
- [100] K. Moe and M. M. Moe, "Gas-surface interactions in low-Earth orbit," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1333, pp. 1313–1318, 2011.
- [101] N. H. Crisp, P. C. Roberts, S. Livadiotti, A. Macario Rojas, V. T. Oiko, S. Edmondson, S. J. Haigh, B. E. Holmes, L. A. Sinpetru, K. L. Smith, J. Becedas, R. M. Domínguez, V. Sullioti-Linner, S. Christensen, J. Nielsen, M. Bisgaard, Y. A. Chan, S. Fasoulas, G. H. Herdrich, F. Romano, C. Traub, D. García-Almiñana, S. Rodríguez-Donaire, M. Sureda, D. Kataria, B. Belkouchi, A. Conte, S. Seminari, and R. Villain, "In-orbit aerodynamic coefficient measurements using SOAR (Satellite for Orbital Aerodynamics Research)," *Acta Astronautica*, vol. 180, pp. 85–99, 2021.

- [102] G. A. Bird, "The DS2V/3V program suite for DSMC calculations," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 762, pp. 541–546, 2005.
- [103] G. J. LeBeau and F. E. Lumpkin, "Application highlights of the DSMC analysis code (DAC) software for simulating rarefied flows," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 191, no. 6-7, pp. 595–609, 2001.
- [104] M. S. Ivanov, A. V. Kashkovsky, S. F. Gimelshein, G. N. Markelov, A. A. Alexeenko, Y. A. Bondar, G. A. Zhukova, S. B. Nikiforov, and P. V. Vaschenkov, "SMILE System for 2D / 3D DSMC Computations," *25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, no. July, pp. 21–28, 2006.
- [105] J. F. Padilla, "Comparison of DAC and MONACO DSMC Codes With Flat Plate Simulation," Tech. Rep. August, NASA, 2010.
- [106] J. M. Burt, E. Josyula, and I. D. Boyd, "Novel Cartesian implementation of the direct simulation Monte Carlo method," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 26, no. 2, pp. 258–270, 2012.
- [107] D. Andrea, R. Schneider, M. Quandt, C.-D. Munz, S. Roller, and M. Fertig, "Longe Rang Particle Collisions for the PIC/DSMC Simulation Code PicLas," in *30th International Electric Propulsion Conference*, (Florence), 2007.
- [108] R. R. V, "Evaluation of SPARTA DSMC tool for Chemistry modeling in high temperature flows," tech. rep., 2014.
- [109] M. A. Gallis, R. B. Bond, and J. R. Torczynski, "A kinetic-theory approach for computing chemical-reaction rates in upper-atmosphere hypersonic flows," *Journal of Chemical Physics*, vol. 131, no. 12, pp. 1–13, 2009.
- [110] K. Swaminathan-Gopalan, A. Borner, and K. A. Stephani, "Development of a detailed surface chemistry framework in DSMC," in *AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2018*, no. 210059, pp. 1–32, 2018.
- [111] R. S. Myong, A. Karchani, and O. Ejtehadi, "A review and perspective on a convergence analysis of the direct simulation Monte Carlo and solution verification," *Physics of Fluids*, vol. 31, no. 6, 2019.
- [112] J. M. Burt and I. D. Boyd, "Convergence detection in direct simulation Monte Carlo calculations for steady state flows," *Communications in Computational Physics*, vol. 10, no. 4, pp. 807–822, 2011.
