



HAL
open science

Cartographie d'espèces chimiques en combustion par tomographie et spectroscopie d'absorption multifaisceaux

Vincent Corbas

► **To cite this version:**

Vincent Corbas. Cartographie d'espèces chimiques en combustion par tomographie et spectroscopie d'absorption multifaisceaux. Optique [physics.optics]. Université Paris Saclay (COmUE), 2019. Français. NNT : 2019SACLS491 . tel-02413238

HAL Id: tel-02413238

<https://theses.hal.science/tel-02413238>

Submitted on 16 Dec 2019

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.

Cartographie d'espèces chimiques en combustion par tomographie et spectroscopie d'absorption multifaisceaux

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay
préparée à l'Université Paris-Sud

École Doctorale n°572 Ondes et Matières (EDOM)

Spécialité de doctorat : Physique

Thèse présentée et soutenue à Palaiseau, le 05/12/2019, par

Vincent Corbas

Composition du Jury :

Weidong Chen Professeur, Université du Littoral Côte d'Opale (LPCA)	Président du Jury
Frédéric Grisch Professeur, INSA Rouen (CORIA)	Rapporteur
Jean-François Giovannelli Professeur, Université de Bordeaux (IMS Bordeaux)	Rapporteur
Raphaël Vallon Maître de conférences, Université de Reims (GSMA)	Examineur
Brigitte Tretout Directeur de recherche émérite, Université Paris-Saclay	Examineur
Guy Le Besnerais Directeur de recherche, Université Paris-Saclay (ONERA)	Examineur
Ajmal Khan Mohamed Maître de recherche, Université Paris-Saclay (ONERA)	Directeur de thèse
Frédéric Champagnat Maître de recherche, Université Paris-Saclay (ONERA)	Invité

Remerciements

Avant toute chose, je tiens à remercier mon directeur de thèse Ajmal Khan Mohamed de m'avoir donné l'opportunité d'effectuer cette thèse ainsi que pour toute son aide et son soutien au cours de la réalisation de ce travail.

J'exprime tout autant ma gratitude à mes encadrants Guy Le Besnerais et Frédéric Champagnat pour leur aide, leurs précieux conseils, leur disponibilité et leur soutien tout au long de la thèse. Cette gratitude va aussi à Brigitte Trétout pour sa précieuse aide pour les relectures et corrections de mon manuscrit, ainsi qu'à Myriam Raybaut et Alexandre Bresson pour leurs conseils et l'organisation des derniers mois de thèse.

J'adresse également ma reconnaissance à tous les membres du jury de thèse. Je remercie Jean-François Giovannelli et Frédéric Grisch d'avoir rédigé les rapports de mon mémoire de thèse, ainsi que Raphael Vallon et enfin le président Weidong Chen.

Je remercie également, toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail.

J'adresse tout d'abord mes remerciements à toute l'équipe du « Département Physique, Instrumentation, Environnement et Espace » de l'ONERA et plus particulièrement à tous les membres de l'équipe de l'unité « Source Laser et Métrologie » pour leur soutien et leurs conseils, ainsi que pour leur accueil et leur bonne humeur au quotidien.

Je tiens également à remercier Gautier Vilmart, Jean-Pierre Faleni et Philippe Nicolas dont l'aide a été très précieuse pour les travaux que nous avons effectué sur les installations d'essais de l'ONERA.

Je remercie également les membres des équipes du « Département Multi-Physique pour l'Energétique » et du « Département Electromagnétisme et Radar » de l'ONERA avec qui j'ai eu souvent l'occasion de travailler pour des expérimentations parfois en conditions difficiles et qui ont également contribué à la réussite de ce projet.

Je tiens enfin à remercier tous les doctorants et stagiaires avec qui j'ai eu l'occasion de travailler et qui ont contribué à la bonne ambiance de travail dans laquelle j'ai effectué cette thèse.

Table des matières

Remerciements	3
Introduction.....	9
Chapitre 1 : Etude bibliographique	12
I) La méthode de la Tunable Diode laser Absorption Spectroscopy (TDLAS).....	12
1) Principes physiques et formulation générale	12
2) Applications de la TDLAS à la combustion	16
a) Méthodes d'inversion spectrales	16
b) Sources lasers utilisées.....	16
c) Applications à l'étude de la combustion et limitations.....	17
II) La tomographie linéaire : définition et état de l'art.....	18
1) Les méthodes de tomographie analytique	18
a) Calcul de projections : la transformée de Radon	18
b) La rétroprojection	19
c) Le théorème de la coupe centrale	20
d) La rétroprojection filtrée.....	21
e) La transformée d'Abel.....	23
f) Bilan de l'analyse des méthodes analytiques	24
2) Les méthodes de tomographie algébriques	25
a) Modélisation du problème tomographique.....	25
b) Algebraic Reconstruction Technique (ART).....	26
c) Multiplicative Algebraic Reconstruction technique (MART).....	27
d) Simultaneous Iterative Reconstruction Technique (SIRT).....	27
e) Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique (SART).....	28
f) Minimisation des moindres carrés	29
g) Méthodes de régularisation	30
h) Optimisation des positions et angles des rayons.....	32
III) Méthode de Tunable Diode Laser Absorption Tomography (TDLAT).....	35
1) Le problème non-linéaire de la TDLAT.....	35
2) Tomographie linéaire puis calcul de paramètres spectroscopiques	36
3) Tomographie hyper-spectrale	41

4)	Caractérisations sur bancs de combustion	46
IV)	Introduction des travaux réalisés au cours de la thèse.....	47
Chapitre 2 : Mesures par TDLAS.....		48
I)	Modélisation numérique de la spectroscopie d'absorption	48
1)	Méthode d'inversion spectrale.....	48
2)	Outils de calcul numérique de spectres d'absorption	50
II)	Modèle de spectromètre d'absorption.....	52
1)	Principe d'un spectromètre de TDLAS	52
2)	Techniques d'étalonnage.....	53
a)	Etalonnage de l'axe des longueurs d'ondes.....	53
b)	Enveloppe du spectre.....	55
c)	Sources d'erreurs et d'incertitudes.....	56
III)	Spectromètres développés	57
1)	Le spectromètre H ₂ O.....	57
2)	Le spectromètre CO	59
3)	Le spectromètre HCl	62
4)	Le spectromètre potassium K	62
5)	Le spectromètre CO ₂ et H ₂ O	63
IV)	Mise en œuvre sur bancs de combustion	64
1)	Essais avec le banc H ₂ O.....	65
a)	Mesures sur flamme plate MacKenna	65
b)	Mesures sur le banc de combustion MASCOTTE	68
2)	Application de la TDLAS à la caractérisation du propergol solide : mesures sur le banc Chamade.....	73
a)	Caractérisation du CO	75
b)	Caractérisation du HCl.....	79
c)	Caractérisation du potassium K	81
V)	Conclusion sur les essais TDLAS et extension vers la TDLAT.....	82
Chapitre 3 : Mise en œuvre d'un banc de TDLAS multi-espèces sur un banc de combustion de propergol solide		83
I)	Objectifs de la campagne de mesures	84
1)	Présentation du banc de combustion et des contraintes expérimentales.....	84

2)	Objectifs des mesures par TDLAS	85
3)	Description du système expérimental	86
4)	Démarche de la comparaison entre simulations et mesures	89
II)	Acquisition et traitement des spectres d'absorption	91
1)	Séquence d'acquisition	91
2)	Acquisition des spectres	92
III)	Exploitation des données expérimentales	95
1)	Reconstruction des paramètres thermodynamiques	95
2)	Reconstruction des profils de concentration.....	99
a)	Profil de CO.....	99
b)	Profil de HCl.....	100
c)	Profil de K	102
IV)	Bilan des essais TDLAS avec balayage tournant	104
Chapitre 4 : Méthode de reconstruction tomographique et étude paramétrique		105
I)	Modèle de reconstruction tomographique	105
1)	Principe général de l'algorithme développé.....	106
2)	Discrétisation de la zone d'étude et lancer de rayon	107
3)	Algorithme de reconstruction tomographique.....	109
4)	Mise en œuvre	113
a)	Normalisation des grandeurs physiques à reconstruire	114
b)	Initialisation des champs 2D à reconstruire et des spectres projetés (étape A) 114	
c)	Calcul numérique de la matrice Jacobienne (étape B).....	115
d)	Inversion du système linéaire (étape C).....	119
e)	Convergence de l'algorithme	119
f)	Gestion du pas à chaque itération	119
5)	Paramètres influençant la qualité de la reconstruction tomographique	120
II)	Etude la régularisation dans un cas de problème inverse non-linéaire.....	123
1)	Influence de la régularisation, choix des paramètres de régularisation	123
a)	Cas d'étude.....	123
b)	Grandeurs de contrôle de la qualité d'une reconstruction	128
c)	Observation de l'effet de la régularisation	129

2)	Optimisation de la régularisation	132
a)	Simplification du modèle.....	132
b)	Optimisation des paramètres de régularisation	133
c)	Optimisation simultanée des paramètres de régularisation	139
d)	Bilan de l'étude de l'effet de la régularisation	142
III)	Evaluation des capacités de reconstruction de l'algorithme	143
1)	Première partie de l'étude paramétrique : effets du bruit et optimisation de la configuration de mesures	144
2)	Deuxième partie de l'étude paramétrique : effets de l'initialisation de l'algorithme	156
3)	Proposition de protocole de réglage de l'algorithme.....	162
4)	Troisième partie de l'étude paramétrique : évaluation de la robustesse de la reconstruction	163
IV)	Bilan du développement de l'algorithme de TDLAT et de l'étude paramétrique...	168
Chapitre 5 : Mise en œuvre expérimentale de la TDLAT		170
I)	Système expérimental.....	170
II)	Acquisition et étalonnage des données expérimentales	174
III)	Reconstructions tomographiques expérimentales	180
1)	Choix des paramètres de régularisation	180
2)	Reconstruction avec initialisation plate.....	181
3)	Reconstruction avec initialisation sous forme de disque uniforme	185
IV)	Analyse des résultats expérimentaux.....	191
1)	Comparaison avec les prédictions de l'étude paramétrique.....	191
2)	Sensibilité de la reconstruction.....	193
3)	Propositions d'améliorations de la reconstruction expérimentale.....	197
Conclusion		200
Bibliographie		202
Publications		206

Introduction

Dans un contexte d'étude de la réduction de l'émission de gaz polluants par les moteurs aéronautiques, l'un des principaux enjeux consiste à optimiser la combustion et prospector des nouveaux carburants émettant le moins de gaz nocifs possibles. D'où la nécessité de caractériser les écoulements de combustion en simulation et expérimentalement notamment par l'étude des concentrations chimiques, de la pression et de la température. De nombreuses techniques de diagnostics optiques non-intrusifs existent et sont capables de mesurer ce type de grandeurs physiques. En revanche, peu permettent de quantifier via des cartographies instantanées et avec une résolution spatiale adéquate les profils de concentrations chimiques multi-espèces et de grandeurs thermodynamiques. Or ce type de données expérimentales en deux voire trois dimensions est primordial pour affiner les modèles numériques et optimiser les moteurs.

Une méthode expérimentale couramment utilisée pour la caractérisation des espèces chimiques et des grandeurs thermodynamiques est la Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy (TDLAS). Cette technique de caractérisation non-intrusive est basée sur la mesure de l'absorption d'une intensité laser avec une haute résolution spectrale. Dans la pratique elle nécessite l'utilisation d'une diode laser accordable en longueur d'onde permettant d'émettre sur un intervalle de longueur d'onde où se trouvent des raies d'absorption des espèces chimiques présentes dans l'écoulement. Le résultat de la mesure est un spectre d'absorption qu'il est possible d'exploiter par des techniques d'inversion spectrale afin de quantifier les concentrations chimiques des espèces étudiées ainsi que les données thermodynamiques de l'écoulement, à savoir : la pression, la température et la vitesse. Le problème de cette technique est que les grandeurs mesurées sont intégrées sur la ligne de visée du laser traversant l'écoulement. Cette technique fournit donc des mesures sans aucune résolution spatiale le long de l'axe de visée.

L'objectif de cette thèse est d'améliorer cette technique de caractérisation afin d'obtenir des mesures de concentrations chimiques et de grandeurs thermodynamiques spatialement résolues. L'idée qui a été développée au cours de cette étude a été de combiner le traitement des spectres d'absorption venant de multiples faisceaux laser à un algorithme de tomographie pour obtenir des cartographies en deux dimensions de concentrations et grandeurs thermodynamiques. La méthode obtenue est appelée Tunable Diode Laser Absorption Tomography (TDLAT).

La tomographie désigne en général une méthode de traitement linéaire qui permet de reconstruire un objet en deux (respectivement trois) dimensions à partir d'un grand nombre de projections en une (respectivement deux) dimensions de cet objet. Dans le cas de l'application de la tomographie à la TDLAS plusieurs problématiques se posent. Premièrement, d'un point de vue expérimental, les mesures sont destinées à être effectuées

sur des bancs de combustions qui sont des environnements impliquant de nombreuses contraintes d'accès optiques, ce qui a pour conséquence qu'on dispose finalement d'un nombre de projections très limité pour effectuer la reconstruction tomographique. Il va donc être indispensable de trouver un moyen de compenser ce manque d'information. Deuxièmement, on verra plus loin dans le texte que la relation entre un spectre d'absorption et les quantités recherchées est non-linéaire. La non-linéarité de la relation d'observation conduit à un problème d'optimisation difficile car le critère n'est pas, en général, unimodal. De plus les méthodes classiques de réglage des algorithmes tomographiques ne seront pas toujours applicables.

Les objectifs de cette étude sont donc : premièrement de développer un dispositif expérimental permettant d'acquérir le maximum de spectres d'absorption à plusieurs positions et angles autour d'un écoulement réactif dans l'environnement et les contraintes d'un banc de combustion, deuxièmement de développer un algorithme de tomographie permettant d'extraire des distributions en deux dimensions de concentrations chimiques, pression et température à partir de spectres d'absorption en tenant compte de la non-linéarité du problème et des contraintes sur le nombre et la configuration géométrique des projections, liées aux limitations des accès optiques.

Ainsi, cette étude s'organise autour de deux axes principaux de recherche. Le premier concerne le développement et la mise en œuvre d'un système expérimentale de tomographie sur bancs de combustions. Notons que plusieurs spectromètres de TDLAS doivent être envisagés pour permettre la mesure des espèces chimiques caractéristiques des nombreuses réactions de combustions qui prennent place dans les moteurs aéronautiques. A la question de spectromètres s'ajoute celle de multiplier le nombre de faisceaux émis par ces spectromètres afin d'acquérir des projections à plusieurs positions et angles autour de l'écoulement. Le second axe de recherche concerne les aspects numériques et le développement de l'algorithme de TDLAT. Cet algorithme doit être capable d'exploiter l'information issue de plusieurs spectres d'absorption et de fournir des cartographies de concentrations chimiques et de grandeurs thermodynamiques. Il doit également exploiter des informations a priori afin de compenser les limitations des données (faible nombre, orientations limitées et bruit de mesure). Il conviendra enfin d'étudier l'influence de ces limitations et des degrés de réglage de la méthode sur la qualité des reconstructions produites.

Dans un premier temps, la thèse présente les principes généraux de la TDLAS et de la tomographie en faisant un état de l'art des techniques classiques utilisées dans la littérature. Nous passons en revue les différentes approches combinant ces deux techniques et conduisant à différentes formulations de la TDLAT et nous les comparons entre elles afin de déterminer laquelle est la plus appropriée à notre cas d'étude. L'objectif de ce premier chapitre est de choisir quelle méthode sera développée au cours de la thèse et quelles sont ses limites actuelles afin de proposer des améliorations.

Le second chapitre de la thèse porte sur le développement expérimental du système de TDLAT. Nous présentons les différents spectromètres de TDLAS qui ont été développés en mettant en évidence leurs intervalles spectraux de fonctionnement, les espèces qu'ils sont en mesure de caractériser, leurs caractéristiques de fonctionnement et les techniques d'étalonnage associées. Des applications de ces spectromètres sur des bancs de combustion sont également présentées. L'objectif de ce chapitre est de déterminer quelles contraintes ont une influence sur la qualité d'une mesure de TDLAS afin d'en tenir compte dans le développement du système de tomographie TDLAT.

Le troisième chapitre porte sur une campagne d'essai réalisée sur un banc de combustion de propergol solide mettant en jeu trois spectromètres et un système mécanique de mesures par balayage en rotation permettant d'accéder à une forme de résolution spatiale des informations recueillies. Cette expérience nous a permis de renforcer nos connaissances sur les contraintes expérimentales propres aux bancs de combustion, mais surtout de concevoir une configuration de mesures permettant la TDLAT et que nous nous étudierons ensuite en lien avec nos algorithmes de tomographie.

Le quatrième chapitre porte sur le développement de l'algorithme de TDLAT. Ce chapitre présente, dans une première partie, le principe général de l'algorithme basé sur une minimisation de moindres carrés non-linéaire associée à des algorithmes de régularisation. Nous présentons sa mise en œuvre numérique ainsi que ses caractéristiques de fonctionnement. Dans une seconde partie, une étude paramétrique de cet algorithme est effectuée afin d'étudier ses performances et optimiser ses réglages et ainsi de l'adapter aux mieux aux différentes conditions expérimentales auxquelles il va être soumis.

Dans le cinquième chapitre, nous présentons une première mise en œuvre expérimentale de notre système de tomographie sur un brûleur expérimental. Le système de scan par rotation développé et étudié précédemment est utilisé ici pour acquérir des spectres d'absorption dans une flamme de géométrie connue et l'algorithme de tomographie que nous avons implémenté permet ensuite de traiter ces spectres expérimentaux. L'objectif est de déterminer si cette méthode est capable de réaliser des reconstructions tomographiques correctes à partir de données expérimentales.

Enfin, le chapitre de conclusion fait un bilan du travail réalisé au cours de la thèse en récapitulant les résultats de simulations et de mesures qui ont été effectués. Cela nous permet d'analyser les performances du système de TDLAT développé au cours de la thèse et de proposer des perspectives d'améliorations.

Chapitre 1 : Etude bibliographique

Ce chapitre présente les principes des méthodes de mesures qui font l'objet de la thèse. Tout d'abord, l'étude porte sur la spectroscopie d'absorption par diode laser accordable. Le principe, les applications à l'étude des phénomènes de combustions ainsi que les performances et les limites de cette méthode sont présentées, notamment l'absence de résolution spatiale sur les mesures. Ensuite, une amélioration de cette méthode est proposée par l'exploitation d'algorithmes de tomographie. Cette partie de l'analyse porte dans un premier temps sur un état de l'art des techniques de tomographie linéaire les plus utilisées dans la littérature. Puis, dans un second temps, nous expliquons comment ces techniques de tomographie sont appliquées à la spectroscopie d'absorption et pourquoi cette utilisation devient un problème de tomographie non-linéaire. Enfin, l'étude proposée dans cette thèse ainsi que ses objectifs sont exposés plus précisément.

1) La méthode de la Tunable Diode laser Absorption Spectroscopy (TDLAS)

1) Principes physiques et formulation générale

La technique de mesure optique développée dans cette thèse est basée sur le principe de la spectroscopie d'absorption par diode laser accordable couramment appelée Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy (TDLAS). Cette technique repose sur la capacité de molécules ou d'atomes à l'état gazeux à absorber un rayonnement optique à des longueurs d'ondes particulières. Le modèle de base étudié en spectroscopie d'absorption est un milieu gazeux traversé par un faisceau laser (Figure 1).

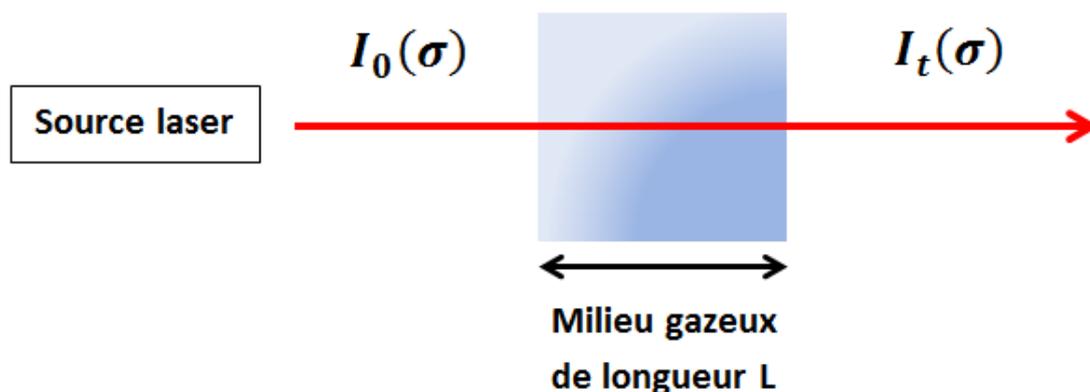


Figure 1 : Représentation schématique d'une mesure par spectroscopie d'absorption dans un milieu gazeux

Une molécule dans son état d'énergie fondamental E_0 est capable d'absorber de la lumière à un nombre d'onde σ_0 pour passer dans un état d'énergie excité E_1 si la condition suivante est respectée [1] :

$$E_1 - E_0 = h \cdot c \cdot \sigma_0 \quad (1)$$

Avec h la constante de Planck. Cependant, l'absorption peut aussi se produire à des valeurs σ autour de σ_0 suivant divers phénomènes qui peuvent légèrement changer les valeurs de énergies E_0 et E_1 ou suivant comment la valeur de σ_0 est vue dans le référentiel de la molécule. On a donc affaire à un profil d'absorption au lieu d'une absorption monochromatique. Dans ce travail nous tiendrons compte que des deux phénomènes qui aboutissent à ce profil et de leur élargissement en fonction des conditions du milieu.

