Titre : Modèles collisionnels-radiatifs et simulation DSMC appliqués à l'étude des régimes transitionnels.

Mots-clés : aérodynamique hypersonique ; entrée atmosphérique ; écoulements raréfiés ; DSMC ; modèles état-par-état

L'onde de choc qui se forme en amont d’un objet (véhicule ou débris) lors de son entrée dans l’atmosphère à vitesse hypersonique est caractérisée par une forte augmentation de pression et de température, qui suscite à son tour une intense activité chimique et radiative. Celle-ci entretient un niveau élevé de déséquilibre entre les modes énergétiques internes du gaz. Les interactions étroites entre les aspects thermodynamiques, chimiques et radiatifs ne peuvent être décrits avec précision qu’en faisant appel à une modélisation cinétique état-par-état, où chaque niveau d’énergie excité est pris en compte individuellement, permettant ainsi d'accéder à la distribution des états excités.

A haute altitude, l'atmosphère est si ténue que certains phénomènes de raréfaction, résultant d'un déséquilibre prononcé du mode de translation du gaz, se manifestent dans l’écoulement. Les hypothèses sur lesquelles reposent les équations d’Euler ou de Navier-Stokes ne sont alors plus valides et des méthodes numériques spécifiques doivent être employées. La plus commune d’entre elles est la DSMC (Direct Simulation Monte Carlo). Dans le régime dit transitionnel, qui correspond à des altitudes de 70-90 km, l'écoulement fait face à la fois aux effets de raréfaction et des conditions thermiques extrêmes susceptibles d'entraîner une activité chimique comme à plus basse altitude.

Les travaux présentés dans la thèse comprennent deux volets.

Dans un premier temps, il s'est agi de mettre en œuvre la méthode DSMC pour simuler l'écoulement autour de formes géométriques simples dans des conditions représentatives d'une entrée atmosphérique terrestre depuis l'orbite basse. Nous avons ainsi pu examiner les effets de déséquilibre transitionnel. Les propriétés aérodynamiques globales (trainée, flux thermique) ont été déterminées et confrontées aux corrélations disponibles dans la littérature.

Dans un second temps, nous nous sommes efforcés d'associer un modèle chimique collisionnel-radiatif électronique développé au CORIA à une approche DSMC afin de disposer d’un outil permettant d’étudier les phénomènes d'excitation électronique et d'ionisation dans la couche de choc en régime transitionnel. Les états excités et les espèces chargées étant présents en faible proportion, une implantation directe du modèle chimique détaillé dans un algorithme DSMC est inenvisageable pour des raisons de coût et une approche découplée a donc été adoptée. Une technique de recouvrement de type réacteur Lagrangien, basée sur une description continue multitempérature du fluide, est employée pour simuler la cinétique état-par-état de ces espèces alors que le champ aérodynamique est précalculé en DSMC avec un modèle chimique simple. Les résultats obtenus concernant la densité électronique sont comparés à des données expérimentales et la pertinence de l'approche lagrangienne comme méthode de simulation de l'ionisation dans les couches de choc raréfiées est discutée.

Title: Collisional-radiative modelling and DSMC study of hypersonic transitional flows.

Keywords: hypersonic flows; atmospheric entry; rarefied flows; DSMC; state-to-state models

The shockwave formed in front of a body entering the atmosphere at hypersonic speed is characterized by a strong compression and a sudden rise in temperature, which generate an intense chemical and radiative activity. This results in a significant nonequilibrium between the internal energy modes of the gas. The strong interaction between thermodynamic, chemical and radiative phenomena may only be described accurately using a state-to-state kinetic approach, in which the evolution of the population of each atomic or molecular energy level is followed individually, thus enabling the computation of the excited states distribution.

As the altitude rises and the density of the atmosphere lowers, the flow starts to exhibit various rarefaction effects, as a consequence of the increasing degree of nonequilibrium of the translational mode of the gas. The assumptions underlying Euler and Navier-Stokes equations cease to be valid and one must resort to specific numerical approaches, the most commonly used of which is the Direct Simulation Monte Carlo method, or DSMC. In the so-called transitional regime, which corresponds to altitudes of about 70-90 km, the flow is at the same time affected by rarefaction effects and already chemically active, so both phenomena must be taken into account.

The work presented herein is twofold.

First, the DSMC method is used to simulate the hypersonic flow over objects of simple geometrical shape in conditions representative of atmospheric entry from a low earth orbit, with the aim of investigating translational nonequilibrium effects. The global aerodynamic properties of the object (total drag, heat flux) are computed and compared to empirical correlations recently published.

In the second part of the thesis, an electronic state-to-state chemical model developed at CORIA is combined with the DSMC technique in order to study electronic excitation and ionisation of the shock layer in the transitional regime. Excited species, ions and electrons being present in very small amounts, the direct implementation of the detailed chemical model in the DSMC algorithm is impracticable, because of its prohibitive computational cost, and a decoupled approach is necessary. An overlay method known as the lagrangian reactor approach, based on a multitemperature representation of the gas, is used to perform the state-to-state kinetic simulation of excitation and ionisation along the streamlines of a pre-computed flowfield, obtained from a DSMC simulation employing a simplified, cheap chemical model. The predicted values of electronic density in the flow around a probe are compared to experimental data from in-flight measurements. The adequacy of the lagrangian reactor approach as a method to simulate ionisation processes in rarefied shock layer flows is then assessed.