- [113] J. N. Moss, T. Pot, B. Chanetz, and M. Lefebvre, "DSMC Simulation of Shock / Shock Interactions : Emphasis on Type IV Interactions," tech. rep., 1998.
- [114] J. N. Moss and G. A. Bird, "DSMC simulations of hypersonic flows with shock interactions and validation with experiments," in *37th AIAA Thermophysics Conference*, 2004.
- [115] C. White, M. K. Borg, T. J. Scanlon, S. M. Longshaw, B. John, D. R. Emerson, and J. M. Reese, "dsmcFoam+ : An OpenFOAM based direct simulation Monte Carlo solver," *Computer Physics Communications*, vol. 224, pp. 22–43, 2018.
- [116] J. Allègre, M. Raffin, A. Chpoun, and L. Gottesdiener, *Rarefied Hypersonic Flow over a Flat Plate with Truncated Leading Edge*. Washington DC : American Institute of Aeronautics and Astronautics, jan 1994.
- [117] D. J. Rader, J. N. Castaneda, J. R. Torczynski, T. W. Grasser, and W. M. Trott, "Measurements of thermal accommodation coefficients.," tech. rep., 2005.
- [118] W. M. Trott, J. N. Castaneda, J. R. Torczynski, M. A. Gallis, and D. J. Rader, "An experimental assembly for precise measurement of thermal accommodation coefficients," *Review of Scientific Instruments*, vol. 82, no. 3, pp. 1–12, 2011.
- [119] J. F. Padilla and I. D. Boyd, "Assessment of Gas-surface interaction models for computation of rarefied hypersonic flow," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 23, no. 1, pp. 96–105, 2009.
- [120] E. Cecil and J. McDaniel, "Planar Velocity and Temperature Measurements in Rarefied Hypersonic Flow Using Iodine LIF," in *38th AIAA Thermophysics Conference*, (Reston, Virginia), American Institute of Aeronautics and Astronautics, jun 2005.
- [121] J. N. Moss and J.-C. Lengrand, "Hypersonic Experimental and Computational Capability, Improvement and Validation," in *AGARD-AR-319 Vol. II*, ch. Rarefied F, 1998.
- [122] J. Allègre, D. Bisch, and J.-C. Lengrand, "Experimental Rarefied Density Flowfields at Hypersonic Conditions over 70 Degree Blunted Cone," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 34, no. 6, pp. 714–718, 1997.
- [123] J. Allègre, D. Bisch, and J.-C. Lengrand, "Experimental Rarefied Aerodynamic Forces at Hypersonic Conditions over 70 Degree Blunted Cone," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 34, no. 6, pp. 719–723, 1997.
- [124] A. Klothakis and I. K. Nikolos, "Modeling of Rarefied Hypersonic Flows Using the Massively Parallel Dsmc Kernel " Sparta ",," in *8th International Congress on Computational Mechanics*, vol. 12, 2015.
- [125] S. Gu and H. Olivier, "Capabilities and limitations of existing hypersonic facilities," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 113, no. November 2019, p. 100607, 2020.
- [126] D. R. Chapman, "An Analysis of Base Pressure at Supersonic Velocities and Comparison with Experiment," tech. rep., NASA, 1951.
- [127] L. M. G. Walpot, M. J. Wright, P. Noeding, and F. Schrijer, "Base flow investigation of the Apollo AS-202 Command Module," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 48-49, pp. 57–74, 2012.