Le premier phénomène est appelé l'élargissement Doppler [2] qui caractérise le décalage en nombre d'onde de la valeur σ_0 vers des valeurs plus faibles ou plus fortes en fonction du mouvement des molécules dont les vitesses dépendent de la température T du milieu. La distribution du décalage de nombre d'onde est modélisée par une loi normale centrée en σ_0 :

$$f_D(T) = \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha_D(T)^2}} e^{-\frac{(\sigma - \sigma_0)^2 \ln(2)}{\alpha_D(T)^2}} \quad (2)$$

$\alpha_D(T)$ le coefficient caractérisant l'élargissement Doppler dont l'expression est :

$$\alpha_D(T) = \sqrt{\ln(2)} \frac{\sigma_0}{c} \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (3)$$

Avec k_B la constante de Boltzmann, c la vitesse de la lumière, T la température dans le milieu gazeux et m la masse du gaz étudié.

Le second phénomène est appelé l'élargissement collisionnel. Celui-ci est provoqué par la pression dans le milieu gazeux étudié qui va influencer les collisions entre les molécules et modifier leur énergie de transition et donc leur longueur d'onde d'absorption [3]. Ce décalage en nombre d'onde s'exprime par un profil Lorentzien modélisé par l'expression :

$$f_L(T, P) = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha_L(P, T)}{\alpha_L(P, T)^2 + \left(\sigma - (\sigma_0 + \delta(P_{ref})P) \right)^2} \quad (4)$$

P la pression dans le gaz et T sa température, $\delta(P_{ref})$ un coefficient caractérisant un décalage en longueur d'onde de la raie de référence proportionnel à un écart entre la

pression du milieu et une pression de référence P_{ref} , $\alpha_L(P, T)$ le coefficient caractérisant l'élargissement collisionnel dont l'expression donnée dans l'article [3] est :

$$\alpha_L(P, T) = (\gamma_{lor} \cdot (P - P_{self}) + \gamma_{self} \cdot P_{self}) \cdot \left(\frac{T_0}{T}\right)^{y_L} \quad (5)$$

Avec P_{self} la pression partielle de l'espèce étudiée $T_0 = 276,0 K$ la température de référence, γ_{self} le coefficient d'élargissement collisionnel des molécules de l'espèce étudiée entre elles, γ_{lor} le coefficient d'élargissement provenant des collisions entre les molécules de l'espèce étudiée et les autres espèces du milieu gazeux et y_L un coefficient qui pondère l'effet de la température sur l'élargissement.

Cependant, ces deux phénomènes se produisent simultanément lorsqu'un milieu gazeux absorbe le rayonnement d'un laser, même si dans certains cas l'un des phénomènes peut être négligeable devant l'autre. Le profil de la raie d'absorption a alors la forme d'un profil de Voigt qui correspond à la convolution des profils Gaussien et Lorentzien [4]. Ce type de profil noté $f(\sigma - \sigma_0, T, P)$ est donné par l'équation :

$$f(\sigma - \sigma_0, T, P) = \frac{1}{\alpha_D(T)\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\alpha_L(P, T)}{\pi\alpha_D(T)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\frac{\sigma - \sigma_0}{\alpha_D(T)} - t\right)^2 + \left(\frac{\alpha_L(P, T)}{\alpha_D(T)}\right)^2} dt \quad (6)$$

L'effet de chaque type d'élargissement sur une raie d'absorption est représenté sur la Figure 2.

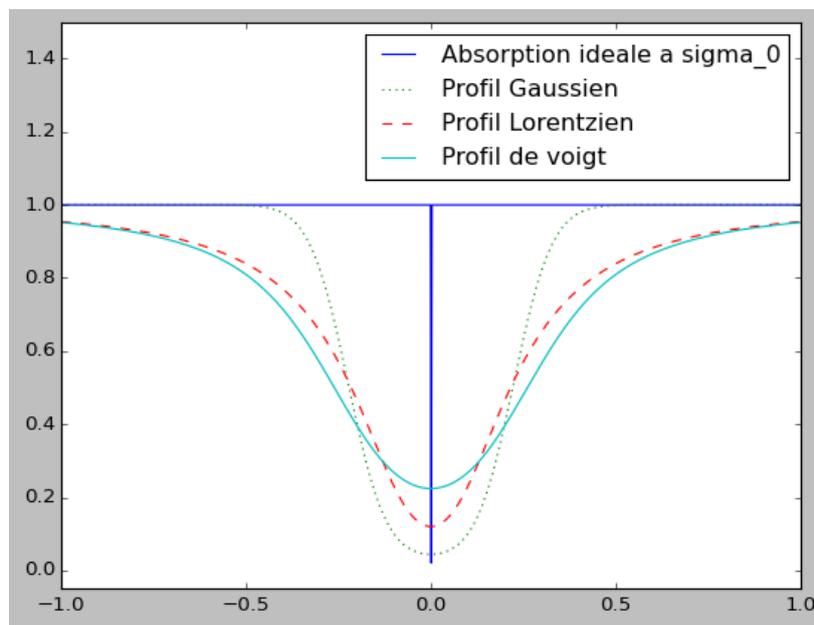


Figure 2 : Effet de l'élargissement Doppler (profil Gaussien), de l'élargissement collisionnel (profil Lorentzien) sur une raie d'absorption et de la convolution des deux profils (profil de Voigt)

En considérant un faisceau laser d'intensité lumineuse I_0 traversant un milieu gazeux sur une longueur L comme représenté sur la Figure 1, le rapport entre l'intensité transmise I_t et l'intensité incidente I_0 sur un intervalle de longueur d'onde donne un spectre d'absorption. Si le milieu gazeux contient une espèce chimique absorbant à la longueur d'onde σ_0 , l'absorption caractérisée par le rapport entre $I_t(\sigma)$ et $I_0(\sigma)$ est exprimée selon la loi de Beer-Lambert sous la forme suivante :

$$\frac{I_t(\sigma)}{I_0(\sigma)} = -\exp(\alpha(\sigma).L) \quad (7)$$

Cette formule, extraite de l'article [5], est la plus générale possible de la loi de Beer-Lambert. On note $\alpha(\sigma)$ le coefficient d'absorption du milieu exprimé :

$$\alpha(\sigma) = X.S(\sigma_0, T).f(\sigma - \sigma_0, T, P) \quad (8)$$

Avec X , la concentration chimique en nombre de molécules par unités de volume de l'espèce chimique absorbant le faisceau laser exprimée en cm^{-3} . Le terme $f(\sigma - \sigma_0, T, P)$ correspond au profil de Voigt et caractérise la forme de la raie d'absorption centrée sur la longueur d'onde σ_0 comme montré dans l'équation (6).

Le terme $S(\sigma_0, T)$ est la force de raie [3] exprimant l'intensité de la raie d'absorption au nombre d'onde σ_0 . Elle est donnée par l'expression :

$$S(\sigma_0, T) = S(\sigma_0, T_0) \cdot \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \cdot \frac{T_0}{T} \exp\left(-\frac{hcE}{k_B} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \cdot \frac{\left(1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma_0}{k_B T}\right)\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma_0}{k_B T_0}\right)\right)} \quad (9)$$

Avec, E l'énergie de transition de la raie (cm^{-1}), $Q(T)$ et $Q(T_0)$ les fonctions de partitions ([6],[7]) de la molécule étudiée pour la température du milieu et pour la température de référence.

L'ensemble des paramètres utiles pour calculer l'ensemble des termes du profil de Voigt et de la force de raie est donné dans la base de données HITRAN (High-Resolution Transmission Molecular Absorption Database) pour chaque molécule [8]. L'ensemble de ces outils mathématiques permet de modéliser numériquement un spectre d'absorption en fonction des propriétés en termes de concentration chimique, pression et température du milieu gazeux étudié.

2) Applications de la TDLAS à la combustion

a) Méthodes d'inversion spectrales

L'exploitation des données mesurées par spectroscopie d'absorption peut se faire de deux manières. La première consiste à mesurer l'intensité maximum de deux raies d'absorption distinctes et d'exploiter la sensibilité de ces deux raies pour déterminer la température dans le milieu en supposant un équilibre de Boltzmann puis d'en déduire la concentration de l'espèce chimique [9]. L'inconvénient de cette approche est qu'elle nécessite une calibration en intensité très précise pour mesurer correctement le maximum d'une raie. En revanche, elle permet d'obtenir une bonne résolution temporelle si les mesures sont effectuées au cours du temps lors d'une combustion.

La seconde méthode qui est plus précise exploite l'information sur un ou plusieurs profils de raie sur un intervalle adéquat de longueur d'onde [10]. La concentration des espèces chimiques présentes dans le milieu ainsi que la pression et la température vont avoir une influence sur la force de raie (9) et sur le profil de Voigt (6). Pour déterminer ces valeurs, il faut calculer numériquement un spectre à partir de l'équation (7) sur le même intervalle spectral et de réaliser un ajustement de courbe entre le spectre mesuré et le spectre calculé. On retient du meilleur ajustement des valeurs de concentration, pression et température qu'on infère au milieu gazeux observé. Cette méthode est plus robuste et plus précise du fait du grand nombre de points spectraux utilisés.

b) Sources lasers utilisées

Le balayage d'un intervalle de longueur d'onde est assuré par une source laser accordable. Il en existe de plusieurs types exploités en TDLAS. Parmi les plus utilisées, on peut trouver les diodes laser dont l'accordabilité est obtenue par un balayage de son courant d'alimentation ou par balayage de sa température. Elles sont les plus couramment utilisées en raison de leur faible coût et de leur facilité de mise en œuvre expérimentale. Elles permettent de balayer des longueurs d'ondes entre 400 nm et 3000 nm. Pour étudier des phénomènes à des longueurs d'ondes plus lointaines dans l'infra-rouge, il est également possible d'utiliser des Interband Cascade lasers (ICL) qui peuvent atteindre des longueurs d'ondes entre 3 μm et 6 μm ou des Quantum Cascade laser (QCL) qui peuvent atteindre des longueurs d'ondes entre 6 μm et 14 μm [11]. Pour exploiter des intervalles plus grands il est possible d'exploiter l'émission d'un super-continuum ou d'utiliser des lasers à peignes de fréquences [12].

c) Applications à l'étude de la combustion et limitations

La TDLAS est une technique très utilisée dans l'industrie depuis longtemps : une revue des applications industrielles en 2007 peut être trouvée dans l'article [13]. L'article plus récent [14] présente des applications et des variantes de la TDLAS dans l'étude de la combustion. Les mesures de caractérisation portent généralement sur des espèces donnant des informations sur le phénomène de combustion observé, à savoir H_2O , CO , CO_2 , NO , NO_2 , OH ou encore CH_4 .

Dans le domaine de la propulsion aéronautique, les mesures par TDLAS servent à caractériser les espèces chimiques ainsi que les paramètres thermodynamiques dans les foyers de combustion. La mesure de ces grandeurs physiques fournit des données permettant de corriger ou d'affiner les modèles numériques décrivant les phénomènes de combustion. Ces modèles sont principalement utilisés dans la conception et l'amélioration de la conception des moteurs. On peut citer des mesures dans des moteurs à combustion interne, sur des moteurs à ondes de détonation pulsées ou encore sur des statoréacteurs à combustion supersonique. Dans le cas des caractérisations sur statoréacteurs, les mesures par TDLAS sont choisies en raison de leur facilité de mise en œuvre dans les conditions expérimentales complexes des bancs de statoréacteurs (hautes pressions et températures) et leur rapidité d'acquisition. Les mesures se font avec plusieurs faisceaux placés à différents endroits du moteur dans les zones d'injections, de combustion et d'éjections des gaz brûlés [15] et donnent des valeurs de température, pression, vitesse d'écoulement et concentrations en H_2O , CO et CO_2 .

Néanmoins la TDLAS présente une limitation majeure qui est l'absence de résolution spatiale. En effet, les valeurs de concentration, pression et température sont des mesures intégrées sur la ligne de visée du laser. Ce qui pose un problème car dans la plupart des cas, ce type de milieu de combustion, présente des fortes inhomogénéités spatiales pour ces paramètres. La résolution spatiale est donc primordiale, pour caractériser la combustion et valider des modèles simulation numérique. Il est donc nécessaire d'améliorer cette technique pour le munir de résolution spatiale. L'idée est de multiplier le nombre de faisceaux de mesures acquis à plusieurs positions et angles autour de l'écoulement et de combiner les spectres d'absorption mesurés par traitement numérique pour reconstruire une information spectrale localisée. Ce type de technique relève du domaine de la tomographie que nous présentons dans la suite.

II) La tomographie linéaire : définition et état de l'art

Il existe de nombreuses applications de la tomographie. La plupart sont basées sur la reconstruction en 2D ou 3D de densités à partir de projections 1D ou 2D linéaires de ces objets. Elles sont notamment utilisées dans de nombreux domaines industriels et médicaux. La qualité d'une reconstruction tomographique dépend des contraintes de l'étude, notamment des possibilités d'acquisition (nombre et localisation des sources, fréquences d'acquisition) et des objets étudiés (dimension 2D ou 3D, extension spatiale, objet fixe ou variable dans le temps). Mais elle dépend aussi de l'algorithme de reconstruction tomographique utilisé, qui doit être bien adapté à ces contraintes. Dans le domaine de la tomographie linéaire, il existe deux grandes catégories de méthodes de reconstruction : les méthodes analytiques et les méthodes algébriques. Dans cette partie, nous allons nous intéresser à un état de l'art des méthodes issues de ces deux grandes catégories. Nous restreindrons l'étude au cas à deux dimensions dans cette thèse, bien que certaines soient également applicables à des reconstructions en trois dimensions.

1) Les méthodes de tomographie analytique

a) Calcul de projections : la transformée de Radon

Dans un premier temps, nous allons nous intéresser aux méthodes analytiques de tomographie. Le principe de base de ces méthodes est la reconstruction d'un objet en 2D à partir de projections en 1D de cet objet. Nous allons tout d'abord définir les principes et grandeurs utilisées dans une reconstruction tomographique. L'objet en deux dimensions est modélisé par une fonction $f(x, y)$ avec x et y les coordonnées des axes horizontaux et verticaux. Les mesures utilisées pour une telle reconstruction sont appelées des projections notées $p(\theta, u)$ avec u la coordonnée de position sur l'axe de la projection et θ l'angle de l'axe de la projection par rapport à l'axe \vec{x} . La projection est modélisée par l'intégration de la fonction f sur une ligne de visée positionnée en u et faisant un angle θ par rapport à l'axe horizontal (Figure 3).

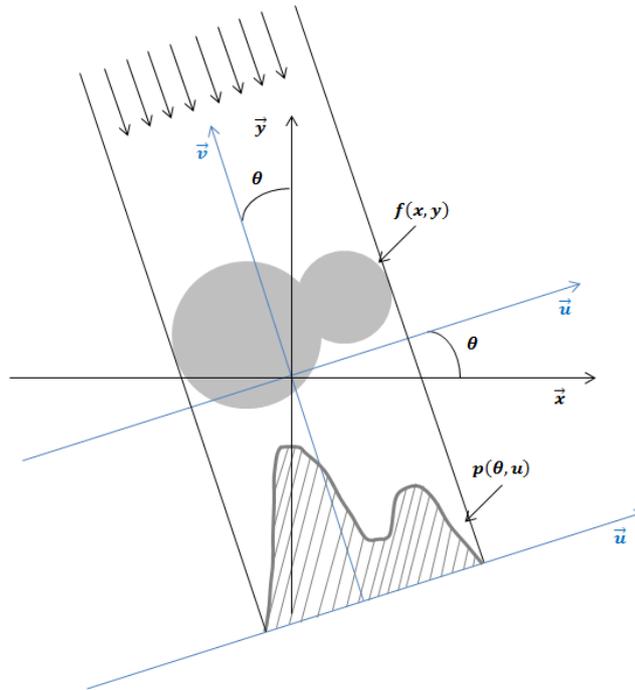


Figure 3 : Représentation schématique d'une projection tomographique

La relation entre la fonction f et l'ensemble des projections qu'on peut en faire selon le schéma de la Figure 3 est appelée transformée de Radon ([16],[17]) et notée $R[f](\theta, u)$. La Transformée de Radon associe une famille de projections $p(\theta, u)$ à toute fonction $f(x, y)$ de la manière suivante :

$$R[f](\theta, u) = p(\theta, u) = \int_v f(u \cos(\theta) - v \sin(\theta), u \sin(\theta) + v \cos(\theta)) dv \quad (10)$$

b) La rétroprojection

Le calcul le plus basique permettant une reconstruction est la méthode de la rétroprojection qui consiste à attribuer la valeur de $p(u, \theta)$ sur l'ensemble des points traversés par la ligne de la projection, à répéter cette opération pour chaque projection et à sommer sur chaque point les contributions de chacune d'entre elles. L'opérateur noté $B[p](x, y)$ est exprimé sous la forme suivante :

$$B[p](x, y) = \int_0^\pi p_\theta(x \cos(\theta), y \sin(\theta)) d\theta \quad (11)$$

Ce calcul restitue une image floue de l'objet initial et avec des déformations. Cet écart entre l'objet initial et l'objet reconstruit s'explique par le fait que la rétroprojection n'est pas

exactement l'inverse de la transformée de Radon mais son inverse convoluée par un filtre qui s'écrit :

$$B[p](x, y) = (f * h)(x, y) \quad (12)$$

Avec $h(x, y)$ le filtre convolué à la rétroprojection qui a la forme suivante [18] :

$$h(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (13)$$

Afin de s'affranchir de l'effet de flou sur l'image généré par ce filtre une première idée est de déconvoluer le filtre 2D de flou à la rétroprojection. Il faut noter plusieurs difficultés : la fonction $h(x, y)$ de (13) est singulière à l'origine et non intégrable. Il n'existe pas de filtrage inverse mathématiquement bien défini. Il est possible d'approcher le filtrage inverse dans le domaine de Fourier, mais c'est une opération coûteuse en calcul qui n'est que peu utilisée. Ces difficultés seront mieux comprises dans la section suivante consacrée au théorème de la coupe centrale.

c) Le théorème de la coupe centrale

Une autre technique de reconstruction est basée sur le théorème de la coupe centrale [19]. Il est basé sur l'utilisation de la transformée de Fourier des projections. La projection de la fonction f pour un angle θ donné peut s'écrire sous la forme :

$$p(u, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dv \quad (14)$$

La transformée de Fourier de cette projection s'écrit alors :

$$P(v, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(u, \theta) e^{-i2\pi v u} du \quad (15)$$

Ce qui équivaut à :

$$P(v, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) dv \right] e^{-i2\pi v u} du \quad (16)$$

La projection peut donc s'écrire sous la forme suivante qui correspond à la transformée de Fourier bidimensionnelle de l'image initiale :

$$P(v, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) e^{-i2\pi(xv_x + yv_y)} dx dy \quad (17)$$

Le théorème de la coupe centrale sous la forme de l'équation (17) exprime donc que la transformée de Fourier d'une projection correspond à une ligne de la transformée de Fourier 2D de l'image qui passe par l'origine et fait un angle θ avec l'axe des abscisses.

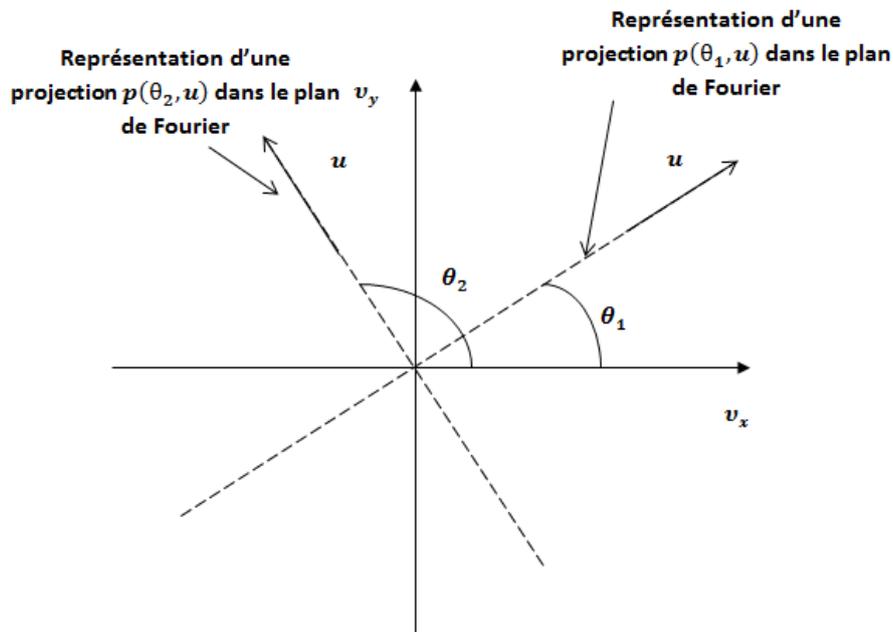


Figure 4 : Représentation des projections de la fonction $f(x, y)$ dans le plan de Fourier

La méthode de reconstruction est donc constituée des étapes suivantes :

- Mesures des projections $p_\theta(u)$ pour un angle θ appartenant à l'intervalle $[0, \pi[$.
- Transformée de Fourier de chaque projection d'angle θ notée $TF[p_\theta](U)$.
- Collecter ces transformées de Fourier dans le plan de Fourier 2D, ce qui fournit la transformée de Fourier à deux dimensions $TF[f](v_x, v_y)$ de la fonction $f(x, y)$.
- Réaliser la transformée inverse 2D permettant d'obtenir la fonction $f(x, y)$.

Cette méthode pourrait permettre une reconstruction de l'image. En revanche, dans la pratique elle est limitée par le fait que les projections utilisées ne sont généralement pas assez nombreuses pour remplir complètement le plan de Fourier. Ce dernier doit donc être complété par une interpolation, ce qui engendre des erreurs de reconstructions et coût de calcul élevé. C'est pour cette raison que cette technique est très peu utilisée.

d) La rétroprojection filtrée

La rétroprojection filtrée est une technique qui se déduit du théorème de la coupe centrale. En effet, si on considère la fonction $f(x, y)$ comme la transformation de Fourier inverse de $F(v_x, v_y)$, il est possible d'écrire l'équation :

$$f(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(v_x, v_y) e^{-i2\pi(xv_x + yv_y)} dv_x dv_y \quad (18)$$

Cette expression peut également être exprimée en fonction des projections :

$$f(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} P(v, \theta) e^{-i2\pi(xv_x + yv_y)} dv_x dv_y \quad (19)$$

En réalisant un changement de variable, il est possible d'écrire cette équation sous la forme :

$$f(x, y) = \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} P(v, \theta) |v| e^{-i2\pi u} dv \quad (20)$$

A partir de cette équation on peut noter $\tilde{p}(u, \theta)$ la projection filtrée de la projection $p(u, \theta)$ exprimée par l'équation :

$$\tilde{p}(u, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(v, \theta) |v| e^{-i2\pi u} dv \quad (21)$$

On appelle $\tilde{p}(u, \theta)$ une projection filtrée car il s'agit de la transformée de Fourier inverse de la transformée de Fourier de la projection multipliée par un filtre de rampe $|v|$. Ainsi, dans le cas où une série de projections filtrées $\tilde{p}(u, \theta)$ est calculée, il est possible de retrouver la fonction $f(x, y)$ en appliquant la rétroprojection des projections filtrées :

$$f(x, y) = B[\tilde{p}_\theta] = \int_0^\pi \tilde{p}(u, \theta) d\theta \quad (22)$$

Ainsi, la rétroprojection filtrée consiste à appliquer un filtre 1D sur les projections puis d'effectuer une rétroprojection [20]. Pour faire un calcul de rétroprojection filtrée il faut donc :

- Mesurer les projections et calculer leurs transformées de Fourier multipliées par le filtre de rampe $|v|$.
- Faire la transformée inverse des résultats, ce qui donne une série de projections filtrées.
- Réaliser la rétroprojection des projections filtrées.

L'utilisation de cette méthode représente un coût de calcul beaucoup plus faible que les techniques présentées précédemment. Celle-ci est donc la plus utilisée en tomographie analytique.

En revanche, l'utilisation du filtre rampe présente des défauts sur les reconstructions lorsque les projections sont bruitées. Le filtre rampe a pour effet par exemple d'amplifier les hautes

fréquences et donc l'impact du bruit de mesures. Ce type de problèmes est évité par l'utilisation d'une fenêtre dite d'apodisation qui va couper ou atténuer certaines parties du filtre pour certaines fréquences. On peut citer par exemple, le filtre de RAM-LAK qui coupe les hautes fréquences ou les filtres de Shepp-Logan et de Hamming qui annule progressivement le gain du filtre au niveau des fréquences problématiques [19].

e) La transformée d'Abel

La transformée d'Abel est un cas particulier de calcul de projection et de reconstruction tomographique appliquée à des objets à symétrie cylindrique [21]. Dans le cas d'une telle géométrie la reconstruction est possible à partir d'une seule série de projection selon un axe unique (Figure 5).

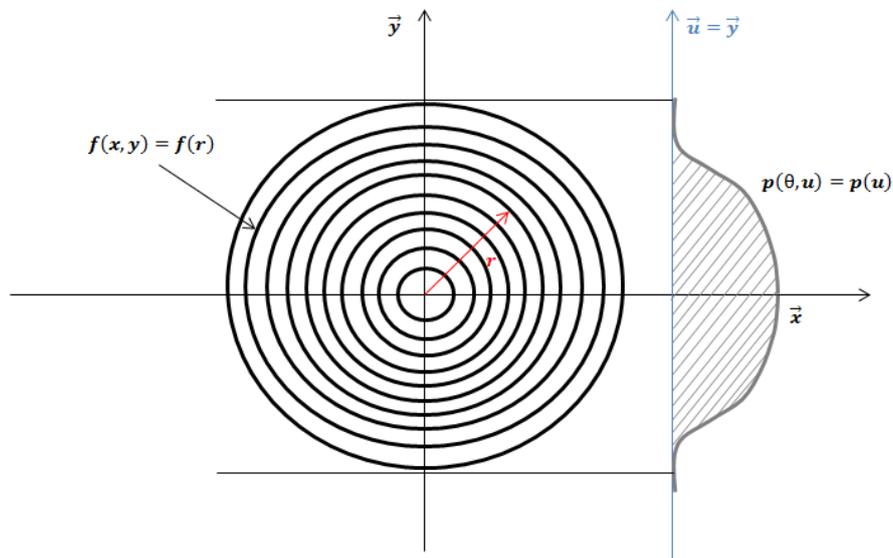


Figure 5 : Calcul d'une projection dans le cas d'un objet à symétrie cylindrique

Dans ce cas, la fonction étudiée ne dépend que de sa composante r selon le rayon de l'objet R . L'expression de la fonction 2D peut donc être ramenée à $f(x, y) = f(r)$. La projection de l'objet ne dépend donc que de la variable u et elle est donnée par l'expression :

$$p(u) = 2 \int_x^R \frac{r}{\sqrt{r^2 - u^2}} f(r) dr \quad (23)$$

L'inversion de cette projection sur un objet cylindrique est donnée par une fonction appelée opérateur d'Abel notée $A[f(r)]$ et dont l'expression est :

$$f(r) = A[f(r)] = -\frac{1}{\pi} \int_u^R \frac{p'(u)}{\sqrt{u^2 - r^2}} du \quad (24)$$

Avec $p'(u)$ la dérivée spatiale de $p(u)$ par rapport à sa position u sur l'axe de la projection. Cette équation montre que la transformée d'Abel fait un lien entre l'objet projeté $f(r)$ et la variation des projections selon leur position u . Cette équation est valable dans le cas continu. En revanche, lorsque les projections sont échantillonnées, celles-ci sont composées de points $p(u_k)$ discrets. La reconstruction peut alors se faire en utilisant la rétroprojection filtrée ou encore par des algorithmes récursifs comme « l'oignon pelé » ou le « Three Points Abel » (TPA) qui sont détaillés dans l'article [22]. L'idée de la technique de « l'oignon pelé » peut être expliquée sur la figure 5, en partant de la projection la plus éloignée de l'axe on estime la valeur supposée constante de la couronne extérieure, on retire son influence de la projection associée à la couche connexe, ce faisant on s'est ramené au cas de la couronne extérieure. Les méthodes associées sont rapides mais sensibles au bruit car elles sont récursives.

f) Bilan de l'analyse des méthodes analytiques

Les méthodes analytiques s'appuient sur une discrétisation de formules analytiques de l'inversion de la transformée de Radon. Ces formules analytiques sont instables et nécessitent plusieurs techniques de régularisation implicites lors de leur mise en œuvre (interpolation, apodisation ou encore filtrage). Ces techniques nécessitent des moyens de calcul importants et sont les plus utilisées dans tous les domaines où l'on peut acquérir un grand nombre de projections avec des angles équirépartis. En présence d'un petit nombre de projection ces méthodes ne fournissent pas de résultats acceptables. Comme nous le verrons, il est souvent très difficile de multiplier le nombre de mesures en TDLAS aussi l'approche analytique n'est pas envisageable pour l'étude menée au cours de cette thèse. Nous nous orientons vers les méthodes algébriques qui proposent une approche très différente du problème de tomographie linéaire et dont les principes se généraliseront à la tomographie non linéaire.

2) Les méthodes de tomographie algébriques

a) Modélisation du problème tomographique

Dans cette partie nous allons décrire les méthodes de reconstruction algébriques. Le principe de base de ces méthodes est la discrétisation de la transformée de Radon, ainsi que l'utilisation d'algorithmes itératifs pour reconstruire les images en deux dimensions. Avant toute chose, il est nécessaire de donner certaines précisions sur les notations utilisées pour les calculs qui diffèrent des calculs analytiques.

Tout d'abord, l'approche algébrique consiste à considérer une zone d'étude en deux dimensions discrétisée en un nombre L^2 de pixels, L correspondant au nombre de pixels sur une ligne (Figure 6).

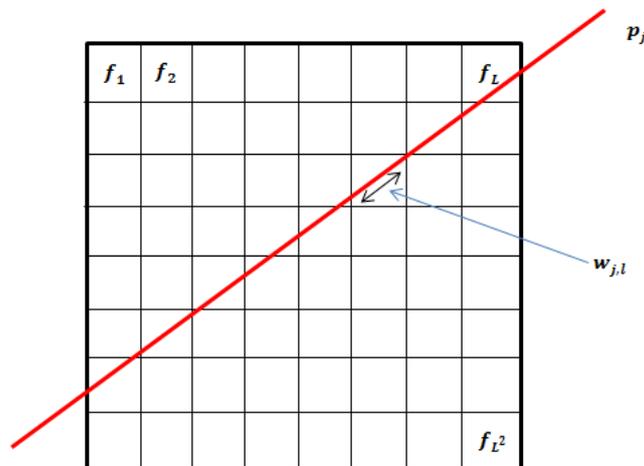


Figure 6 : Représentation schématique de la zone d'étude subdivisée en pixels et du calcul d'une projection

Chaque pixel indicé l contient une valeur de la fonction f_l . Cette zone d'étude est traversée par plusieurs rayons indicés j . Dans la partie concernant les méthodes analytiques, une projection était constituée d'une série de faisceaux parallèles acquis à une certaine position angulaire autour de l'objet. Dans le cas des méthodes algébriques, on considère un ensemble de projections unitaires, chaque projection notée p_j correspondra à une mesure fournie par un seul faisceau indicé j . Ces projections sont au total de N_{proj} . On note w_{jl} la longueur d'intersection entre le rayon j et le pixel l . La valeur de la projection p_j est une combinaison linéaire entre les valeurs de la fonction f_l contenue dans un pixel l et la longueur d'intersection w_{jl} . Ce qui peut s'écrire sous la forme :

$$p_j = \sum_{l=0}^{L^2} w_{jl} \cdot f_l \quad (25)$$

Cette équation peut être présentée sous forme matricielle :

$$p = Wf \quad (26)$$

Avec p un vecteur de taille N_{proj} correspondant à l'ensemble des projections mesurées autour de la zone d'étude, f un vecteur de taille L^2 qui correspond à l'ensemble des pixels de l'image à reconstruire et W une matrice de taille $L^2 \cdot N_{proj}$ contenant l'ensemble des longueurs d'intersection w_{jl} entre chaque faisceau et chaque pixel. L'application de la matrice W à la fonction f correspond à une application discrète de la transformée de Radon.

Le principe de la méthode de reconstruction consiste à estimer la valeur de chaque pixel f_l à partir des mesures de projections p_j et de la matrice W dont les coefficients sont connus car dépendant uniquement de la position et de l'angle des rayons autour de la zone d'étude. Pour cela, de nombreux algorithmes itératifs existent.

b) Algebraic Reconstruction Technique (ART)

La méthode Algebraic Reconstruction Technique (ART) est l'algorithme itératif de base en tomographie linéaire dérivé de la technique de Kaczmarz pour résoudre un système d'équation linéaire [23]. Son application à la tomographie a été faite dans le domaine de la microscopie électronique et de la photographie à rayons X [24]. La méthode consiste à résoudre le système d'équations linéaires (25) par estimations successives. Le principe est de mettre à jour à chaque itération l'image f_l afin de satisfaire au mieux les équations du système de l'équation (26). L'équation qui décrit cette méthode est la suivante :

$$f_l^{(i+1)} = f_l^{(i)} + \lambda \frac{p_j - W_j^T f^{(i)}}{\|W_j\|_2^2} W_j^T \quad (27)$$

Avec i le numéro de l'itération, $f_l^{(k)}$ la valeur de la fonction f dans le pixel l à l'itération i , p_j la projection mesurée par le rayon j , W_j la ligne de la matrice de projection correspond à la projection du rayon j et λ un paramètre de relaxation [25] permettant de stabiliser l'algorithme, mais au prix d'un ralentissement de la convergence.

La particularité de cette méthode est qu'au cours d'une itération, l'image est mise à jour autant de fois qu'il y a de projections mesurées. Ce qui a pour conséquences un calcul relativement lent. Il s'agit d'une méthode historique motivée par des puissances de calcul et des tailles de mémoires insuffisantes : à chaque itération on ne charge en mémoire qu'une ligne W_j de la matrice et on impacte que les pixels qui sont dans la ligne de vue de la

projection. Plusieurs optimisations de cette méthode ont donc été effectuées, ce qui a donné lieu à la création de plusieurs variantes de l'algorithme.

c) Multiplicative Algebraic Reconstruction technique (MART)

La méthode MART est l'une de ces optimisations. Elle repose sur le même principe que l'ART mais le calcul de la correction menant à la convergence entre projections calculées et mesurées est différent. En effet, dans le cas de la MART, le terme de correction est quantifié par un rapport entre ces deux grandeurs [26]. De plus, ce terme correctif est multiplié au pixel de l'image à corriger et non additionné comme dans l'ART classique. Ce qui est formalisé par l'expression :

$$f_l^{(i+1)} = f_l^{(i)} \left(\frac{p_j}{W_l f^{(i)}} \right)^{\lambda W_{jl}} \quad (28)$$

Avec i le numéro de l'itération, $f_l^{(i)}$ la valeur de la fonction f dans le pixel l à l'itération i , p_j la projection mesurée par le rayon j , W_{jl} le coefficient quantifiant la longueur d'intersection le rayon j et le pixel l . Le terme λ est également un paramètre de relaxation permettant de stabiliser l'algorithme. Un aspect intéressant de la méthode MART est de garantir la positivité de la reconstruction si on l'initialise par une première solution positive. La positivité est souvent une propriété des fonctions f recherchées en tomographie.

d) Simultaneous Iterative Reconstruction Technique (SIRT)

La méthode SIRT est une variante de la technique ART qui consiste à reconstruire chaque valeur de la fonction f_l en tenant compte de son impact sur l'ensemble des projections p_j qui traversent ce pixel [27].

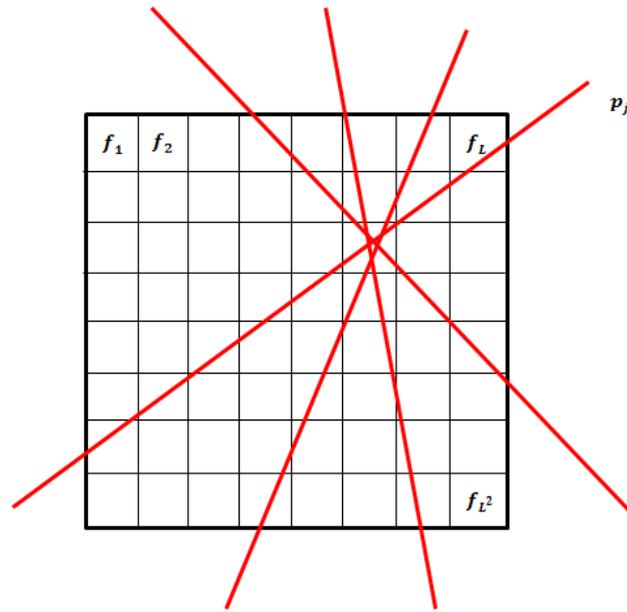


Figure 7 : Prise en compte de toutes les projections passant par un même pixel pour l'algorithme SIRT

Ainsi, toutes les projections passant par un pixel sont utilisées pour calculer une correction moyenne qui est ajoutée au pixel concerné. Une itération est terminée lorsque tous les pixels de l'image ont été traités. Le calcul itératif peut s'écrire sous la forme :

$$f_l^{(i+1)} = f_l^{(i)} + \frac{\sum_j p_j}{\sum_j \sum_l W_{jl}} - \frac{\sum_j W_j f^{(i)}}{\sum_j \|W_j\|^2} \quad (29)$$

Avec i le numéro de l'itération, $f_l^{(i)}$ la valeur de la fonction f dans le pixel l à l'itération i , p_j la projection mesurée par le rayon j , W_{jl} le coefficient quantifiant la longueur d'intersection le rayon j et le pixel l , W_j la ligne de la matrice de projection concernant le faisceau j . Contrairement à l'algorithme ART qui traite les projections une par une, la méthode SIRT permet de traiter plusieurs projections simultanément, ce qui augmente la précision et a pour effet de lisser l'image reconstruite. En revanche, la convergence est beaucoup plus lente.

e) *Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique (SART)*

Pour résumer, la méthode ART corrige l'ensemble des pixels qui ont une influence sur une projection et répète l'opération pour toutes les projections une par une. A l'inverse la méthode SIRT traite les pixels un par un en tenant compte de l'impact de ce pixel sur l'ensemble des projections. La méthode SART est un compromis entre les techniques ART et SIRT [28]. En effet, son principe est toujours de traiter l'image pixel par pixel en les mettant à

jour avec un terme correctif dépendant des projections sur lesquelles il contribue. En revanche, la moyenne de l'erreur ne se fait pas sur toutes les projections traversant le pixel mais seulement sur un sous-ensemble de ces projections. Les sous-ensembles sont choisis de telle sorte à ce que ses projections soient le moins corrélées possibles avec les projections d'un autre sous-ensemble. De cette manière, l'algorithme dispose d'une précision approchée de celle de SIRT mais avec un temps de calcul plus rapide. Ce calcul itératif peut s'écrire sous la forme :

$$f_l^{(i+1)} = f_l^{(i)} - \lambda \sum_{j \in j_\theta} \left[\frac{W_{jl}}{\sum_{j \in j_\theta} W_{jl}} \cdot \frac{\sum_{r=1}^n W_{jr} f_r^{(i)} - p_j}{\sum_{r=1}^n W_{jr}} \right] \quad (30)$$

Avec i le numéro de l'itération, $f_l^{(i)}$ la valeur de la fonction f dans le pixel l à l'itération i , p_j la projection mesurée par le rayon j , W_{jl} le coefficient quantifiant la longueur d'intersection le rayon j et le pixel l , j_θ l'indice d'une projection appartenant à un sous-ensemble de projections noté θ , r l'indice d'un pixel influant sur une projection de l'ensemble θ et n le nombre total de pixel influençant les valeurs des projections de l'ensemble θ et λ un paramètre de régularisation.

f) Minimisation des moindres carrés

Une approche générale pour résoudre un système linéaire tel que (26) est de rechercher le minimum du critère des moindres carrés [29].

$$C = \|p - Wf\|^2 \quad (31)$$

Cette minimisation se fait souvent par itérations successives en ajoutant à chaque itération un terme correctif à l'estimation courante de la fonction f :

$$f^{(i+1)} = f^{(i)} + \rho^{(i)} d^{(i)} \quad (32)$$

Un algorithme d'optimisation très utilisé est l'algorithme des gradients conjugués [30]. L'indice i correspond au numéro de l'itération, le terme $\rho^{(i)}$ est une grandeur appelée le pas de descente, il s'agit d'un incrément ajouté à la fonction f selon la direction $d^{(i)}$. L'équation exprimant le pas de descente est :

$$\rho^{(i)} = - \frac{(Wf^{(i)} - p)^T \cdot d^{(i)}}{(Wd^{(i)})^T \cdot d^{(i)}} \quad (33)$$

La direction $d^{(i)}$ est calculée à chaque itération à partir du gradient de f à l'itération i noté $g^{(i)}$. La direction à l'itération k doit présenter la propriété d'être conjuguée avec toutes directions des itérations précédentes, c'est-à-dire $g^{(i+1)T} \cdot g^{(i)} = 0$. Elle est calculée à partir de l'équation :

$$d^{(i+1)} = -g^{(i+1)} + \gamma d^{(i)} \quad (34)$$

Avec le terme γ qui assure la propriété $g^{(i+1)T} \cdot g^{(i)} = 0$ qui s'exprime en fonction du gradient de f selon l'équation :

$$\gamma = \frac{g^{(i+1)T} g^{(i+1)}}{g^{(i)T} g^{(i)}} \quad (35)$$

Le gradient $g^{(i)}$ étant calculé également à chaque itération en fonction sa valeur à l'itération précédente et de la direction de descente $d^{(i)}$ à l'itération précédente :

$$g^{(i+1)} = g^{(i)} + \rho^{(i+1)} W d^{(i+1)} \quad (36)$$

g) Méthodes de régularisation

Le système à résoudre dans les méthodes algébriques n'a en général pas de solution mathématique directe, car la matrice à inverser n'est pas carrée. L'approche de minimisation du critère des moindres carrés permet de se ramener à un système linéaire faisant apparaître une matrice carrée, cependant la plupart du temps l'inversion pose des problèmes :

- Soit les données ne permettent pas de contraindre assez l'objet recherché (par exemple lorsque les angles des projections sont limités à un secteur angulaire particulier) ce qui signifie que le problème est sous-déterminé ou, en termes mathématiques, que la matrice possède un noyau ;
- Soit certaines données sont quasiment redondantes (par exemple pour deux projections prises sous des angles proches par rapport à la discrétisation adoptée pour l'objet) et la matrice est dite mal-conditionnée, c'est à dire qu'elle possède des valeurs singulières très faibles (par rapport à la valeur singulière maximale). On montre dans ce cas que l'inversion du système conduit à une amplification très importante du bruit de mesure.