- [128] L. Wu, C. White, T. J. Scanlon, J. M. Reese, and Y. Zhang, "A kinetic model of the Boltzmann equation for non-vibrating polyatomic gases," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 763, pp. 24–50, 2015.
- [129] K.-C. Tseng, J.-S. Wu, and I. D. Boyd, "Simulations of Re-entry vehicles by using DSMC with chemical-reaction module," in *A Collection of Technical Papers - 14th AIAA/AHI International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference*, vol. 3, pp. 1789–1801, 2006.
- [130] J. N. Moss, C. E. Glass, and F. A. Greene, "Blunt body aerodynamics for hypersonic low density flows," in *25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pp. 1–6, 2006.
- [131] Anon, "U. S. Standard Atmosphere, 1962," tech. rep., NASA, 1962.
- [132] K. Sutton, "Air Radiation Revisited," in *AIAA 19th Thermophysics Conference*, (Snowmass), 1984.
- [133] P. A. Gnoffo, R. N. Gupta, and J. L. Shinn, "Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium," Tech. Rep. 2867, NASA, 1989.
- [134] P. A. Gnoffo, "An upwind-biased, point-implicit relaxation algorithm for viscous, compressible perfect-gas flows.," tech. rep., NASA, 1990.
- [135] D. B. Lee and W. D. Goodrich, "The Aerothermodynamic Environment of the Apollo Command Module During Superorbital Entry," tech. rep., NASA, 1972.
- [136] M. J. Wright, D. Prabhu, and E. R. Martinez, "Analysis of apollo command module afterbody heating part I : AS-202," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 20, no. 1, pp. 16–30, 2006.
- [137] E. R. Hillje, "Entry Flight Aerodynamics from Apollo Mission AS-202," tech. rep., NASA, 1967.
- [138] R. Gardon, "A Transducer for the Measurement of Heat-Flow Rate," *Journal of Heat Transfer*, pp. 396–398, 1960.
- [139] D. B. Lee and J. J. Bertin, "Heat-Transfer Rate and Pressure Measurements Obtained During Apollo Orbital Entries," tech. rep., NASA, 1970.
- [140] C. O. Johnston and A. M. Brandis, "Features of afterbody radiative heating for earth entry," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 52, no. 1, pp. 105–119, 2015.
- [141] D. Zimpfer, P. Hattis, J. Ruppert, and D. Gavert, "Space shuttle GN and C development history and evolution," in *AIAA SPACE Conference and Exposition 2011*, no. April, 2011.
- [142] A. M. Whitnah and E. R. Hillje, "Space Shuttle Wind Tunnel Testing Program Summary," tech. rep., NASA, 1984.
- [143] J. C. Young, J. M. Underwood, E. R. Hillje, A. M. Whitnah, P. O. Romere, J. D. Gamble, B. B. Roberts, G. M. Ware, W. I. Scallion, B. Spencer, J. P. Arrington, and D. C. Olsen, "Aerodynamic Challenges of the Design and Development of the Space Shuttle Orbiter," in *NASA Conference Publication*, no. pt 1, pp. 209–263, 1985.
- [144] J. W. Haney, "Orbiter Entry Heating Lessons Learned from Development Flight Test Program," in *NASA Conference Publication*, no. pt 2, pp. 719–751, 1983.
- [145] D. M. Curry, "Space Shuttle Orbiter Thermal Protection System Design and Flight Experience," tech. rep., NASA, 1993.
- [146] D. A. Throckmorton, "Shuttle entry aerothermodynamic flight research : The orbiter experiments (OEX) program," in *AIAA 17th Aerospace Ground Testing Conference*, vol. 30, pp. 449–465, 1992.
- [147] R. C. Blanchard and G. M. Buckt, "Determination of rarefied-flow aerodynamics of the shuttle orbiter from flight measurements on STS-6 and STS-7," in *AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting, 1985*, 1985.
- [148] R. C. Blanchard and J. F. Rutherford, "Shuttle orbiter high resolution accelerometer package experiment : Preliminary flight results," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 22, no. 4, pp. 474–480, 1985.
- [149] R. C. Blanchard and G. M. Buck, "Rarefied-flow aerodynamics and thermosphere structure from shuttle flight measurements," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 23, no. 1, pp. 18–24, 1986.
- [150] M. A. Gallis, K. A. Boyles, and G. J. Lebeau, "DSMC simulations in support of the STS-107 accident investigation," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 762, pp. 1211–1216, 2005.
- [151] J. C. Adams, W. R. Martindale, A. W. Mayne, and M. E. O., "Real gas scale effects on hypersonic laminar boundary-layer parameters including effects of entropy-layer swallowing," in *AIAA 9th Fluid and Plasma Dynamics Conference*, pp. 1–12, 1976.
- [152] E. V. Zoby, "Approximate Heating Analysis for the Windward Symmetry Plane of Shuttle-Like Bodies At Large Angle of Attack.," *Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. 82, pp. 229–247, 1982.
- [153] J. L. Shinn and A. L. Simmonds, "Comparison of Viscous-Shock-Layer Heating Analysis With Shuttle Flight Data in Slip Flow Regime," in *AIAA*, pp. 1–9, 1984.
- [154] D. A. Throckmorton, "Benchmark aerodynamic heat-transfer data from the first flight of the Space Shuttle Orbiter," in *AIAA 20th Aerospace Sciences Meeting*, pp. 0–10, 1982.
- [155] C. Park and S. Yoon, "Calculation of real-gas effects on blunt-body trim angles," *AIAA Journal*, vol. 30, no. 4, pp. 999–1007, 1992.
- [156] K. W. Iliff and M. F. Shafer, "Space shuttle hypersonic aerodynamic and aerothermodynamic flight research and the comparison to ground test results," tech. rep., 1993.