Pour résoudre de type de problèmes, il est possible soit d'utiliser une méthode de décomposition en valeurs singulières [31] soit une méthode de régularisation comme la méthode de Tikhonov [32].

Dans le cas de la décomposition en éléments simples, la matrice W peut se mettre sous la forme :

$$W = UST^T \quad (37)$$

Avec U et V des matrices orthogonales et S une matrice contenant les valeurs propres de la matrice W . La solution \tilde{f} qui minimise l'équation (31), peut se mettre sous la forme :

$$\tilde{f} = \sum_j^{N_{proj}} \frac{v_j}{\sigma_j} u_j^T p \quad (38)$$

Avec \vec{u}_j et \vec{v}_j les vecteurs colonnes des matrices U et V , σ_j la valeur singulière j de la matrice W et \vec{p} le vecteur des projections. Dans le cas où le vecteur des mesures \vec{p} est entaché de bruit modélisé sous la forme d'un vecteur $\vec{\Delta p}$, la solution \tilde{f} se met alors sous la forme :

$$\tilde{f} = \sum_j^{N_{proj}} \frac{v_j}{\sigma_j} u_j^T p + \sum_j^{N_{proj}} \frac{v_j}{\sigma_j} u_j^T \Delta p \quad (39)$$

L'équation (39) montre qu'une faible valeur de variation du vecteur p à cause du bruit peut engendrer une forte variation sur la solution \tilde{f} dans le cas où les valeurs propres σ_j sont faibles. Ainsi, pour éviter l'impact de ces erreurs sur la reconstruction, la technique est de réaliser la reconstruction après avoir supprimé artificiellement les valeurs propres les plus faibles de la matrice W . Cette méthode est appelée la régularisation par la troncature de la décomposition en éléments simples.

Dans l'approche par régularisation, on considère qu'il est nécessaire d'ajouter des informations a priori sur le résultat à reconstruire.

Une méthode classique depuis les années 70 est la régularisation de Tikhonov [32]. Celle-ci consiste à privilégier certaines solutions parmi toutes celles qui sont compatibles avec les données (au bruit près). La sélection généralement utilisée en tomographie se fait sur un critère de continuité spatiale. On souhaite souvent, en effet, que les solutions recherchées ne présentent des variations trop fortes d'un pixel à un autre. Cette continuité est utilisée comme contrainte à la solution par l'ajout d'un terme de correction supplémentaire à l'équation (31) de la manière suivante :

$$C = \|p - W \cdot f\|^2 + \lambda \|D(f) \cdot f\|^2 \quad (40)$$

Avec p le vecteur contenant l'ensemble des projections mesurées, α l'image à reconstruire W la matrice de projection, D une matrice de dérivées spatiales horizontales et verticales qui servent de matrices de régularisation, λ un coefficient de régularisation qui sert à pondérer l'effet de la matrice de régularisation sur la solution.

La solution de l'équation (40) est de la forme :

$$\tilde{f} = (W^T W + \lambda D(f)^T \cdot D(f))^{-1} W^T p \quad (41)$$

Notons que la méthode de la décomposition en valeurs singulières peut souvent donner des solutions proches de la régularisation de Tikhonov. En effet, les contraintes imposées par la régularisation de Tikhonov modifient les valeurs singulières et permet de les empêcher de devenir trop faibles et donc d'amplifier l'effet du bruit. Cependant on montre qu'en pratique, il est plus difficile de choisir l'ordre de la troncature de la SVD que de sélectionner un paramètre de régularisation, c'est pourquoi dans la suite on se focalisera sur les méthodes de régularisation, qui possèdent en plus l'avantage de pouvoir être appliquées assez simplement dans le cas non linéaire.

h) Optimisation des positions et angles des rayons

En tomographie numérique, la qualité d'une reconstruction dépend beaucoup de la configuration de rayons utilisée. Sachant que dans beaucoup de cas, ces calculs sont mis en œuvre dans des conditions expérimentales imposant un nombre de faisceaux limité, il est important d'optimiser leurs positions et angles autour de la zone étudiée. Pour cela, certains auteurs ont proposé des indicateurs de prévoir et de quantifier la qualité d'une configuration de rayons. Le premier type indicateur, proposé dans [33] est un graphique appelé sinogramme¹. Ce graphique représente les faisceaux de mesure par un point placé dans un plan où l'axe horizontal est la distance du faisceau par rapport au centre de l'objet et l'axe vertical est l'angle par rapport à l'axe horizontal de l'image. Des exemples sont représentés sur la Figure 8.

¹ Ces sinogrammes sont des diagrammes à ne pas confondre avec les sinogrammes en tomographie analytique qui correspondent à une représentation en deux dimensions de la transformée de Radon.

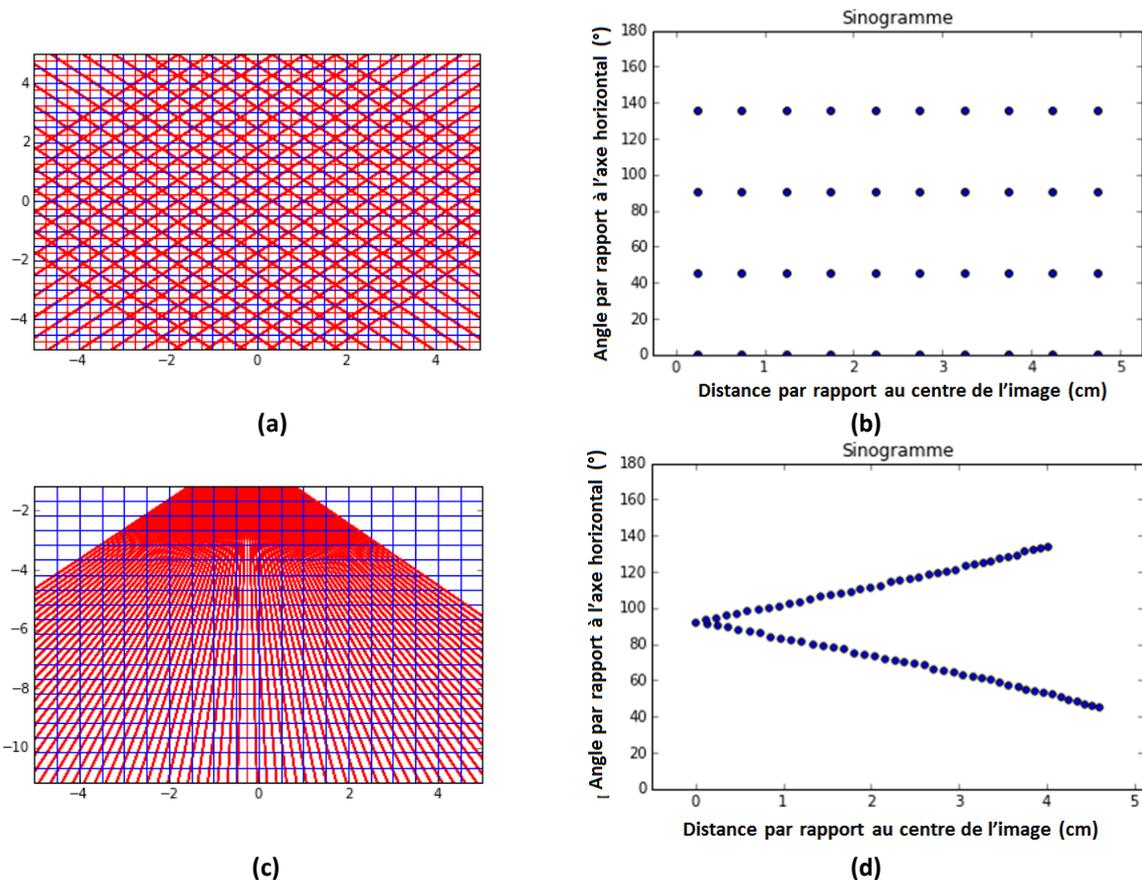


Figure 8 : Comparaison de la répartition de l'information entre deux configurations de mesures avec un même nombre de rayons mais à positions et angles différents : (a) quatre séries de rayons parallèles à quatre angles différents et (b) le sinogramme correspondant, (c) configuration en rayons dispersés et (d) le sinogramme correspondant

D'après l'article [33], une configuration de rayons est optimale si le plan défini par les deux axes du sinogramme est le plus recouvert possible par les points représentant les faisceaux. Ce qui normalement devrait conduire à utiliser le plus grand nombre de faisceaux acquis au plus grand nombre de positions possibles. Mais, bien entendu, le nombre de faisceaux est limité, notamment par les accès optiques disponibles sur le banc expérimental. Les auteurs de [33] étudient l'impact de la restriction d'accès optique sur la reconstruction tomographique et leur hypothèse de base est que la reconstruction sera optimale si le sinogramme est constitué d'un nuage de points dense et centré sur le milieu du plan. En étudiant plusieurs configurations de mesures leurs conclusions semblent montrer que des rayons placés de manière aléatoire autour de la zone d'étude permettent d'obtenir un sinogramme « meilleur » que des configurations plus régulières. Cependant cette approche reste très qualitative et ne donne pas d'indice clair d'optimalité d'une configuration de rayons.

Les articles [34] et [35] présentent une méthode plus quantitative pour optimiser la position et l'angle des faisceaux de mesures. Cette approche se base sur une matrice appelée la

matrice de résolution. Pour la définir, il faut tout d'abord écrire l'équation (41) sous la forme suivante :

$$\tilde{f} = W^\# \cdot p \quad (42)$$

Avec :

$$W^\# = (W^T \cdot W + \lambda D(f)^T \cdot D(f))^{-1} W^T \quad (43)$$

Si on considère f comme la véritable distribution à l'origine de nos mesures, il est possible d'écrire :

$$\tilde{f} = W^\# W f \quad (44)$$

Le terme $W^\# W$ est appelé matrice de résolution et exprime une relation entre la régularisée \tilde{f} et la solution véritable f . Cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\tilde{f} - f = (W^\# W - I) f \quad (45)$$

L'idée de la méthode est de minimiser le terme $(W^\# W - I)$ de sorte que la reconstruction soit la plus proche possible de la solution véritable. Pour minimiser ce terme, la méthode consiste à modéliser la matrice de résolution comme une fonction d'un vecteur caractérisant la configuration des rayons en contenant leurs positions et angles par rapport à un repère image.

Les auteurs notent $\phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_{proj}})$ un vecteur composé de coefficients complexes, chaque coefficient dépendant de deux valeurs, la position du faisceau par rapport au centre de l'image et l'angle que fait le faisceau par rapport à l'axe horizontal, et $R(\phi)$ la matrice de résolution construite à partir de ce vecteur. L'idée est de déterminer les angles et positions de rayons optimales minimisant le critère :

$$F(\phi) = \|R(\phi) - I\|_F^2 \quad (46)$$

Le critère $F(\phi)$ correspond à la minimisation d'un critère de Frobenius qui est minimisé avec l'algorithme génétique décrit dans l'article [35]. Ce calcul permet de déterminer une configuration de rayons optimale $\tilde{\phi}$. Cette approche est intéressante, mais comme la précédente elle est fondée sur l'hypothèse d'un problème de tomographie linéaire. Or nous allons voir dans la suite que ce n'est pas cas que nous allons considérer en tomographie hyper-spectrale.

III) Méthode de Tunable Diode Laser Absorption Tomography (TDLAT)

1) Le problème non-linéaire de la TDLAT

Les techniques de tomographie algébriques permettent de retrouver une fonction en deux dimensions à partir de projections. Dans le cas de la TDLAS, cette fonction correspond à l'absorption optique locale $\alpha_l(\sigma)$ d'un pixel. En revanche, les grandeurs physiques recherchées sont des concentrations chimiques et des paramètres thermodynamiques dont cette absorption locale est dépendante. Ainsi, le problème devient non-linéaire, car les projections intègrent sur un ensemble de pixels l des absorptions $\alpha_l(\sigma)$ qui sont elles-mêmes des fonctions non linéaires des grandeurs physiques associées au pixel l . L'objectif principal d'une méthode de tomographie par TDLAT est de déterminer ces grandeurs physiques.

La mesure TDLAS fondamentale est effectuée avec des diodes lasers accordables en longueur d'onde, ce qui signifie qu'une projection peut être constituée d'un seul point spectral pour une longueur d'onde donnée ou, comme dans la plupart des cas, d'une série de points spectraux. On dispose souvent de plusieurs centaines de points et on parle alors de tomographie hyper spectrale. Ainsi, un point sur une projection en tomographie classique devient un spectre de plusieurs points spectraux en TDLAT.

Afin d'appliquer une technique de tomographie à un problème de spectroscopie d'absorption, il faut tout d'abord adapter la modélisation de la loi de Beer-Lambert. Pour cela, l'idée est de modéliser une tranche de milieu gazeux étudié comme une grille de pixels contenant chacun une valeur d'absorption $\alpha_l(\sigma)$. Chaque valeur $\alpha_l(\sigma)$ est dépendante de valeurs de concentrations chimiques X_l , pression P_l et température T_l dans ce même pixel indicé l (Figure 9).

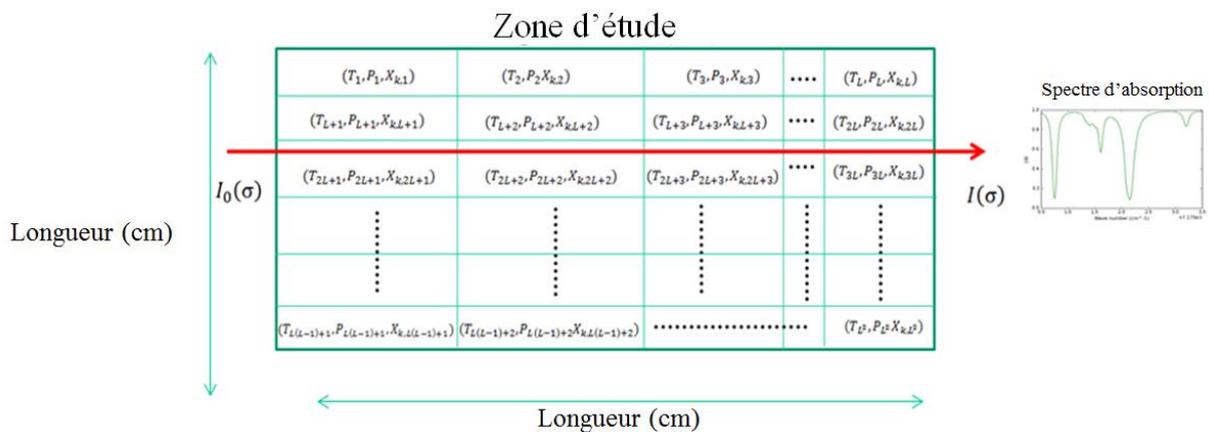


Figure 9 : Discretisation en pixels de la zone d'étude et représentation schématique du calcul d'un spectre d'absorption (projection)

Le calcul d'une projection selon ce modèle en deux dimensions est donc une sommation discrète des coefficients $\alpha_l(\sigma)$ à chaque pixel l traversé par le rayon multipliés par la longueur d'intersection entre un faisceau j et ce pixel l notée w_{jl} . Il s'agit d'une version discrète des équations (7) et (8) qui s'écrit :

$$p_j(\sigma) = -\log\left(\frac{I_j(\sigma)}{I_0(\sigma)}\right) = \sum_l \sum_{kr} S(\sigma_{krl}, T_l) \cdot X_{kl} \cdot f(\sigma - \sigma_{krl}, P_l, T_l) w_{jl} \quad (47)$$

Avec σ le nombre d'onde, l l'indice d'un pixel et N_{pixels} le nombre total de pixels dans la zone étudiée, k l'indice de l'isotope de l'espèce chimique étudiée, r l'indice de la raie d'absorption de cet isotope, X_{kl} la concentration de l'isotope k dans le pixel l , P_l la pression dans le pixel l , T_l la température dans le pixel l , w_{jl} la longueur d'intersection entre le faisceau j et le pixel l , $f(\sigma - \sigma_{krl}, P_l, T_l)$ le profil de Voigt décrivant la forme de la raie d'absorption en fonction de la pression et de la température et $S(\sigma_{krl}, T_l)$ la force de raie proportionnelle à la température et la concentration des espèces chimiques comme dans les équations (6) et (9) mais avec la notion d'appartenance à un pixel l pour la pression, la température et la concentration.

L'équation précédente décrit bien un problème de tomographie, puisque la mesure intègre des quantités localisées sur un rayon dans la zone de mesure, mais un problème non linéaire et couplé selon plusieurs variables : température, pression et concentration. On distingue alors deux approches dans la littérature. La première approche consiste à résoudre un problème de tomographie linéaire en reconstruisant des profils 2D d'absorption optique $\alpha_l(\sigma)$, éventuellement pour plusieurs longueurs d'onde, puis d'exploiter ces profils d'absorption pour en déduire les grandeurs recherchées. Il en existe plusieurs versions qui sont présentées dans la section suivante. La seconde approche, décrite ensuite, cherche à résoudre directement le problème non linéaire.

2) Tomographie linéaire puis calcul de paramètres spectroscopiques

Dans la littérature, les techniques de tomographie algébriques linéaires utilisent la modélisation de la loi de Beer-Lambert sur un rayon discrétisé comme dans l'équation (47), mais avec certaines variantes permettant de ramener cette modélisation à un problème linéaire. C'est ce qui est fait dans l'article [36] en ne considérant des coefficients α_l que pour un unique nombre d'onde σ donné dans chaque pixel. Le calcul des projections se fait donc comme dans l'équation (25) pour le calcul d'une projection d'une fonction en deux dimensions :

$$p_j = \sum_{l=0}^{N_{pixels}} w_{jl} \cdot \alpha_l \quad (48)$$

A partir de ce système d'équation, il est possible d'appliquer un algorithme de tomographie linéaire (ART, SIRT, SART) pour retrouver un profil d'absorbance en deux dimensions tout comme la reconstruction d'une densité quelconque. L'article [36] qui se focalise uniquement sur la reconstruction des profils α_l montre une évaluation des plusieurs techniques de reconstruction algébriques linéaires sur ce problème. Ils présentent la précision de chaque méthode en fonction de plusieurs paramètres tel que le bruit de mesure, le nombre d'itérations et en testant plusieurs cas de régularisation. Les critères d'évaluation de ces méthodes sont basés sur le coût et le temps de calcul et l'erreur entre des simulations et des reconstructions. En revanche, la déduction des profils de concentrations chimiques et des paramètres thermodynamiques n'est pas traitée. Plusieurs auteurs de la littérature ont étudié le problème de déduire des paramètres spectroscopiques de spectres d'absorption reconstruits par tomographie linéaire avec des méthodes différentes.