- [157] S. Matsumoto, Y. Kondoh, S. Nagai, R. Tagai, T. Imada, and E. Nakano, "Aerodynamic oscillation and attitude control analysis for reentry capsule using OREX flight data and wind tunnel data," in *AIAA Guidance, Navigation, and Control Conference*, no. January, pp. 1–11, 2016.
- [158] R. N. Gupta, J. N. Moss, and J. M. Price, "Assessment of Thermochemical Nonequilibrium and Slip Effects for Orbital Reentry Experiment (OREX)," in *31st AIAA Thermophysics Conference*, (New Orleans), 1996.
- [159] J. N. Moss and G. A. Bird, "Monte carlo simulations in support of the shuttle upper atmospheric mass spectrometer experiment," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 2, no. 2, pp. 138–144, 1988.
- [160] P. Baiocco, "Pre-X Experimental Re-entry Lifting Body : Design of Flight Test Experiments for Critical Aerothermal Phenomena," in *RTO-EN-AVT-130*, 2007.
- [161] G. Tumino, S. Mancuso, J. M. Gallego, S. Dussy, J. P. Preaud, G. Di Vita, and P. Brunner, "The IXV experience, from the mission conception to the flight results," *Acta Astronautica*, vol. 124, pp. 2–17, 2016.
- [162] O. Lambert and M.-C. Bernelin, "Space Rider Aerodynamics and Aerothermodynamics from hypersonic to subsonic flight," in *8th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*, 2019.
- [163] M. Cioeta, G. Di Vita, M. T. Signorelli, G. Bianco, M. Cutroni, F. Damiani, V. Ferretti, and A. Rotondo, "Design, qualification, manufacturing and integration of IXV Ablative Thermal Protection System," *Acta Astronautica*, vol. 124, pp. 90–101, 2016.
- [164] F. Buffenoir, T. Pichon, and R. Barreteau, "IXV thermal protection system : Post-flight preliminary analysis," in *7th EUCASS*, vol. 15, pp. 10101–10110, 2017.
- [165] F. Buffenoir, C. Zeppa, T. Pichon, and F. Girard, "Development and flight qualification of the C–SiC thermal protection systems for the IXV," *Acta Astronautica*, vol. 124, pp. 85–89, 2016.
- [166] F. Buffenoir, D. Escadre, T. Brault, L. Rival, and F. Girard, "Dynamical and thermal qualification of the C–SiC nose for the IXV," *Acta Astronautica*, vol. 124, pp. 79–84, 2016.
- [167] R. Haya-Ramos, G. Blanco, I. Pontijas, D. Bonetti, J. Freixa, C. Parigini, E. Bassano, R. Carducci, M. Sudars, A. Denaro, R. Angelini, and S. Mancuso, "The design and realisation of the IXV Mission Analysis and Flight Mechanics," *Acta Astronautica*, vol. 124, pp. 39–52, 2016.
- [168] P. Reulet, D. Nortershauser, and P. Millan, "Inverse method using infrared thermography for surface temperature and heat flux measurements," in *20th International Congress on Instrumentation in Aerospace Simulation Facilities, 2003. ICIASF '03.*, pp. 118–126, 2003.
- [169] J. V. Beck, B. Blackwell, and C. R. J. St. Clair, *Inverse heat conduction problems*. 1985.
- [170] Unknown, "Guide to Reference and Standard Atmosphere Models," Tech. Rep. BSR/AIAA G-003C-2010 (Revision of G-003B-2004), American National Standard, 2004.
- [171] Unknown, "COSPAR International Reference Atmosphere (CIRA-2012)," tech. rep., 2012.
- [172] J. M. Picone, A. E. Hedin, D. P. Drob, and A. C. Aikin, "NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere : Statistical comparisons and scientific issues," *Journal of Geophysical Research : Space Physics*, vol. 107, no. A12, pp. 0–16, 2002.
- [173] J. N. Moss, G. A. Bird, and V. Dogra, "Nonequilibrium thermal radiation for an aeroassist flight experiment vehicle," in *26th Aerospace Sciences Meeting*, 1988.
- [174] L. Sagnieres and I. Sharf, "Uncertainty Characterization of Atmospheric Density Models for Orbit Prediction of Space Debris," in *7th European Conference on Space Debris*, no. June, (Darmstadt), pp. 18–21, 2017.
- [175] T. Banyai, E. Torres, A. V. Kashkovsky, P. V. Vashchenkov, M. S. Ivanov, and P. Rambaud, "Direct Monte Carlo Simulations of the Intermediate Experimental Vehicle at Early Stages of Reentry," in *Proc. of 7th European Symposium on Aerothermodynamics*, (Brugge), 2011.
- [176] A. Refloch, B. Courbet, A. Murrone, C. Laurent, J. Troyes, G. Chaineray, J. B. Dargaud, and F. Vuillot, "CEDRE Software," *Journal AerospaceLab*, no. 2, pp. 1–10, 2011.
- [177] D. S. Liechty, A. J. Wise, S. Subramaniam, and K. A. Stephani, "Comparison of CFD and DSMC using calibrated transport parameters," in *AIP Conference Proceedings*, vol. 2132, 2019.
- [178] K. A. Stephani, D. B. Goldstein, and P. L. Varghese, "Consistent treatment of transport properties for five-species air direct simulation Monte Carlo/Navier-Stokes applications," *Physics of Fluids*, vol. 24, no. 7, pp. 1–23, 2012.
- [179] X. Y. Wang, C. Yan, Y. K. Zheng, and E. L. Li, "Assessment of chemical kinetic models on hypersonic flow heat transfer," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 111, pp. 356–366, 2017.
- [180] K. J. Higdon, B. A. Cruden, A. M. Brandis, D. S. Liechty, D. B. Goldstein, and P. L. Varghese, "DSMC shock simulation of saturn entry probe conditions," in *46th AIAA Thermophysics Conference*, pp. 1–18, 2016.
- [181] K. Sutton and A. J. Graves, "A general stagnation-point convective-heating equation for arbitrary gas mixtures," Tech. Rep. November 1971, NASA, 1971.
- [182] L. Morsa, G. Zuppari, R. Votta, and A. Schettino, "Influence of chemical models on heat flux for EXPERT and Orion capsules," in *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G : Journal of Aerospace Engineering*, vol. 228, pp. 930–948, 2014.