Ces méthodes utilisent la modélisation discrétisée de la loi de Beer-Lambert mais en considérant que la pression est constante sur l'ensemble des pixels, ce qui permet tout d'abord de simplifier le problème en limitant le nombre de grandeurs à reconstruire mais également de réaliser une approximation permettant de linéariser l'impact de la pression sur le profil de Voigt. Ces méthodes sont donc restreintes à la reconstruction de la température et d'une seule espèce chimique. La formulation utilisée extraite de l'article [37] pour le profil d'absorption $\alpha_l(\sigma)$ en 2D est donc la suivante :

$$\alpha_l(\sigma) = P \cdot X_l \cdot S(\sigma, T_l) \cdot f(\sigma - \sigma_0, T_l) \quad (49)$$

Avec X_l la concentration chimique dans le pixel l , T_l la température dans le pixel l , P la pression atmosphérique considérée comme constante sur toute la zone étudiée, $S(\sigma, T_l)$ la force de raie dans le pixel l dépendante du nombre d'onde σ et de la température T_l dans le pixel l . Le terme $f(\sigma - \sigma_0, T_l)$ correspond au profil de Voigt normalisé dont l'intégrale, à pression constante et pour une valeur de σ constante est considéré comme égal à 1.

Dans l'article [37], les auteurs utilisent une méthode consistant à reconstruire dans un premier temps un profil de température puis d'en déduire un profil de concentration. La mesure de température se fait à partir de mesures d'absorption pour deux longueurs d'ondes particulières. C'est la technique dite de la thermométrie à deux raies. Elle est basée sur la mesure du rapport entre l'intensité de deux raies d'absorption qui ont chacune une sensibilité différente à la température. Pour cela, deux profils 2D $\alpha_l(\sigma_1)$ et $\alpha_l(\sigma_2)$ sont reconstruits à partir de deux séries de projections $p_j(\sigma_1)$ et $p_j(\sigma_2)$. Leurs équations de projections sont les suivantes :

$$p_j(\sigma_1) = \sum_{l=0}^{N_{pixels}} w_{jl} \cdot \alpha_l(\sigma_1) \quad (50)$$

$$p_j(\sigma_2) = \sum_{l=0}^{N_{pixels}} w_{jl} \cdot \alpha_l(\sigma_2) \quad (51)$$

Dans le cas de [37], l'algorithme tomographique utilisé est le théorème de la coupe centrale. On peut ensuite utiliser le rapport entre $\alpha_l(\sigma_1)$ et $\alpha_l(\sigma_2)$ pour en déduire le rapport entre les forces de raies $S_l(\sigma_1, T_l)$ et $S_l(\sigma_2, T_l)$ de chaque pixel de la zone d'étude :

$$\frac{S_l(\sigma_1, T_l)}{S_l(\sigma_2, T_l)} = \frac{\alpha_l(\sigma_1)}{\alpha_l(\sigma_2)} \quad (52)$$

Sachant que dans chaque pixel l , pour un nombre d'onde σ_0 donnée, la force de raie s'écrit comme dans l'équation (9) sous la forme :

$$S(\sigma_0, T_l) = S(\sigma_0, T_0) \cdot \frac{Q(T_0)}{Q(T_l)} \cdot \frac{T_0}{T_l} \exp\left(-\frac{hcE}{k} \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_0}\right)\right) \cdot \frac{\left(1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma_0}{kT_l}\right)\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{hc\sigma_0}{kT_0}\right)\right)} \quad (53)$$

De cette équation, il est possible de déduire la température pour chaque pixel l en utilisant les deux profils 2D de force de raie $S_l(\sigma_1, T_l)$ et $S_l(\sigma_2, T_l)$. L'équation de ce calcul est la suivante :

$$T_l = \frac{\left(\frac{hc}{k} (E_2 - E_1)\right)}{\ln\left(\frac{S_l(\sigma_1, T_l)}{S_l(\sigma_2, T_l)}\right) + \ln\left(\frac{S_l(\sigma_2, T_0)}{S_l(\sigma_1, T_0)}\right) + \frac{hc}{k} \frac{(E_2 - E_1)}{T_0}} \quad (54)$$

La valeur de ce rapport donnera ensuite la valeur de la température pour chaque pixel. Ensuite, la température étant connue, il suffit d'utiliser un des profils d'absorption reconstruit et d'utiliser la formule suivant pour déduire la concentration dans chaque pixel :

$$X_l = \frac{\alpha_l(\sigma_1)}{PS_l(\sigma_1, T_l)} \quad (55)$$

Cette méthode de déduction de X_l et T_l est schématisée sur la Figure 10.

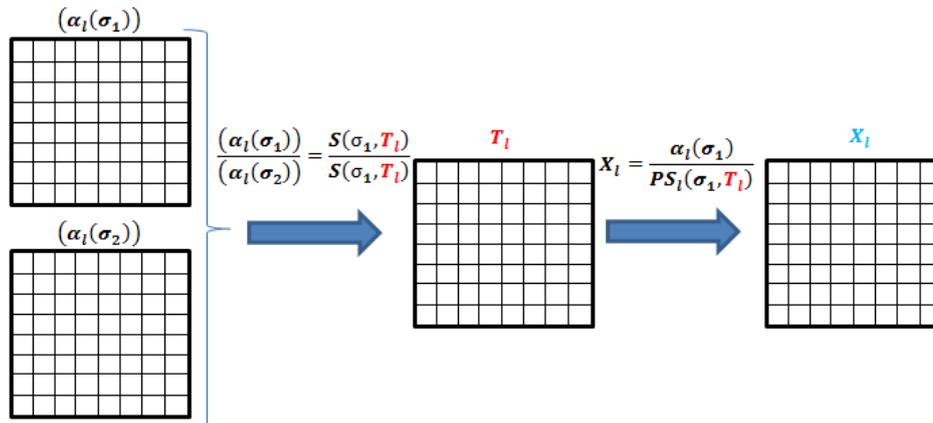


Figure 10 : Représentation schématique de la déduction des profils 2D de concentration chimique et de température par thermométrie à deux raies à partir de profils d'absorption reconstruits par tomographie

Afin de reconstruire le mieux possible la température, il est nécessaire de choisir la meilleure paire de raies possible pour la mesure. L'article [38] donne des critères de choix des raies à utiliser. Les principaux critères sont une force de raie suffisante, une séparation spectrale correcte afin que les raies soient assez éloignées l'une de l'autre pour éviter les chevauchements qui provoquent des interférences sur la forme des raies, une sensibilité correcte à la température et l'absence de transitions supplémentaires qui peuvent interférer avec la raie principale.

Cette technique de la thermométrie à deux raies est très utilisée dans la littérature. Dans l'article [39], cette même méthode est utilisée mais avec un algorithme de reconstruction différent. En effet, dans ce cas, c'est l'ART qui a été utilisé car les conditions expérimentales imposaient un nombre plus faible de faisceaux.

Dans l'article [40] la méthode de la thermométrie à deux raies est également utilisée mais avec une variante au niveau de la méthode de reconstruction tomographique de l'absorption α_l et une variante au niveau de la reconstruction de la concentration. Tout d'abord, les auteurs utilisent la méthode de la « Modified Adaptive Algebraic reconstruction Technique » détaillée dans [41] pour reconstruire les profils d'absorptions qui fourniront le profil 2D de température. Cette technique est basée sur l'algorithme ART décrit par l'équation (27). En revanche, cette variante consiste à ajuster le paramètre de relaxation $\lambda^{(k)}$ à chaque itération afin de contrôler la convergence et d'améliorer la reconstruction. Il s'agit d'une forme d'ajout d'information a priori à chaque itération.

Par ailleurs, ils ont montré que la technique classique pour retrouver la concentration à partir de cette mesure de température donnait des résultats avec une erreur de reconstruction importante. Ils ont donc fait évoluer cette technique. En effet, la concentration n'est pas calculée directement à partir de l'équation (55) mais elle est déduite par un second calcul tomographique. Une nouvelle matrice de projection est créée qui n'est pas seulement composée des longueurs d'intersections entre rayons et pixels mais de

coefficients proportionnels à la longueur d'intersection mais également à la pression atmosphérique et à la température reconstruite :

$$w'_{jl}(\sigma) = w_{jl} \cdot P \cdot S(\sigma, T_l) \tag{56}$$

De cette manière, l'inversion tomographique revient à résoudre le système linéaire :

$$p_j(\sigma) = \sum_{l=0}^{N_{pixels}} w'_{jl}(\sigma) \cdot X_l \tag{57}$$

Cette méthode permet d'améliorer significativement la reconstruction de la concentration par rapport à celle décrite dans l'équation (55).

Les auteurs de l'article [42] utilisent également une autre technique de reconstruction. Ces derniers réalisent une reconstruction tomographique de la température et de la concentration en exploitant un intervalle spectral entier. Ils font l'acquisition de plusieurs spectres d'absorption autour de la flamme. Pour chaque longueur d'onde, un profil 2D d'absorption $\alpha_l(\sigma)$ est reconstruit par tomographie linéaire. Sachant que la mesure est réalisée avec un très grand nombre de rayons, l'algorithme utilisé est celui faisant appel au théorème de la coupe centrale. Ainsi, le résultat est constitué d'une série de profils d'absorption $\alpha_l(\sigma)$ en deux dimensions aussi nombreux que le nombre de points par spectres. Ce qui peut être représenté sous forme de volume comme sur la Figure 11.

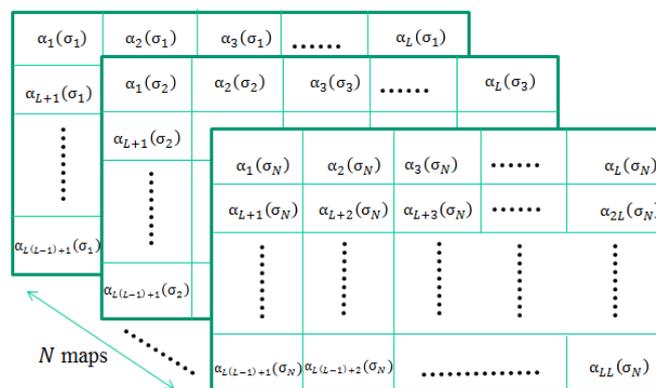


Figure 11 : Représentation en trois dimensions des cartographies d'absorptions pour chaque longueur d'onde

De cette manière pour un pixel l donné, il est possible d'obtenir une variation de l'absorption $\alpha_l(\sigma)$ en fonction du nombre d'onde σ . Ainsi, pour retrouver une valeur de concentration chimique et de température dans ce pixel, il suffit de réaliser pour chaque pixel une inversion spectrale comme en TDLAS classique par minimisation de moindres carrés non-linéaire.

Cette méthode se distingue des autres car elle permet d'exploiter l'information contenue dans un spectre d'absorption entier. On peut donc supposer qu'elle fournit une meilleure précision sur les résultats de mesures comme en TDLAS classique. En revanche, cette technique nécessite un grand nombre de faisceaux de mesures pour le calcul intermédiaire de la reconstruction en 2D des profils d'absorption. Dans un cas où moins de faisceaux seraient utilisés, la reconstruction de l'absorption présenterait les erreurs habituelles d'une reconstruction avec une technique algébrique. Cette erreur sur les profils d'absorption se répercuterait sur l'inversion spectrale et sur la détermination de la concentration et de la température.

C'est pour cette raison que la tomographie linéaire présente des limites pour son exploitation en TDLAT dans le cas où le nombre de faisceaux de mesures est limité. Ainsi, une autre approche est utilisée dans la littérature afin de compenser le manque d'accès optique par l'exploitation directe de l'information spectrale. La technique utilisée est alors appelée tomographie hyper-spectrale.

3) Tomographie hyper-spectrale

L'idée d'utiliser l'information spectrale pour compenser le manque d'accès optique et le faible nombre de faisceaux a fait l'objet de plusieurs études. Dans les articles [43] et [44], les auteurs présentent une méthode de TDLAT permettant de reconstruire directement un profil de concentration chimique et de température à partir des spectres d'absorption. L'idée est d'exploiter directement les impacts qu'ont la concentration, la pression et la température sur les spectres d'absorption mesurés. La Figure 12 montre les différents effets que peuvent avoir les variations de ces paramètres sur un même intervalle spectral.

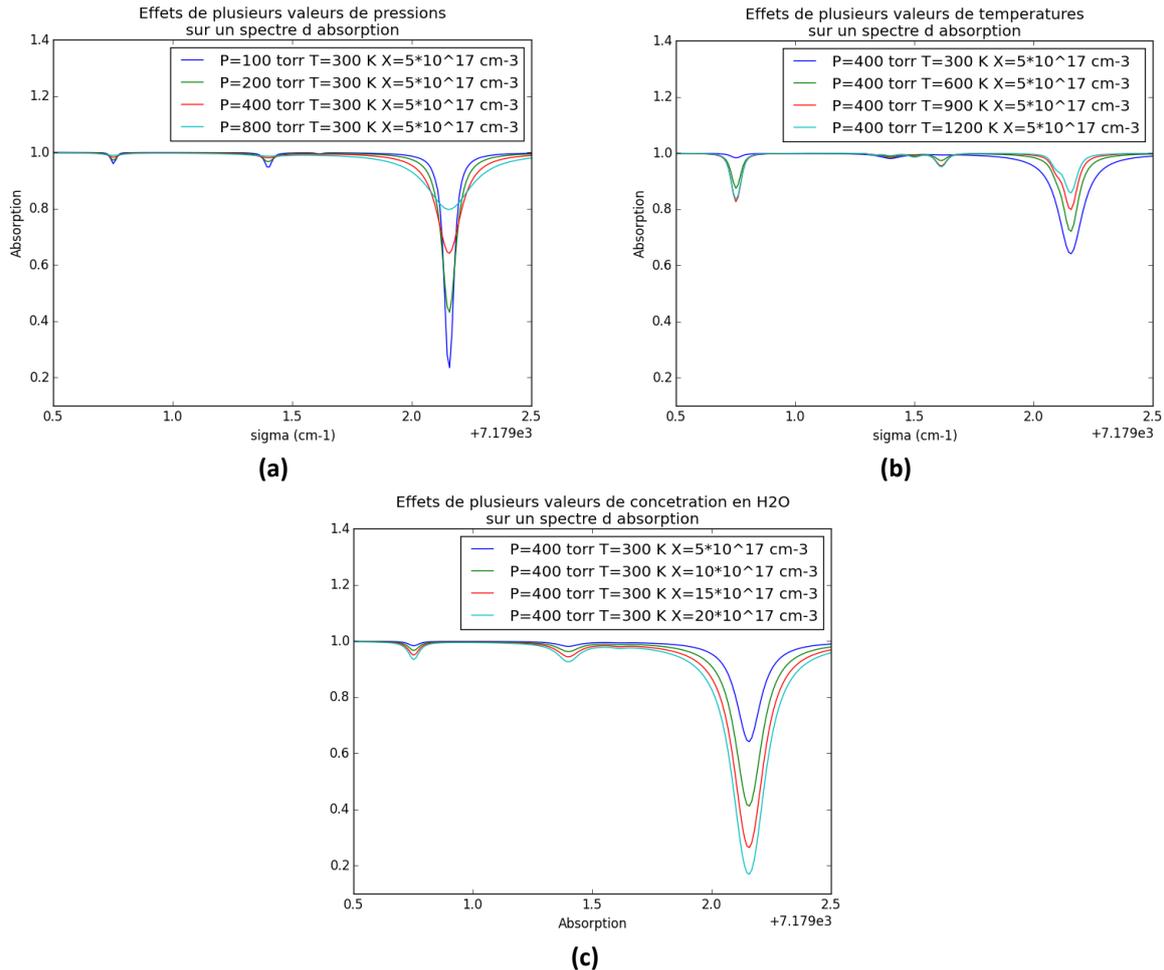


Figure 12 : Effet de la (a) pression, (b) de la température et (c) de la concentration et sur un même intervalle spectral

Si plusieurs faisceaux passent par une zone de concentration et température non-uniformes, en fonction de sa position et de son angle les variations de ces concentrations et de températures se traduiront par une modification de l'intensité et de la forme des raies de la même manière que sur la Figure 12. Le principe de la méthode développée est donc de modéliser cette zone en 2D en grille de pixel tout comme pour les techniques linéaires et de lier les modifications des spectres d'absorption mesurées directement aux valeurs de température et de concentration contenues dans chaque pixel. La méthode est donc basée sur une inversion spectrale classique de TDLAS mais prend en compte les contributions d'une surface pixelisée à la place d'une valeur intégrée. Dans le cas de l'étude de l'article [43], la pression est également considérée comme constante et égale à la pression atmosphérique sur toute la surface de la zone d'étude. Ils modélisent la loi de Beer-Lambert comme dans l'équation (47), mais avec la pression constante sur la zone d'étude et une approximation permettant de linéariser son impact sur le profil de Voigt :

$$p_j(\sigma) = \sum_l \sum_{kr} S(\sigma_{krl}, T_l) \cdot X_{kl} \cdot f(\sigma - \sigma_{krl}, T_l) \cdot P \cdot w_{jl} \tag{58}$$

Cette modélisation permet de tenir compte dans un spectre d'absorption donné de la contribution de la concentration et de la température contenue dans chaque pixel traversé par le faisceau de mesures comme représenté sur la Figure 13.

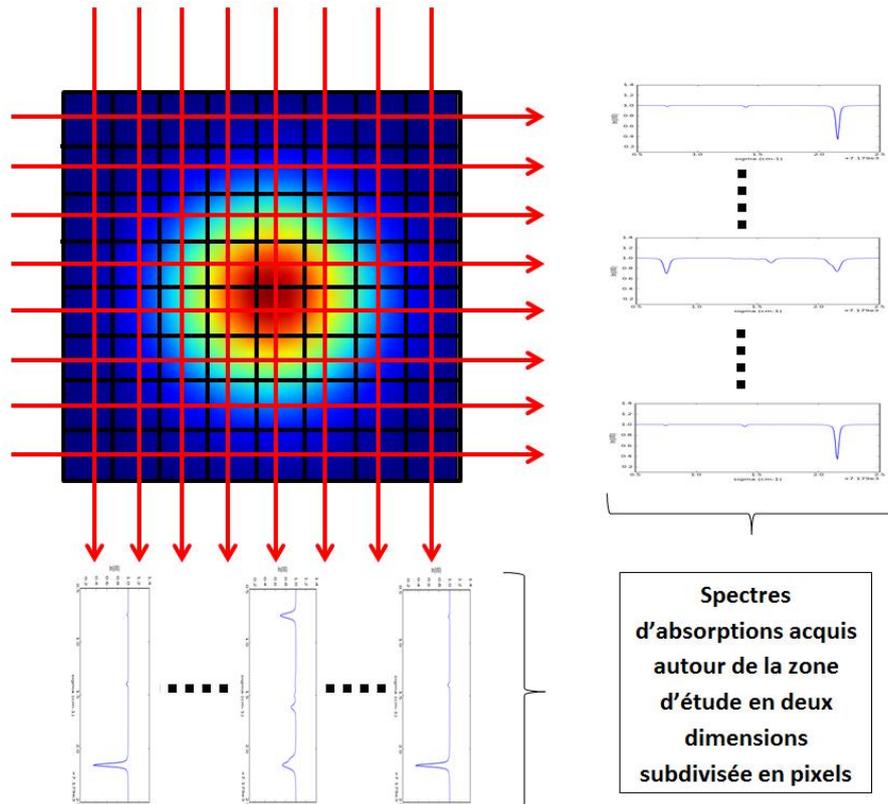


Figure 13 : Acquisition de spectres d'absorption autour d'une zone d'étude divisée en pixels

Ainsi, le principe de la reconstruction tomographique hyper-spectrale est de tenir compte de l'impact direct sur un spectre d'absorption de la variation de concentration ou de température dans un pixel. Le principe est donc de calculer numériquement des spectres d'absorption à partir de profils de concentration et de température et de les comparer avec des spectres d'absorption expérimentaux qui ont été acquis pour la même configuration de rayons. Ensuite, l'idée est de modifier les valeurs de concentrations et de températures dans l'ensemble des pixels afin que les spectres numériques et les spectres mesurés correspondent. Ce calcul est réalisé à partir de la minimisation d'un critère proportionnel au rapport entre les projections calculées numériquement et les projections mesurées :

$$D(T, X) = \left(1 - \frac{p_{j,calc}(\sigma, T, X)}{p_{j,mes}(\sigma)} \right)^2 \quad (59)$$

Avec $p_{j,calc}$ les projections calculées numériquement à partir de la formulation de la loi de Beer-Lambert de l'équation (58) et $p_{j,mes}$ les projections acquises expérimentalement.