- [183] T. D. Holman and I. D. Boyd, "Effects of continuum breakdown on the surface properties of a hypersonic sphere," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 23, no. 4, pp. 660–673, 2009.
- [184] D. S. K. Reddy and K. Sinha, "Effect of Transport Coefficients on Aero-thermal Predictions of Re-entry Flows," in *Symposium on Applied Aerodynamics and Design of Aerospace Vehicle*, 2009.
- [185] G. E. Palmer and M. J. Wright, "Comparison of Methods to Compute High-Temperature Gas Viscosity," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 17, no. 2, pp. 232–239, 2003.
- [186] J. T. Emmert, D. P. Drob, J. M. Picone, D. E. Siskind, M. Jones, M. G. Mlynczak, P. F. Bernath, X. Chu, E. Doornbos, B. Funke, L. P. Goncharenko, M. E. Hervig, M. J. Schwartz, P. E. Sheese, F. Vargas, B. P. Williams, and T. Yuan, "NRLMSIS 2.0 : A Whole-Atmosphere Empirical Model of Temperature and Neutral Species Densities," *Earth and Space Science*, vol. 8, no. 3, 2021.
- [187] J. Annaloro, S. Galera, P. Käräng, G. Prigent, T. Lips, and P. Omaly, "Comparison between two spacecraft-oriented tools : PAMPERO & SCARAB," *Journal of Space Safety Engineering*, vol. 4, no. 1, pp. 15–21, 2017.
- [188] Y. Prevèreaud, *Contribution à la modélisation de la rentrée atmosphérique des débris spatiaux*. PhD thesis, ISAE Supaero, 2017.
- [189] A. Falchi, *Atmospheric Re-entry Analysis of Space Objects*. PhD thesis, University of Strathclyde, 2020.
- [190] D. Mostaza Prieto, B. P. Graziano, and P. C. Roberts, "Spacecraft drag modelling," *Progress in Aerospace Sciences*, vol. 64, pp. 56–65, 2014.
- [191] R. Martino, "Heat Transfer in Slip Flow," tech. rep., Institute of Aerophysics, University of Toronto, UTIA Report 35, 1955.
- [192] B. Reeves and W. Van Camp, "Aerodynamic Heating of Simple Geometries in the Slip- and Intermediate-Flow Regimes," *Journal of the Aerospace Sciences*, pp. 838–839, 1959.
- [193] E. Blick, "Aerodynamic Coefficients in the Slip and Transition Regime," *AIAA Journal*, vol. 1, no. 11, pp. 2656–2657, 1963.
- [194] S. Nomura, "Correlation of Hypersonic Stagnation Point Heat Transfer at Low Reynolds Numbers," *AIAA Journal*, vol. 21, no. 11, pp. 1598–1600, 1982.
- [195] D. J. Masson, D. N. Morris, and D. E. Bloxson, "Measurements of Sphere Drag From Hypersonic Continuum to Free-Molecular Flow," tech. rep., U. S. Air Force, 1960.
- [196] F. W. Matting, "Approximate Bridging Relations in the Transitional Regime between Continuum and Free-Molecule Flows," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 8, no. 1, pp. 35–40, 1971.
- [197] R. C. Blanchard, "Rarefied flow lift-to-drag measurements of the Shuttle Orbiter," in *ICAS-86-2.10.2*, 1986.
- [198] R. C. Blanchard, "Rarefied-Flow Aerodynamics Measurement Experiment on the Aeroassist Flight Experiment Vehicle," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 28, no. 4, pp. 368–375, 1991.
- [199] M. S. Ivanov, G. N. Markelov, and S. F. Gimelshein, "High-Altitude Capsule Aerodynamics with Real Gas Effects," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 35, no. 1, pp. 16–22, 1998.
- [200] R. G. Wilmoth, R. Blanchard, and J. N. Moss, "Rarefied Transitional Bridging of Blunt Body Aerodynamics," in *21st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pp. 1–8, 1998.
- [201] V. Kotov, E. Lychkin, A. Reshetin, and A. Shelkonogov, "An Approximate Method of Aerodynamics Calculation of Complex Shape Bodies in a Transition Region," in *13th International Conference on Rarefied Gas Dynamics*, pp. 487–494, 1982.
- [202] L. Morsa, G. Zuppari, A. Schettino, and R. Votta, "Analysis of bridging formulae in transitional regime," in *27th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, vol. 1333, pp. 1319–1324, 2011.
- [203] J. Potter and S. Peterson, "Local Bridging to Predict Aerodynamic Coefficients in Hypersonic, Rarefied Flow," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 29, no. 3, pp. 344–351, 1992.
- [204] P. M. Mehta, E. Minisci, M. Vasile, A. C. Walker, and M. Brown, "An Open-source Hypersonic Aerodynamic And Aerothermodynamic Modeling Tool," in *8th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles*, no. 1, p. 9, 2015.
- [205] H. Klinkrad, G. Koppenwallner, D. Johannsmeier, M. Ivanov, and A. Kashkovsky, "Free-molecular and transitional aerodynamics of spacecraft," *Advances in Space Research*, vol. 16, no. 12, pp. 33–36, 1995.
- [206] R. G. Wilmoth, R. A. Mitcheltree, and J. N. Moss, "Low-density aerodynamics of the Stardust sample return capsule," *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 36, no. 3, pp. 436–441, 1999.
- [207] L. H. Sentman, "Free molecule flow theory and its application to the determination of aerodynamic forces," tech. rep., Lockheed Missiles and Space Company, Lockheed Aircraft Corporation, 1961.
- [208] J. A. Fay and F. R. Riddell, "Theory of Stagnation Point Heat Transfer in Dissociated Air," *Journal of the Aerospace Sciences*, vol. 25, no. 2, pp. 73–85, 1958.
- [209] S. H. Park, D. Neeb, G. Plyushchev, P. Leyland, and A. Gülhan, "A study on heat flux predictions for re-entry flight analysis," *Acta Astronautica*, vol. 187, no. June, pp. 271–280, 2021.
- [210] P. Sagnier and J. L. Véran, "Flow characterization in the ONERA F4 high-enthalpy wind tunnel," *AIAA Journal*, vol. 36, no. 4, pp. 522–531, 1998.

- [211] A. M. Brandis and C. O. Johnston, "Characterization of stagnation-point heat flux for earth entry," *45th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference*, no. June, pp. 1–20, 2014.
- [212] Y. Prévèreaud, J.-L. Véran, and J. Annaloro, "Noncatalytic and Finite Catalytic Heating Models for Atmospheric Re-entry Codes," in *First International Orbital Debris Conference (IOC)*, 2019.
- [213] I. N. Murzinov, "Laminar boundary layer on a sphere in hypersonic flow of equilibrium dissociating air," *Fluid Dynamics*, vol. 1, no. 2, pp. 131–133, 1966.
- [214] J. D. Anderson, "Hypersonic and high temperature gas dynamics, AIAA," *Inc., Reston, VA*, 1989.
- [215] S. Srinivasan, J. C. Tannehill, and K. J. Weilmuenster, "Simplified Curve Fits for the Thermodynamic Properties of Equilibrium Air.," tech. rep., 1987.
- [216] A. C. Jain and J. R. Hayes, "Distributions on Space Vehicles : Planar Bodies," *AIAA Journal*, vol. 42, no. 10, 2004.
- [217] A. C. Jain and J. R. Hayes, "Distributions on Space Vehicles : Planar Bodies," *AIAA Journal*, vol. 42, no. 10, 2004.
- [218] I. G. Brykina, "Asymptotic investigation of heat transfer and skin friction in three-dimensional hypersonic rarefied gas flows," *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 80, no. 3, pp. 244–256, 2016.
- [219] A. Falchi, E. Minisci, M. Vasile, D. Rastelli, and N. Bellini, "DSMC-based Correction Factor for Low-fidelity Hypersonic Aerodynamics of Re-entering Objects and Space Debris," in *7Th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (Eucass)*, vol. 10, 2017.
- [220] A. Falchi, E. Minisci, M. Vasile, and M. Kubicek, "Aero-Thermal Re-Entry Sensitivity Analysis Using Dsmc and a High Dimensional Model Representation-Based Approach," in *7th European Conference on Space Debris*, no. April, pp. 18–21, 2017.
- [221] A. Falchi, L. Gentile, E. Minisci, M. Tirelli, and P. Perugini, "Launcher Vehicle Aerothermodynamics and Fairing Separation Altitude Effects on Payload Temperature," in *7Th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (Eucass)*, pp. 1–16, 2019.
- [222] T. Simpson, J. Peplinski, P. Koch, and J. Allen, "Metamodels for Computer-Based Engineering Survey and Recommendations," *Research in Engineerhtg Design*, 1997.
- [223] V. Drouet, Y. Prévèreaud, J. M. Moschetta, N. Bartoli, S. Dubreuil, and J. Annaloro, "Reduced order models for heat flux and pressure distributions on space debris afterbodies," *Acta Astronautica*, vol. 181, no. February, pp. 446–460, 2021.
- [224] H. Kutkan and S. Eyi, "Aerothermodynamic shape optimization of reentry capsules using DSMC and POD methods," in *10th International Conference on Computational Fluid Dynamics*, pp. 1–21, 2018.
- [225] N. L. Donaldson, "Aerodynamic Coefficient Modelling of Cylindrical Space Debris Analogues During Atmospheric Entry," in *First International Debris Conference*, 2019.
- [226] J. Walsh, L. Berthoud, and C. Allen, "Drag reduction through shape optimisation for satellites in Very Low Earth Orbit," *Acta Astronautica*, vol. 179, no. December 2019, pp. 105–121, 2021.
- [227] J. Antony, "7 - fractional factorial designs," in *Design of Experiments for Engineers and Scientists (Second Edition)* (J. Antony, ed.), pp. 87–112, Oxford : Elsevier, second edition ed., 2014.
- [228] C. Rasmussen and C. Williams, *Gaussian Processes for Machine Learning*. The MIT Press, 2006.
- [229] J. Sacks, S. B. Schiller, and W. J. Welch, "Designs for computer experiments," *Technometrics*, vol. 31, no. 1, pp. 41–47, 1989.
- [230] M. Bouhleh, J. Hwang, N. Bartoli, R. Lafage, J. Morlier, and R. Martin, "A Python surrogate modeling framework with derivatives," *Advances in Engineering Software*, no. 0965-9978, p. 102662, 2019.
- [231] F. Rosenblatt, "THE PERCEPTRON : A PROBABILISTIC MODEL FOR INFORMATION STORAGE AND ORGANIZATION IN THE BRAIN," *Psychological Review*, vol. 65, no. 6, pp. 386–408, 1958.
- [232] Ö. F. Ertuğrul, "A novel type of activation function in artificial neural networks : Trained activation function," *Neural Networks*, vol. 99, pp. 148–157, 2018.
- [233] P. Cheridito, A. Jentzen, A. Riekert, and F. Rossmannek, "A proof of convergence for gradient descent in the training of artificial neural networks for constant target functions," 2021.
- [234] D. P. Kingma and J. L. Ba, "Adam : A method for stochastic optimization," in *3rd International Conference on Learning Representations*, pp. 1–15, 2015.
- [235] J. Dulchi, E. Hazan, and Y. Singer, "Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization," *Journal of Machine Learning Research*, vol. 12, pp. 2121–2159, 2011.
- [236] S. De, A. Mukherjee, and E. Ullah, "Convergence guarantees for RMSProp and ADAM in non-convex optimization and an empirical comparison to Nesterov acceleration," tech. rep., 2018.
- [237] H. Li, Z. Xu, G. Taylor, C. Studer, and T. Goldstein, "Visualizing the Loss Landscape of Neural Nets," in *32nd Conference on Neural Information Processing Systems*, 2018.
- [238] D. Harrison and D. L. Rubinfeld, "Hedonic housing prices and the demand for clean air." <https://www.cs.toronto.edu/~delves/data/boston/bostonDetail.html>, 1978.