Cependant, comme pour le cadre de la tomographie linéaire, la simple minimisation d'un écart (ou d'un rapport) entre les spectres numériques et les spectres mesurés ne suffit pas forcément à définir un objet unique et physiquement plausible. On ajoute alors des termes de régularisation à la même manière de la régularisation de Tikhonov. Ces termes traduisent la continuité spatiale des profils de concentration et de température. Ils sont calculés à partir d'opérateurs de dérivée spatiale horizontale et verticale. Le critère à minimiser devient donc :

$$F(T, X) = D(T, X) + \lambda_T R(T) + \lambda_X R(X) \quad (60)$$

Avec D le critère de minimisation principal de l'équation (59), R_T l'opérateur de régularisation spatial de la température et λ_T le coefficient de pondération associé, R_X l'opérateur de régularisation spatial de la température et λ_X le coefficient de pondération associé.

Minimiser ce critère pose un problème d'optimisation car, en raison de la non-linéarité du problème et du grand nombre de variables à retrouver, il existe en général des minima locaux qui doivent être évités pour trouver la solution optimale. C'est pour cette raison que les auteurs des articles [43] et [44], utilisent l'algorithme du recuit simulé. La description précise du principe de cet algorithme est détaillée dans l'article [45]. Son principe général est de rechercher le minimum global du critère F par itérations successives mais en acceptant que le critère remonte d'une itération à la suivante. A chaque itération, le calcul itératif donne une nouvelle valeur des profils X_l et T_l . Dans un algorithme de descente classique, ces paramètres sont acceptés comme la nouvelle solution uniquement s'ils conduisent à une baisse du critère F . Cette stratégie conduit l'algorithme à rester coincé dans un minimum local. Le recuit simulé permet d'éviter ce genre d'effets en acceptant des valeurs de X_l et T_l même si le critère augmente. Ce qui peut permettre au critère de sortir d'un minimum local et de tester d'autres configurations. Le choix d'accepter ou pas ces valeurs est fait à partir du schéma de Metropolis représenté sur la Figure 14. Le choix est fait selon un tirage aléatoire selon une probabilité qui s'écrit :

$$P_{RC} = e^{-\frac{\Delta F(X,T)}{T_{RC}}} \quad (61)$$

et qui dépend d'un paramètre appelé la température de recuit notée T_{RC} qui est élevée initialement puis diminuée au cours de l'algorithme. Au cours de tout l'algorithme, la température de recuit est diminuée progressivement en étant multipliée par un terme de correction $0 < \varepsilon < 1$ de la manière suivante $T_{RC} = \varepsilon \cdot T_{RC}$. Cette évolution de la température permet de favoriser les remontées au début de l'algorithme pour explorer le critère malgré

les minima locaux, puis de choisir une stratégie de descente au fur et à mesure qu'on s'approche du minimum global.

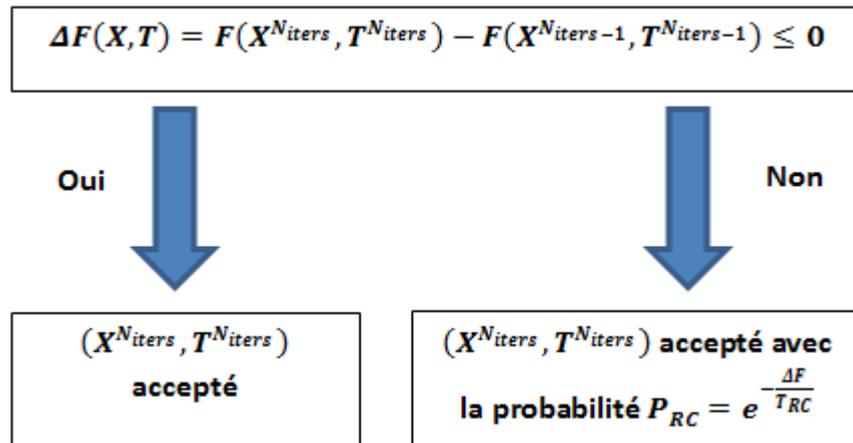


Figure 14 : Schéma de l'algorithme de Metropolis

Cet algorithme a montré son fonctionnement notamment dans l'article [46] où une application de cette méthode est réalisée sur un moteur aéronautique pour une reconstruction en deux dimensions d'un profil de concentration en H_2O et de température.

En revanche, il est montré que les résultats sont corrects si l'ajout d'informations a priori est maîtrisé. En effet, lorsque des termes de régularisation spatiale sont utilisés comme dans l'équation (60), il est important de pondérer leur effet avec les coefficients λ_T et λ_X afin de que l'impact de la régularisation soit suffisamment important pour reconstruire l'image correctement, mais suffisamment faible pour que l'information a priori ne soit pas trop prise en compte dans l'algorithme au détriment des informations acquises par les mesures. Pour cela, il est possible d'utiliser la technique de la L-curve comme présentée dans les articles [47] et [48]. Cette méthode consiste à tracer l'erreur sur une reconstruction donnée pour plusieurs valeurs d'un coefficient λ qui va pondérer une matrice de régularisation. L'idée est d'obtenir l'erreur de reconstruction la plus faible en ajoutant le moins d'informations a priori possibles sur les données mesurées. Lorsque cette courbe est tracée comme représentée de manière schématique sur la Figure 15, pour une certaine valeur de λ l'erreur de reconstruction ne diminue plus de manière significative et l'ajout d'information a priori reste faible. Il faut donc retenir la valeur de λ située à ce point de la L-curve comme représenté sur la Figure 15.

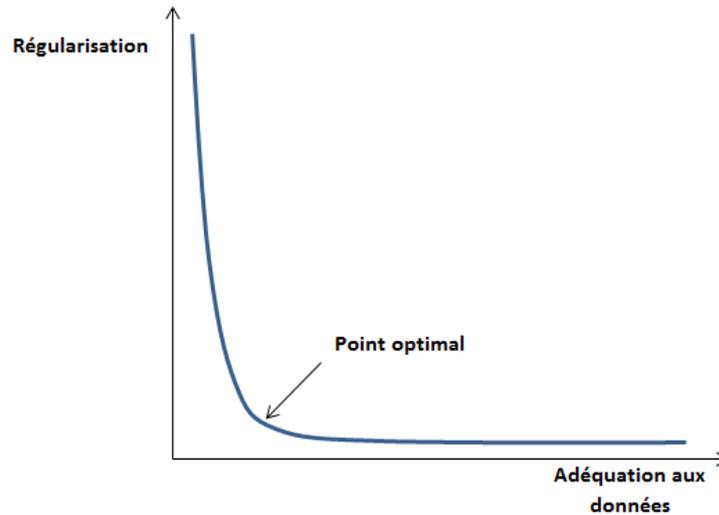


Figure 15 : Principe de la méthode de la L-curve

Ce calcul de L-curve a été réalisé successivement pour la température puis pour la concentration.

Enfin, dans l'article [49], les auteurs étendent l'utilisation de l'algorithme du recuit simulé à la reconstruction de la pression dans les écoulements. Il est montré dans cet article que la reconstruction de la température et de la concentration est améliorée si la pression n'est pas considérée comme constante sur l'ensemble de la surface étudiée et prise en compte dans la reconstruction tomographique.

4) Caractérisations sur bancs de combustion

Les techniques de spectroscopie d'absorption et de tomographies présentées ont été mises en applications par différents laboratoires.

L'article [50] présente des travaux menés au « Physical Sciences Inc » sur les mesures par diode laser accordables. Les travaux présentés montrent des mesures TDLAS et utilisent aussi TDLAT dans un mélange oxygène et azote. Une étude importante de spectroscopie d'absorption a été effectuée à l'Université de Stanford [51].

L'article [46], présente une application directe de la méthode menée à l'Institut Spatial de l'Université du Tennessee (UTSI) sur un moteur turboréacteur J85. Les cartographies de concentration en H_2O et de température sont obtenues. Dans l'article [52], les auteurs montrent une application de la TDLAT sur un banc de combustion supersonique. Leur méthode de résolution est basée sur une reconstruction linéaire de profils 2D de concentration et de température. L'absorption optique est reconstruite avec un grand nombre de faisceaux de mesures obtenus par utilisation de nappes lasers dispersées par des lentilles divergentes. Ce

grand nombre de faisceaux permet de faciliter la reconstruction linéaire de l'absorption optique. Des essais de caractérisation sur un super-statoréacteur sont présentés dans l'article [53]. Cet article présente une application de la TDLAT associée à des mesures par « Stereoscopic Particle Image Velocimetry » [54] utilisés mesurer des concentrations de H_2 et de vitesses d'écoulement.

IV) Introduction des travaux réalisés au cours de la thèse

Cette première étude bibliographique a montré qu'il existe deux grandes catégories de techniques de TDLAT exploitées dans la littérature : les approches en deux étapes qui commencent par un ou plusieurs problèmes de tomographie linéaire et l'approche hyper-spectrale qui relève de la tomographie non linéaire. Ces deux approches présentent plusieurs variantes au niveau de l'utilisation des algorithmes de tomographie. Dans le cadre de cette thèse, l'objectif est de mesurer des profils en deux dimensions de tranches de flammes issues de bancs de combustions à partir de mesures par TDLAS. Il a été choisi de développer une technique basée sur la méthode de tomographie hyper-spectrale non-linéaire pour plusieurs raisons.

La première est que les bancs de combustions sur lesquels ces mesures sont destinées à être mises en œuvre sont très restreints en accès optique. La technique de tomographie non-linéaire peut permettre de contrebalancer en partie le manque d'accès optique en multipliant les données par le grand nombre de mesures sur un spectre d'absorption.

La seconde est que nous souhaitons mesurer plusieurs espèces chimiques. En effet, l'ensemble des études présentées dans cette bibliographie n'ont cherché à reconstruire que la température, la pression dans certains cas et la concentration d'une seule espèce chimique. Or, les phénomènes de combustion qu'il est envisagé d'étudier mettent en jeu plusieurs espèces chimiques. Il est donc crucial de mesurer les concentrations de plusieurs de ces espèces simultanément pour caractériser correctement la combustion. Ces concentrations peuvent être estimées à partir de mesures de spectres d'absorption sur un même intervalle spectral sensible à plusieurs espèces ou sur plusieurs spectres situés sur des bandes spectrales différentes chacune sensible aux concentrations d'une espèce chimique.

Chapitre 2 : Mesures par TDLAS

La tomographie par spectroscopie d'absorption présentée dans cette thèse met en jeu l'utilisation de plusieurs spectromètres TDLAS. La première partie de notre travail, qui fait l'objet du présent chapitre, a donc été le développement de ces instruments. Nous présentons tout d'abord la méthode de calcul numérique utilisée pour inverser des spectres d'absorption et déterminer les concentrations chimiques et les paramètres thermodynamiques. Ensuite le chapitre présente le développement de ces instruments ainsi que leur utilisation sur des bancs de combustions. Pour cela, nous devons étudier dans un premier temps le modèle de spectromètre utilisé et rappeler son principe de fonctionnement. Nous détaillons les particularités de chacun de ceux qui ont été développés, à savoir : les sources lasers, les techniques d'étalonnage, ainsi que les sources d'erreurs et d'incertitudes sur les mesures. Enfin, nous présentons les mesures qui ont été effectuées sur des bancs de combustions afin d'étudier les contraintes expérimentales que peuvent poser ce type d'installations. Cette première étude expérimentale permet de donner des informations sur les moyens, les contraintes et les incertitudes qui caractérisent la TDLAS afin de les exploiter pour développer un algorithme et un système de mesure tomographique performant dans la suite du travail.

I) *Modélisation numérique de la spectroscopie d'absorption*

1) **Méthode d'inversion spectrale**

Le modèle mathématique de la spectroscopie d'absorption est celui présenté dans le chapitre I)1)a). L'absorption est celle donnée par les équations (7) et (8) (page 15) qui se résumant par l'expression :

$$p(\sigma) = -\log\left(\frac{I_j(\sigma)}{I_0(\sigma)}\right) = \sum_{kr} S(\sigma_{kr}, T) \cdot X_k \cdot f(\sigma - \sigma_{kr}, P, T)L \quad (62)$$

Avec σ le nombre d'onde, k l'indice de l'isotope de l'espèce chimique étudiée, r l'indice de la raie d'absorption de cet isotope, X_k la concentration de l'isotope k , P la pression, T la température, L la longueur d'intersection entre le faisceau et la zone d'étude, $f(\sigma - \sigma_{kr}, P, T)$ le profil de Voigt décrivant la forme de la raie d'absorption en fonction de la pression et de la température et $S(\sigma_{kr}, T)$ la force de raie. Il existe plusieurs méthodes pour exploiter ce type de signal. Celle que nous avons choisie est la technique de l'ajustement de courbe [10]. Cette méthode consiste à calculer numériquement un spectre d'absorption dépendant de la pression, de la température et de la concentration dans l'écoulement et

d'ajuster ces paramètres afin de faire correspondre les spectres mesurés et calculés. Cette correspondance est recherchée par un algorithme de minimisation de moindres carrés non-linéaires dont le principe est détaillé dans le chapitre 4 du livre [55].

Considérons $\theta = (\mathbf{P}, \mathbf{T}, \mathbf{X}_k)$ un vecteur contenant les valeurs de pression, température et concentration de l'isotope k recherchées. Les mesures fournissent un spectre d'absorption noté $\mathbf{p}_m(\sigma)$ et il est possible de calculer un spectre $\mathbf{p}_c(\theta)$ avec la formule de l'équation (9). Pour une valeur initiale θ_0 du paramètre, on définit E l'écart entre spectre mesuré et calculé par l'équation :

$$E = \|\mathbf{p}_m(\sigma) - \mathbf{p}_c(\theta)\|_W^2 \quad (63)$$

L'idée est de modifier les valeurs de θ_0 pour minimiser le critère E . On procède alors par itération, nous décrivons ci-dessous la première itération de l'algorithme. Par un développement de Taylor, l'expression du spectre calculé peut s'écrire :

$$\mathbf{p}_c(\theta) = \mathbf{p}_c(\theta_0) + \frac{\partial \mathbf{p}_c(\theta_0)}{\partial \theta_0} (\theta - \theta_0) \quad (64)$$

Avec $\frac{\partial \mathbf{p}_c(\theta_0)}{\partial \theta_0}$ la matrice Jacobienne contenant les dérivées partielles du spectre d'absorption par rapport à la pression, la température et la concentration calculée pour la valeur initiale

De cette manière, l'écart entre spectre mesuré et calculé peut s'écrire :

$$\tilde{E} = \left\| \mathbf{p}_m - \left(\mathbf{p}_c(\theta_0) + \frac{\partial \mathbf{p}_c(\theta_0)}{\partial \theta_0} (\theta - \theta_0) \right) \right\|_W^2 \quad (65)$$

Ainsi, le terme recherché pour diminuer l'écart est le terme de correction $(\theta - \theta_0)$ que l'on notera $\delta\theta$. Pour que l'écart \tilde{E} soit minimal, le terme correctif $\delta\theta$ doit satisfaire l'équation :

$$\delta\hat{\theta} = (\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{J} + \lambda \mathbf{D})^{-1} \cdot \mathbf{J}^T \cdot \mathbf{W} \cdot (\mathbf{p}_m - \mathbf{p}_c(\theta_0)) \quad (66)$$

Avec $\mathbf{J} = \mathbf{J}(\mathbf{P}, \mathbf{T}, \mathbf{X}_k)$ la matrice Jacobienne contenant les dérivées partielles des spectres par rapport à la concentration, la pression et la température. La nouvelle valeur du paramètre à l'issue de cette itération est alors $\theta_1 = \theta_0 + \delta\hat{\theta}$ où $\delta\hat{\theta} = (\delta\hat{\mathbf{P}}, \delta\hat{\mathbf{T}}, \delta\hat{\mathbf{X}}_k)$ est un vecteur contenant des incréments de concentration, pression et température. Pour stabiliser l'optimisation, l'algorithme de Levenberg-Marquardt ajoute une matrice diagonale \mathbf{D} pondérée par un coefficient positif λ . L'ajout de ce terme a cependant pour effet de ralentir la convergence [56]. Le schéma de principe de cet algorithme est représenté sur la Figure 16.

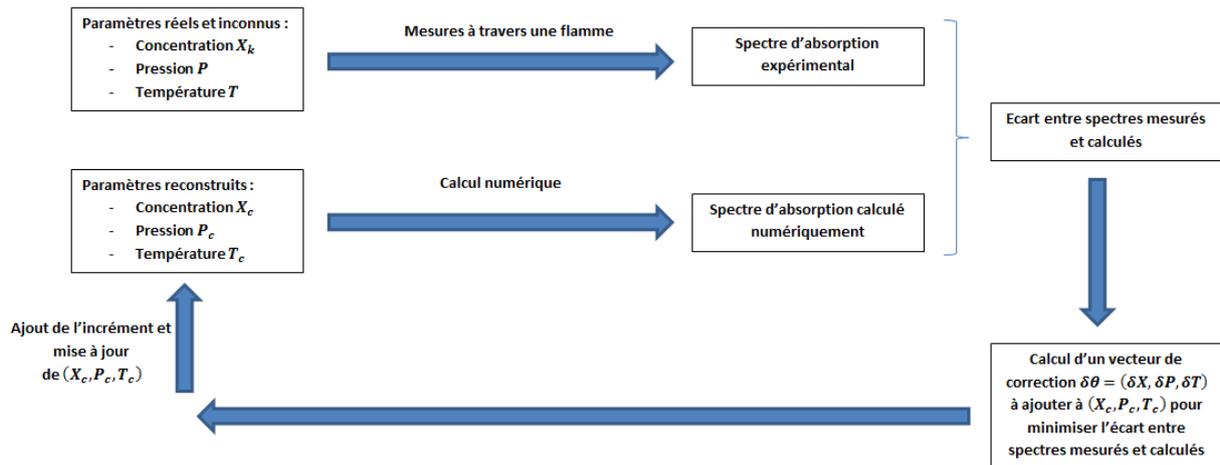


Figure 16 : Schéma de principe de l'algorithme de minimisation de moindres carrés non-linéaires

A partir de la méthode de moindre carré non-linéaire de l'équation (66), il est possible de déterminer l'incertitude de mesure de chaque paramètre (P, T, X_k). D'après la référence [57], si on note $\hat{\theta}$ le paramètre obtenu à l'issue de l'optimisation, $\hat{E} = \|p_m - p_c(\hat{\theta})\|_W^2$ la valeur finale du critère et $\hat{J} = J(\hat{\theta})$ la matrice Jacobienne finale, l'incertitude sur le vecteur de paramètre peut s'exprimer sous la forme d'une matrice de covariance estimée par :

$$R_{\theta} = \frac{\hat{E}}{N - K - 2} (\hat{J}^T \cdot W \cdot \hat{J})^{-1} \quad (67)$$

Avec N le nombre de points échantillonnant le spectre (le terme « K+2 » au dénominateur provient du nombre de paramètres (P, T, X_k) estimés, avec K le nombre de valeurs de concentrations).

2) Outils de calcul numérique de spectres d'absorption

Cette méthode nécessite un outil de simulation de spectre d'absorption. Nous avons donc commencé par développer un programme de calcul capable d'exploiter les données spectroscopiques de la base de données HITRAN [3]. Ce programme utilise en entrée :

- Un intervalle de longueur d'onde σ .
- Des valeurs de concentration d'une ou plusieurs espèces chimiques noté X_k avec k l'indice de l'espèce chimique, la pression et la température dans le milieu notés P et T .
- La longueur d'intégration L de la mesure.

On simule ainsi le spectre d'absorption calculé à partir de la force de raie (9) et d'un profil de Voigt (6).

Pour calculer la force de raie donnée dans l'équation (9), il est indispensable de déterminer pour une molécule donnée ses fonctions de partitions. Dans la base HITRAN, chaque molécule et tous ses isotopes sont identifiés par des numéros d'identifiant noté ID et par des numéros d'isotopes notés ISO. Les coefficients de la fonction de partitions sont donnés pour une température de référence $T_0 = 296 K$ et pour une température quelconque notée T . Le programme fournit donc par une lecture dans HITRAN les coefficients de la fonction de la partition $Q(T_0)$ et $Q(T)$ utilisés pour calculer la force de raie de l'équation (9).