- 
- [239] A. L. Maas, R. E. Daly, P. T. Pham, D. Huang, A. Y. Ng, and C. Potts, “Learning word vectors for sentiment analysis.” <https://ai.stanford.edu/~amaas/data/sentiment/>, June 2011.
- [240] P. Nagarajan, G. Warnell, and P. Stone, “Deterministic Implementations for Reproducibility in Deep Reinforcement Learning,” tech. rep., 2018.
- [241] S. S. Alahmari, D. B. Goldgof, P. R. Mouton, and L. O. Hall, “Challenges for the Repeatability of Deep Learning Models,” *IEEE Access*, vol. 8, pp. 211860–211868, 2020.
- [242] S. Bhojanapalli, K. Wilber, A. Veit, A. S. Rawat, S. Kim, A. Menon, and S. Kumar, “On the Reproducibility of Neural Network Predictions,” pp. 1–19, 2021.
- [243] J. Bergstra, R. Bardenet, Y. Bengio, and B. Kégl, “Algorithms for hyper-parameter optimization,” in *25th Annual Conference on Neural Information Processing Systems*, pp. 1–9, 2011.
- [244] H. Cho, Y. Kim, E. Lee, D. Choi, Y. Lee, and W. Rhee, “Basic Enhancement Strategies When Using Bayesian Optimization for Hyperparameter Tuning of Deep Neural Networks,” *IEEE Access*, vol. 8, pp. 52588–52608, 2020.
- [245] G. A. Bird, “Sophisticated DSMC,” tech. rep., Santa Fe, 2007.
- [246] T. Soubrie, “Tristan SOUBRIE Prise en compte de l’ionisation et du rayonnement dans la modélisation de écoulements de rentrée terrestre et martienne,” 2006.
- [247] A. Falchi, M. Vasile, A. Falchi, V. Renato, E. Minisci, and M. Vasile, “FOSTRAD : An Advanced Open Source Tool for Re-entry Analysis 15 th Reinventing Space Conference,” in *Reinventing Space Conference*, no. October, pp. 1–15, 2017.