En ce qui concerne le profil de raie d'absorption, nous avons utilisé l'approximation numérique du profil de Voigt donnée par la méthode de Hui [58] qui modélise ce profil par un calcul mettant en jeu des nombres complexes. Cette technique nécessite le calcul de la fonction d'erreur complexe dont l'expression est :

$$w(z) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\pi} \int_0^z e^{-t^2} dt \right) \quad (68)$$

Dans cette expression, le nombre complexe z est défini par :

$$z = x + iy = \frac{\sigma - \sigma_{kr}}{\alpha_D(T)} + i \frac{\alpha_L(P, T)}{\alpha_D(T)} \quad (69)$$

Avec $\alpha_D(T)$ le coefficient d'élargissement Doppler et $\alpha_L(P, T)$, le coefficient d'élargissement Lorentzien. Il a été montré l'article de Hui [58] que la partie réelle de la fonction d'erreur complexe $w(z)$ correspond à la convolution des profils Doppler et Lorentzien qui permettent de calculer un profil de Voigt. La fonction d'erreur complexe $w(z)$ est approximée par un rapport entre deux polynômes de degrés 6 et 7 selon :

$$w(z) = \frac{\sum_{m=0}^6 a_m (y - ix)^m}{\sum_{n=0}^7 b_n (y - ix)^n} \quad (70)$$

Les coefficients a_m et b_n sont des valeurs d'ajustement de courbes donnés dans l'article de Hui [58] qui permettent de faire l'approximation de l'équation (68) avec l'équation (70). Finalement, le code de calcul récupère le numéro d'identification de la ou les molécules étudiées, récupère les coefficients d'élargissement Doppler et Lorentzien dans la base de données HITRAN et fournit en sortie le profil de Voigt à partir du calcul de la fonction d'erreur complexe pour ces coefficients.

Le code utilise ensuite les résultats des forces de raies et de profil de Voigt ainsi que la valeur de la concentration des espèces chimiques présentes dans le milieu et la longueur d'intégration pour calculer un spectre d'absorption. Le principe global de ce calcul est représenté sur la Figure 17.

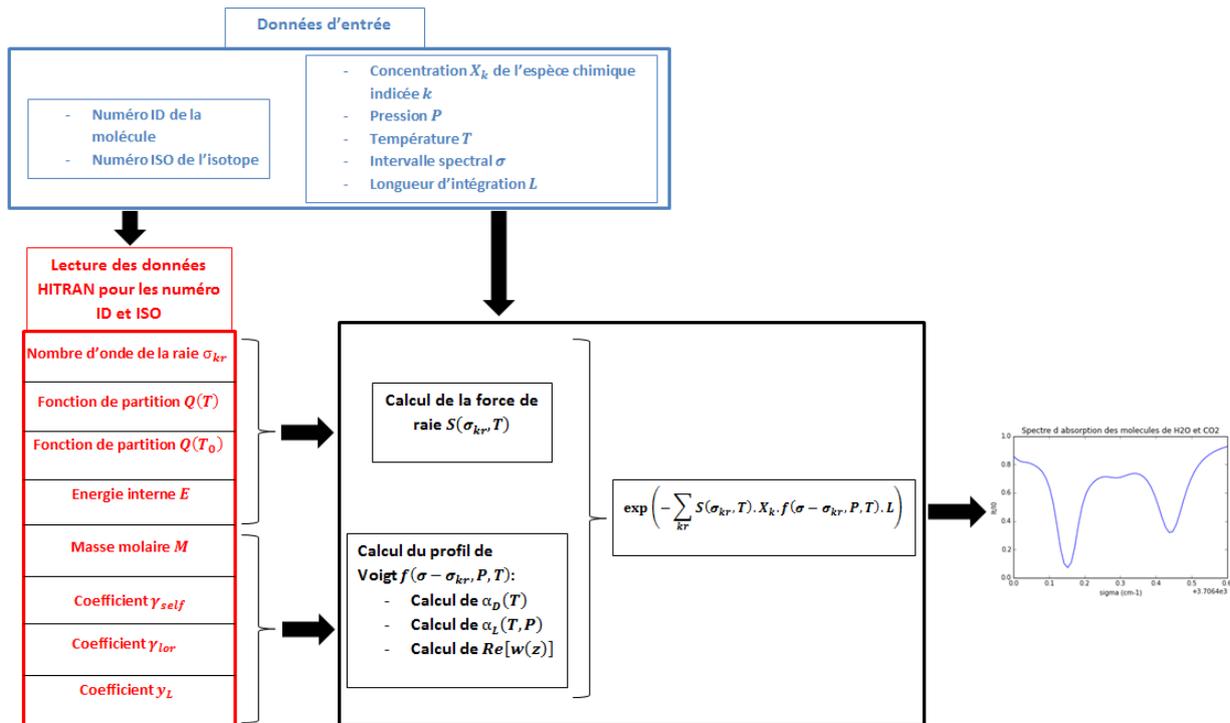


Figure 17 : Schéma de principe du programme de calcul numérique d'un spectre d'absorption

Avec cet outil, il est possible de modéliser numériquement n'importe quel spectre d'absorption d'une molécule pour toutes les conditions de concentration chimique, pression et température. Cela permet ensuite d'utiliser l'algorithme d'ajustement de courbe sur les profils spectraux mesurés. Ces mesures utilisent des spectromètres adaptés aux molécules étudiées qui sont décrits dans la suite.

II) Modèle de spectromètre d'absorption

1) Principe d'un spectromètre de TDLAS

Un spectromètre d'absorption est constitué d'une source laser, de détecteurs optiques et d'un système d'étalonnage spectral indispensable pour réaliser des mesures correctes. Nous allons présenter le schéma typique de cet instrument.

Son premier élément est une source laser accordable qui émet un rayonnement sur une plage de longueur d'onde particulière. Cette émission laser est ensuite divisée en trois parties distinctes :

- La première qui prend la majorité de la puissance laser est celle qui est envoyée à travers l'écoulement et qui sert à faire l'acquisition du spectre expérimental. Elle peut éventuellement être divisée en plusieurs voies afin de réaliser des mesures à plusieurs positions dans l'écoulement gazeux.

- La deuxième prend une petite portion du signal émis et le fait passer au travers d'une cuve de gaz à basse pression contenant les espèces chimiques absorbant sur l'intervalle de longueur d'onde utilisé. Cette voie de mesure permet l'acquisition d'un spectre avec une ou plusieurs raies d'absorption identifiées. La basse pression rendant la raie très fine, il est possible de connaître précisément sa position spectrale en mesurant le minimum de la raie qui peut donc servir de référence de longueur d'onde absolue.
- La troisième partie du signal laser passe à travers une cavité de Fabry-Pérot qui fournit une figure d'interférence. Les pics d'interférence sont séparés en longueur d'onde par une valeur connue ne dépendant que des propriétés physiques de la cavité. En mesurant cette figure d'interférence sur l'intervalle de longueur d'onde balayé par le laser, il est possible de déterminer une série de points séparés par un intervalle de longueur constant servant de graduation en longueur d'onde sur l'axe des abscisses.

Le schéma de principe d'un spectromètre d'absorption est représenté sur la Figure 18.

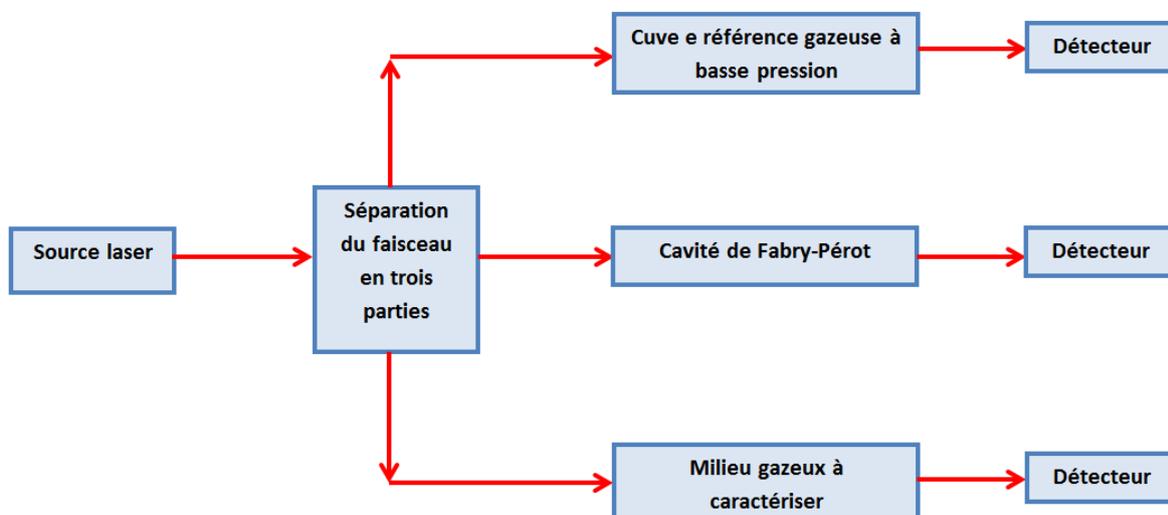


Figure 18 : Schéma de principe d'un spectromètre d'absorption

2) Techniques d'étalonnage

a) Etalonnage de l'axe des longueurs d'ondes

Le rôle des deux voies de mesures dans la cuve et dans la cavité de Fabry-Pérot est d'étalonner l'intervalle de longueur d'onde balayé par la diode laser au cours de la mesure. Cette étape est primordiale pour réaliser une mesure par TDLAS. En effet, l'inversion

spectrale est très dépendante des valeurs des longueurs d'ondes des spectres. Si le minimum d'une raie n'est pas parfaitement positionné à sa véritable longueur d'onde des incertitudes peuvent être créées sur la détermination de la concentration (qui dépend principalement de cette valeur) mais aussi sur la pression car un décalage de la raie par rapport à son minimum de référence peut être interprété comme un décalage Doppler provenant de la pression. Un décalage des raies peut également engendrer des écarts sur la reconstruction des ailes de la raie dont dépend la température.

L'idée est d'attribuer une valeur de nombre d'onde à chaque point de l'axe des abscisses d'un spectre. Les deux voies d'acquisitions fournissent des spectres comme ceux représentés sur la Figure 19.

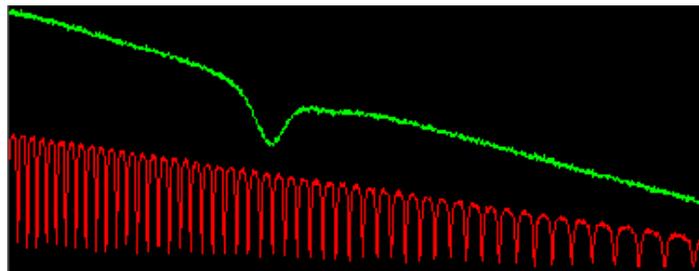


Figure 19 : Raie de référence acquise dans une cuve à basse pression (courbe verte) et figure d'interférence de Fabry-Pérot (courbe rouge)

La technique de calibration extraite de l'article de Clar [59] est basée sur la mesure de l'intervalle spectral libre de la cavité de Fabry-Pérot utilisée. Ce dernier peut être calculé pour une cavité quelconque par la formule :

$$ISL = \frac{1}{2 \cdot L_c \cdot n(\sigma_0)} \quad (71)$$

Avec L_c l'épaisseur de la cavité et $n(\sigma_0)$ l'indice du matériau de la cavité au nombre d'onde σ_0 . Cet intervalle spectral libre homogène à un nombre d'onde correspond à l'écart en longueur d'onde entre deux franges de la figure d'interférence. Pour le calibrage, on utilise la mesure du ou des minimums de raies d'absorption à basse pression et de l'intervalle spectral libre qui donnent des valeurs des longueurs d'ondes à certains points de l'axe des abscisses. On utilise ensuite un algorithme d'ajustement polynomial pour extrapoler la totalité de l'axe des longueurs d'ondes. L'algorithme prend en entrée les points de l'axe des abscisses noté x , et les coefficients d'extrapolations a_i calculés à partir de l'ajustement polynomial et donne un axe de nombre d'onde étalonné :

$$\sigma = \sum_{i=0}^N a_i x^i \quad (72)$$

Ce calcul permet donc d'obtenir un axe de nombre d'onde étalonné pour chaque spectre mesuré.

b) Enveloppe du spectre

En TDLAS, le balayage en longueur d'onde est souvent fait à partir d'un balayage en forme de rampe mais peut également avoir d'autres formes. L'enveloppe du signal a une influence sur les raies d'absorption et donc sur les grandeurs chimiques et thermodynamiques mesurées. En effet, la forme des raies d'absorption est caractéristique des coefficients d'élargissement Doppler et Lorentzien dépendant de la pression et de la température. Si le traitement de l'enveloppe du signal déforme les raies d'absorption, il s'en suit une erreur sur la reconstruction de la pression et de la température lors de l'inversion. Il est donc également indispensable de traiter correctement les effets de l'enveloppe spectrale avant toute inversion. Dans le cas le plus simple où la forme de l'enveloppe est connue, l'opération de calibration consiste simplement à réaliser un découpage des raies d'absorption et à interpoler les points du signal comme si cette raie était absente (Figure 20).

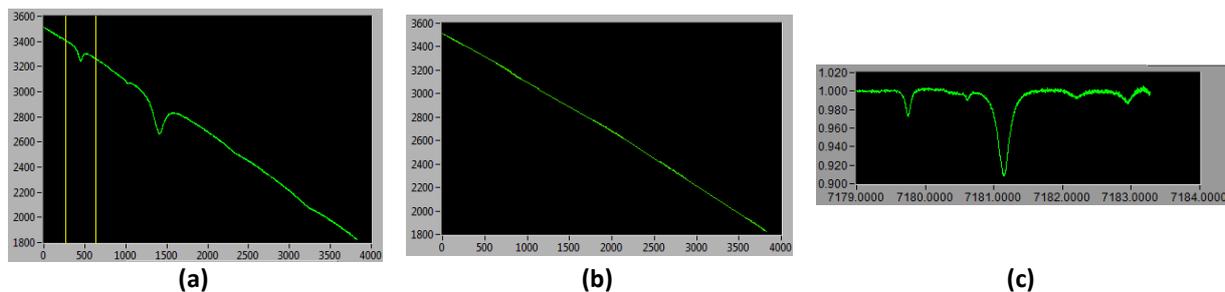


Figure 20 : Calibrage de l'enveloppe spectral par la méthode du découpage des raies et de l'interpolation, (a) spectre mesuré avec l'enveloppe en forme de rampe, (b) enveloppe du signal après découpage et interpolation des points remplaçant les raies d'absorption et (c) spectre calibré après suppression de l'enveloppe spectrale

Cependant, avant de traverser la zone d'étude, le faisceau peut passer à travers l'atmosphère dans la zone environnant la flamme et le spectromètre. Or, certaines espèces chimiques de l'atmosphère peuvent absorber le signal émis et donc créer des raies d'absorption supplémentaires. Afin que ces raies ne soient pas prises en compte dans l'inversion spectrale, il est également nécessaire de supprimer leur contribution sur le spectre final. La technique consiste alors à faire l'acquisition d'un spectre dans les mêmes conditions expérimentales avec le même balayage en longueur d'onde et le même chemin optique. Cette première acquisition permet de quantifier la contribution de l'environnement sur les spectres. Une fois cette contribution connue, elle est supprimée dans les spectres

acquis dans la zone d'étude. Ainsi, il ne reste sur le spectre que les contributions des espèces chimiques présentes dans la zone d'étude (Figure 21).

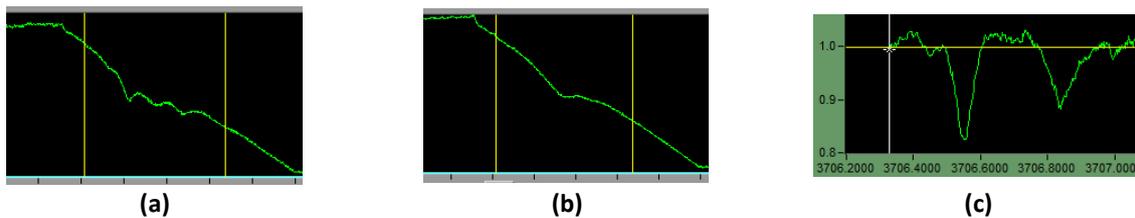


Figure 21 : Calibrage de l'enveloppe d'un spectre d'absorption acquis dans une flamme pour caractérisation de l'espèce H_2O après traversée de l'atmosphère : (a) spectre acquis à travers l'environnement et la flamme (contribution du H_2O dans la flamme et du CO_2 atmosphérique), (b) spectre acquis à travers l'environnement sans la flamme correspondant à la contribution de l'atmosphère (CO_2 atmosphérique) sur le spectre complet et (c) le spectre calibré après suppression de l'enveloppe du signal et des contributions des espèces chimiques de l'atmosphère

La combinaison du calibrage spectral et du traitement de l'enveloppe permet d'obtenir le même type de spectres que celui qui est calculé numériquement avec l'algorithme utilisant la base de données HITRAN. De cette manière, ils sont comparables entre eux et peuvent être utilisés pour l'inversion spectrale. Des sources d'erreurs peuvent néanmoins apparaître lors de l'acquisition. La plus importante reste le bruit sur les mesures.

c) Sources d'erreurs et d'incertitudes

Dans cette partie, nous allons faire un descriptif de ces erreurs en expliquant leurs causes et leurs impacts sur l'inversion spectrale.

Une première source d'erreur est l'émission propre de la flamme. En effet, une flamme peut émettre de la lumière à la longueur d'onde du laser utilisé pour les mesures. Ce qui peut avoir pour conséquence de déformer ou d'occulter complètement certaines raies d'absorption sur le spectre ou de modifier la forme de l'enveloppe spectrale. Pour limiter ce problème des filtres sont mis en place sur les collimateurs pour limiter les effets de la lumière émise directement par la flamme. Cependant, l'utilisation de ces filtres peut provoquer un effet de cavité optique qui module le signal issu de la diode et crée un signal de Fabry-Pérot parasite sur le spectre qui peut perturber l'inversion spectrale. Ce phénomène se produit lorsque les deux faces du filtre sont perpendiculaires à l'axe du faisceau. La solution est donc de placer le filtre de telle sorte qu'il ne soit pas parfaitement perpendiculaire au faisceau. Le même phénomène de Fabry-Pérot parasite peut se produire lorsque la mesure se fait sur un banc de combustion fermé où la flamme est observée à travers deux hublots. Dans ce cas, il est nécessaire de faire traverser la zone au faisceau avec un léger angle par rapport à la normale aux hublots. En revanche, de cette manière l'alignement optique est plus difficile sachant que le passage non perpendiculaire à travers

les hublots peut induire une translation du faisceau laser qui peut être délicat à compenser pour le détecteur optique.

Le bruit de détection optique est aussi à considérer. Dans le cas où l'amplitude de ce bruit est du même ordre de grandeur que la profondeur d'une raie (ce qui est le cas pour de petites raies), l'algorithme pourrait interpréter un point de bruit comme le minimum d'une raie d'absorption et ce qui pourrait perturber l'inversion. Il est donc primordial de le réduire au maximum.

Pour limiter son impact sur l'inversion spectrale plusieurs actions peuvent être mises en œuvre. Tout d'abord, il faut chercher à optimiser le rapport signal sur bruit en évitant des pertes dans la lumière laser au niveau des collimateurs optiques. Il faut pour cela bien optimiser l'alignement optique des collimateurs qui émettent et récupèrent le signal à travers la flamme pour le focaliser dans les fibres optiques. La diminution du bruit peut aussi être faite avec l'ajout de filtres électroniques sur le signal envoyé à la carte d'acquisition des détecteurs. On peut notamment utiliser des filtres transimpédance mais en choisissant bien la fréquence de coupure pour ne pas déformer les raies d'absorption. Il est également possible de diminuer l'impact du bruit en faisant une moyenne des spectres acquis.

III) Spectromètres développés

Au cours de cette thèse, plusieurs spectromètres de TDLAS ont été développés chacun ciblant une espèce chimique particulière. L'idée était de les utiliser tous simultanément sur des bancs de combustions lors des mesures par tomographie. Les espèces chimiques qui ont été recherchées sont le H₂O, le CO₂, le CO, le potassium K et le HCl. Les détails du développement et les spécificités de ces spectromètres sont données dans les paragraphes suivants.