## Résumé

Pour le développement d'une nouvelle génération de satellites très basse orbite, il est fondamental de minimiser la traînée et les contraintes aérodynamiques afin de pouvoir se déplacer sur des orbites les plus basses possibles tout en garantissant l'intégrité de la charge utile. En parallèle, la loi d'opération spatiale de 2008 impose aux opérateurs français de limiter les risques liés aux débris spatiaux lors de leur désorbitation. De même, la conception de nouveaux véhicules de rentrée réutilisables nécessite une connaissance toujours plus aboutie des conditions de vol propres à une rentrée atmosphérique.

L'atteinte de ces objectifs passe donc par la maîtrise de l'ensemble des contraintes aérodynamiques (coefficients de forces et de moments) et aérothermodynamiques (flux de chaleur pariétal) notamment à haute altitude. Les écoulements rencontrés en orbite basse et durant la première phase de rentrée atmosphérique sont des écoulements hypersoniques raréfiés en déséquilibre fort, de sorte que les méthodes de CFD traditionnelles basées sur l'hypothèse des milieux continus ne sont pas applicables. Dans ce cas, il convient d'utiliser des méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann de type DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo). Cependant, en raison du couplage fort existant entre la trajectographie, la forme de l'objet et l'écoulement, il est impossible d'élaborer une géométrie optimisée ni de simuler la rentrée atmosphérique complète avec des outils dits de « haute-fidélité ». L'objectif de cette thèse est donc de développer des modèles réduits en régime hypersonique raréfié capables de déterminer les coefficients aérodynamiques et le flux de chaleur pariétal d'une géométrie quelconque en des temps de calcul très faibles.

Dans un premier temps, les phénomènes propres aux écoulements hypersoniques raréfiés ont été étudiés en considérant plusieurs rentrées véhiculaires pour lesquelles des données de vol ont été obtenues. Un ensemble de simulations DSMC avec le code SPARTA, a ainsi permis d'établir une stratégie pour le développement d'une nouvelle forme de modèles réduits. Deux modèles de krigeage ont d'abord été développés pour estimer les coefficients de pression et de flux de chaleur au point d'arrêt en fonction des conditions de vol. Ensuite, des réseaux de neurones profonds ont été entraînés pour calculer les distributions de pression, de frottement et de flux de chaleur en tout point d'un véhicule. Enfin, l'évaluation de ces modèles par comparaison aux méthodes par panneaux actuellement utilisées dans la majorité des codes de rentrée a mis en avant le meilleur niveau de précision des méthodes d'apprentissage. Un certain nombre de perspectives ont également été ouvertes quant à des voies d'améliorations futures.

**Mots clés :** rentrée atmosphérique, écoulements hypersoniques raréfiés, simulation DSMC, modèles réduits

## Abstract

The development of a new generation of very low Earth orbit satellites requires the minimization of the aerodynamic drag and of the aerothermodynamic load in order to move along orbits as low as possible while guarantying the integrity of its payload. In the meantime, the space operation act of 2008 compels french operators to limit the debris related risks during the de-orbitation phase. In the same way, a deeper knowledge of the flight conditions during an atmospheric reentry is paramount for the design of new reusable reentry vehicles.

These objectives call for a firm grasp of the aerodynamic (forces and moment coefficients) and aerothermodynamic (heat flux) load namely at high altitudes. The flows encountered in very low Earth orbit and during the first phase of an atmospheric reentry are hypersonic rarefied flows in strong nonequilibrium characterized by the failure of the classic CFD methods based on the continuum fluid equations. In such conditions, a kinetic method such as the DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) must be used instead. However, because of the strong coupling between the trajectory, the object's shape and the flow, it is not possible to design an optimized geometry nor to simulate a full reentry with high fidelity tools. The objective of this work is therefore to develop reduced models for the hypersonic rarefied regime that are capable of fast computing the aerodynamic and aerothermodynamic coefficients of any geometry.

The specific phenomena related to hypersonic rarefied flows were first investigated in the light of flight data collected during several vehicle reentries. In this context, the DSMC simulations performed with SPARTA contributed to the development of new surrogate models. Hence, two kriging models were designed to predict the stagnation pressure and heat flux coefficients as a function of the flight conditions. Then, deep neural networks were trained in order to compute the pressure, friction and heat flux distributions in any location of the considered vehicle. Finally, the evaluation of these new models by comparison with the panel based methods currently employed in most reentry codes highlighted the better level of preciseness of the learning methods. A few prospects for future improvements were also opened.

**Keywords :** atmospheric reentry, hypersonic rarefied flow, DSMC simulation, surrogate models