1) Le spectromètre H₂O

Le premier spectromètre développé est un dispositif permettant de caractériser la molécule de H₂O. La source laser est une diode laser du fabricant Eblana émettant sur une fenêtre spectrale allant de 1,3920 μm et 1,3930 μm , ce qui permet le sondage de plusieurs raies de H₂O sans interférences avec des raies d'autres espèces chimiques. D'après les données HITRAN, 41 raies d'absorption sont observables sur cet intervalle, mais seulement 8 raies sont suffisamment intenses pour être détectables avec le système de détection optique (Figure 22). Le balayage en longueur d'onde de la diode est effectué à l'aide du générateur de signaux d'un dispositif électronique multifonctions Picoscope (modèle 4824) qui module

le courant de la diode selon un signal en forme de rampe jusqu'à une fréquence de 10KHz. La fenêtre spectrale autorisée par la rampe de courant est plus petite que la plage spectrale permise par la diode mais un réglage supplémentaire par changement de température de la diode permet de positionner la fenêtre spectrale due au courant sur les raies que l'on souhaite sonder. Le module Picoscope dispose aussi de huit voies de numérisations à 20 MHz/12bits ce qui permet d'acquérir simultanément toutes les voies des faisceaux laser pour la calibration et pour les mesures dans l'écoulement.

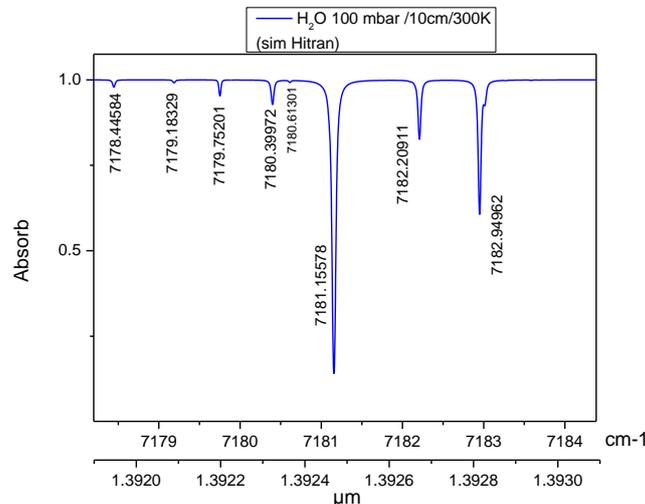


Figure 22 : Raies d'absorption visibles à basse pression sur l'intervalle spectral balayé par le spectromètre

La diode Eblana est à sortie fibrée à maintien de polarisation ce qui permet l'emploi de fibre optique facilitant ou évitant certains alignements optiques délicats. Le système de calibration spectrale peut aussi être construit à base de fibres optiques pour aboutir à un module plus compact. Le faisceau laser fibré sortant de la diode laser est divisé en deux parties à l'aide d'un coupleur à fibre optique 90/10. Les 10 % du signal sont divisés en deux parties à l'aide d'un coupleur 50/50 avant d'être dirigés vers le système de calibration. La première moitié est dirigée vers la cuve de référence de longueur de 10 cm contenant de l'eau sous forme gazeuse à la température ambiante soit 300 K et à une pression d'environ 10 torr. Le signal en sortie de fibre est envoyé à travers la cuve à l'aide d'un collimateur à miroir off-axis et est ensuite récupéré par un photo-détecteur. La deuxième moitié est envoyée à la cavité Fabry-Pérot de conception employant une cavité fibrée. Il a été construit à partir d'un coupleur fibre optique 2x2-50/50 dont l'une des sorties a été reconnectée sur l'une des deux entrées par une soudure. La longueur de la boucle en fibre optique ainsi créée correspond à la longueur de la cavité L utilisée dans l'équation (71). Dans notre cas, la longueur obtenue est $L = 23,30 \text{ cm}$ correspondant à un intervalle spectral libre $ISL = 0,01431 \text{ cm}^{-1}$. Nous aurions souhaité une longueur de cavité plus faible afin que l'intervalle spectral libre soit plus grand afin de mieux distinguer les franges par notre système de détection optique. Mais il n'a pas été possible d'obtenir une longueur plus faible car la soudeuse à maintien de polarisation utilisée nécessite une longueur de fibre minimale

pour réaliser la soudure correctement. La mesure de la figure d'interférence est réalisée avec le même type de photodétecteur que pour la mesure à travers la cuve. Enfin, les 90% du signal servent à la mesure à travers le milieu gazeux étudié. La baie de mesure devant être éloignée du banc de combustion pour des raisons de sécurité et ces d'installations étant généralement encombrées, l'acheminement du signal jusqu'à l'écoulement et son retour sont fait par des fibres optiques de 5 m de long. Au niveau de l'écoulement, le signal sortant de la fibre d'émission est envoyé dans la zone d'étude par un collimateur off-axis et il est récupéré par un autre collimateur du même type afin d'être envoyé dans la fibre de réception reliée au photodétecteur. Les photodétecteurs envoient ensuite les signaux à la carte d'acquisition. Le schéma de l'architecture de ce spectromètre est représenté sur la Figure 23.

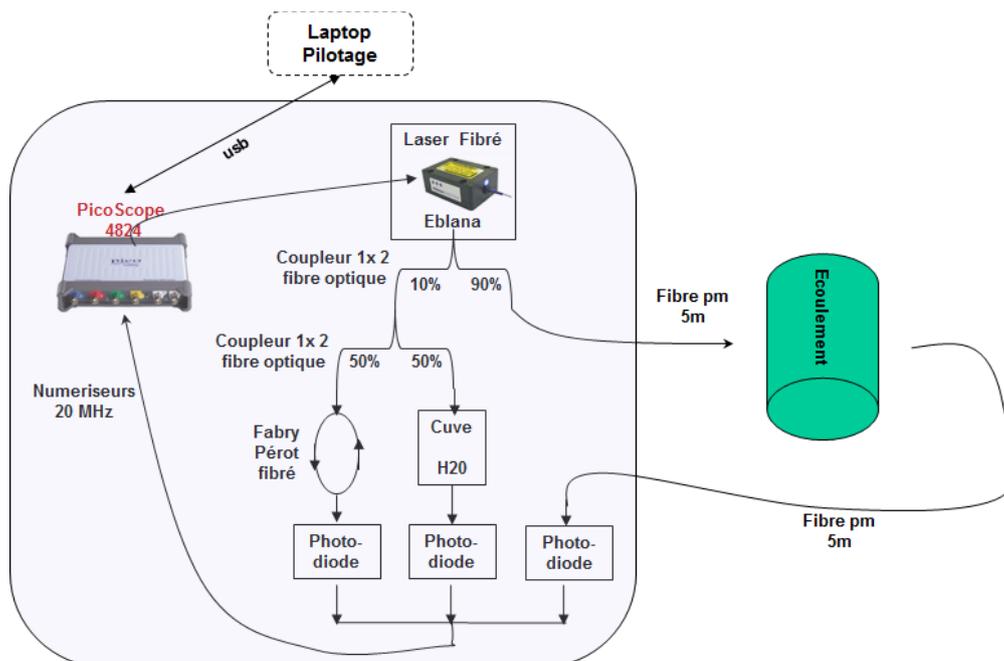


Figure 23 : Schéma de principe du spectromètre permettant de caractériser l'espèce H₂O

2) Le spectromètre CO

Les raies d'absorption les plus intenses de CO (et celles que l'on souhaite sonder d'après nos calculs de sensibilité) se situent dans l'infra-rouge moyen à environ $4,58 \mu\text{m}$. Ce type de longueur d'onde ne pouvant pas être atteint avec une diode laser, il a été choisi d'utiliser un Quantum Cascade Laser (QCL) comme source laser qui peut balayer un intervalle de longueur d'onde entre $4,5830 \mu\text{m}$ et $4,5956 \mu\text{m}$. D'après HITRAN, 8 raies d'absorption existent dans cet intervalle mais seulement deux sont suffisamment fortes pour être détectées avec les quantités de CO attendues. Tout comme pour le montage H₂O, le banc CO suit l'architecture typique d'un spectromètre TDLAS à la différence que le QCL ne

dispose pas de sortie à fibre optique. Le QCL est piloté par un générateur de signaux dédié (Thorlabs ICL4500) modulant son alimentation en courant et sa température. Le faisceau laser sortant du QCL après collimation par une lentille infrarouge est divisé en trois parties (deux pour l'étalonnage et une pour les mesures) avec des lames séparatrices. Une première lame prélève 5 % du signal et l'envoie dans une cuve de référence de longueur de 10 cm contenant du CO pur à une pression de 10 *mbar* et à une température de 300 *K*. Après cette lame, il reste 95 % du signal émis qui passe au travers d'une seconde lame séparatrice. Celle-ci prélève également 5 % du faisceau pour l'envoyer à travers une cavité de Fabry-Pérot. Dans ce cas, la cavité est composée d'un cristal de germanium dont l'intervalle spectral libre est $ISL = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$. Le reste du signal est envoyé à travers des fibres optiques transparentes à la longueur d'onde du QCL à savoir des fibres optiques en ZnF_4 reliées à des collimateurs à miroir off-axis alignés sur l'écoulement étudié. Les signaux sont acquis avec des photodétecteurs HgCdTe. Le schéma de principe de ce spectromètre est représenté sur la Figure 24.

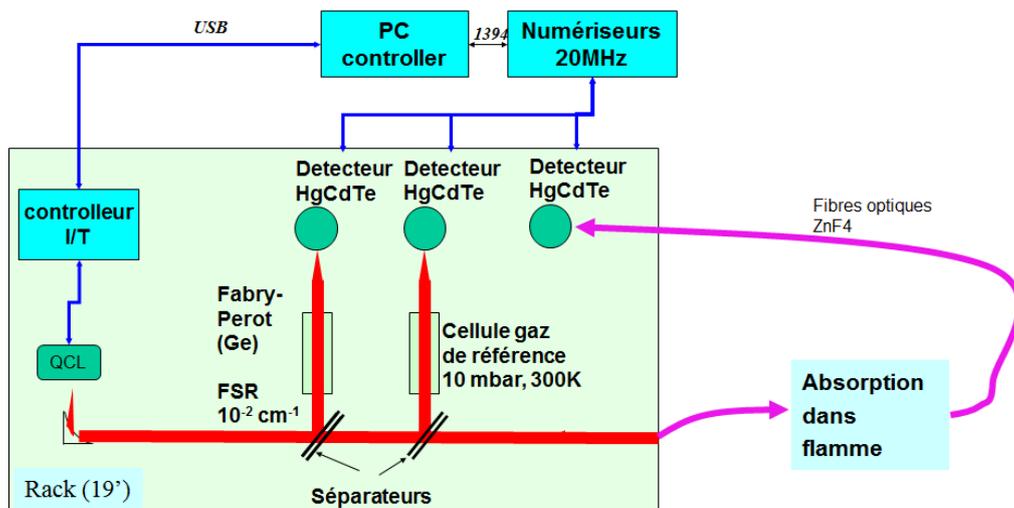


Figure 24 : Schéma de principe du spectromètre permettant de caractériser l'espèce CO

L'intervalle spectral balayé par le QCL permet d'observer deux raies d'absorption fondamentales du CO (Figure 25).

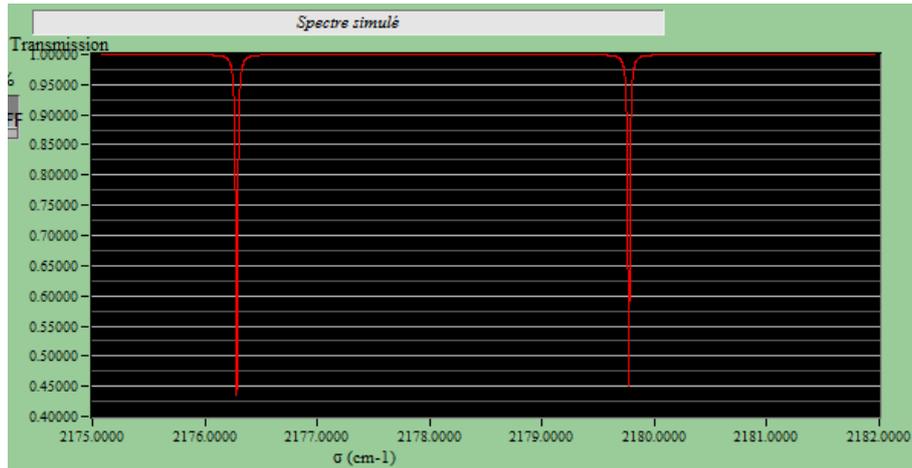


Figure 25 : Intervalle spectral balayé par le QCL montrant les deux raies fondamentales du CO à $2176,2835 \text{ cm}^{-1}$ et à $2179,7719 \text{ cm}^{-1}$

Les mesures seront effectuées à très haute température, de l'ordre de 2000 K et à haute pression de l'ordre de 3 bar . Dans ce cas, des raies chaudes apparaissent à proximité des raies fondamentales et un élargissement des raies se produit (Figure 26) lié à la pression et à l'effet Doppler.

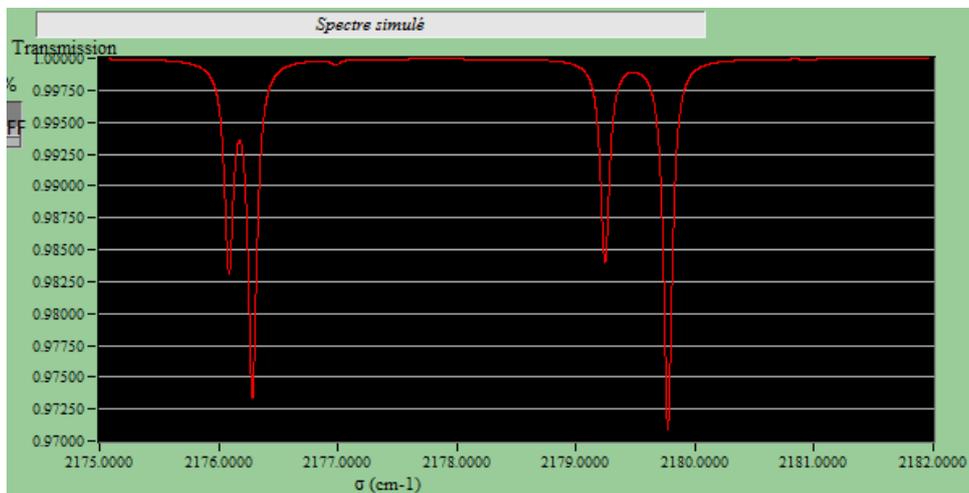


Figure 26 : Intervalle spectral du QCL simulé à haute température avec apparition de raies chaudes

L'analyse de ces raies chaudes permet d'obtenir une bonne sensibilité à la température. Il est donc indispensable de les utiliser pour l'inversion spectrale. Cependant, dans la pratique, il n'est pas possible de régler le QCL pour balayer l'intervalle de longueur d'onde entier en une seule acquisition. On balaye un intervalle plus restreint autour d'une des deux raies fondamentales et des raies chaudes adjacentes. D'après la Figure 26, la raie fondamentale située à $2176,2835 \text{ cm}^{-1}$ recouvre une partie de la raie chaude qui lui est associée, ce qui peut générer des incertitudes de mesures. On a donc choisi d'utiliser un intervalle autour de la raie à $2179,7719 \text{ cm}^{-1}$ prenant également en compte la raie chaude qui lui est associée sans recouvrement au niveau des ailes de la raie.

3) Le spectromètre HCl

Les raies choisies pour le sondage HCl sont autour de $1,7\mu\text{m}$ où l'on peut disposer de diode laser à sortie fibrée. Le spectromètre pour cette espèce a donc été développé sur le même modèle que celui pour H_2O . Les seules différences sont dans l'emploi de HCl dans la cuve de référence et des photodétecteurs InGaAs capables de mesurer des signaux à des longueurs d'ondes comprises entre 800 nm et 1700 nm . La diode laser, de modèle Eblana aussi, permet d'étudier la plage spectrale comprise entre $1,7208\mu\text{m}$ et $1,7226\mu\text{m}$ où deux raies d'absorption du HCl sont observables (Figure 27).

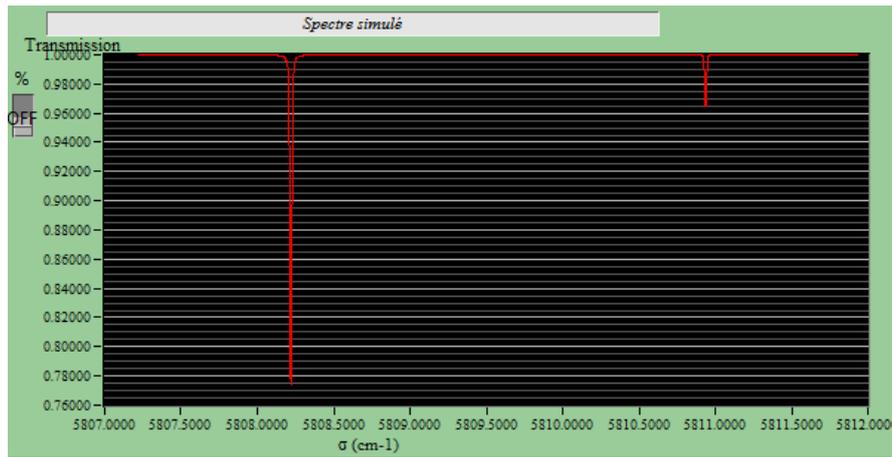


Figure 27 : Spectre d'absorption simulé représentant les deux raies de HCl sur l'intervalle de longueur d'onde de la diode laser

Cependant, pour les mesures envisagées les concentrations de HCl attendues sont inférieures à celles utilisées pour simuler ces spectres et seulement la raie la plus intense est visible sur les spectres acquis, dans ce cas il s'agit de la raie à $1,7217\mu\text{m}$.

4) Le spectromètre potassium K

Le potassium est un cas particulier. En effet, contrairement aux autres espèces étudiées, il s'agit d'une espèce atomique et non moléculaire. Ainsi, les données spectroscopiques le concernant ne sont pas disponibles dans la base de données HITRAN et certaines doivent être récupérées dans la base de données National Institute of Standards and Technology (NIST [60]). De plus, les propriétés physiques de cet atome vont ajouter de nouvelles contraintes expérimentales dans le spectromètre.

La diode laser choisie émet dans le visible sur un intervalle de longueur d'onde situé entre $766,2\text{ nm}$ et $767,2\text{ nm}$ permettant de sonder la raie de potassium D1 à $766,48991\text{ nm}$. Cette diode laser est de type Butterfly non-fibrée alimentée par un

contrôleur (modèle Thorlabs) qui commande l'intensité de l'alimentation et la température. Ce contrôleur est capable d'accepter une rampe de courant externe venant d'un module Picoscope comme celui utilisé pour les autres spectromètres décrits plus haut. Compte tenu de l'émission laser dans le visible où des composantes à fibres optiques sont facilement disponibles, nous avons cherché à munir la diode laser d'une sortie fibrée de façon à construire un spectromètre tout fibré à l'instar de celui pour H₂O ou HCL. Ceci a été relativement aisé en focalisant le faisceau laser initial de la diode dans une fibre optique à l'aide d'un collimateur off-axis. La cavité de Fabry-Pérot fibrée construite donne un intervalle spectral libre $ISL = 0,019697 \text{ cm}^{-1}$. La mise en œuvre de la cuve de référence est plus délicate et particulière. Le potassium étant un métal le plus souvent à l'état solide, nous avons utilisé une cuve contenant du potassium dans laquelle le vide a été fait à $1,0 \cdot 10^{-2} \text{ bar}$. Ensuite, un dispositif de chauffage est utilisé pour augmenter la température du potassium jusqu'à sa température de vapeur saturante à $63,5^\circ\text{C}$. La sublimation du potassium permet l'observation d'une raie d'absorption.

En ce qui concerne la simulation des raies d'absorption du potassium, le calcul de force de raies et de profils de Voigt est indispensable. La base de données NIST fournit des informations spectroscopiques des espèces atomiques. D'après cette base de données, le niveau d'énergie du potassium à la longueur d'onde étudiée est $E = 13042,9 \text{ cm}^{-1}$. A partir de ce niveau d'énergie et des poids statistiques des différents états dégénérés du potassium [6], il est possible d'en déduire les coefficients de partitions et donc la force de raie.

5) Le spectromètre CO₂ et H₂O

Dans le cadre de cette thèse un spectromètre caractérisant les espèces H₂O et CO₂ a été utilisé. Il n'a pas été développé au cours de la thèse mais nous l'avons utilisé pour les expérimentations de tomographies. Son fonctionnement est décrit dans l'article [61] et sur la Figure 28.

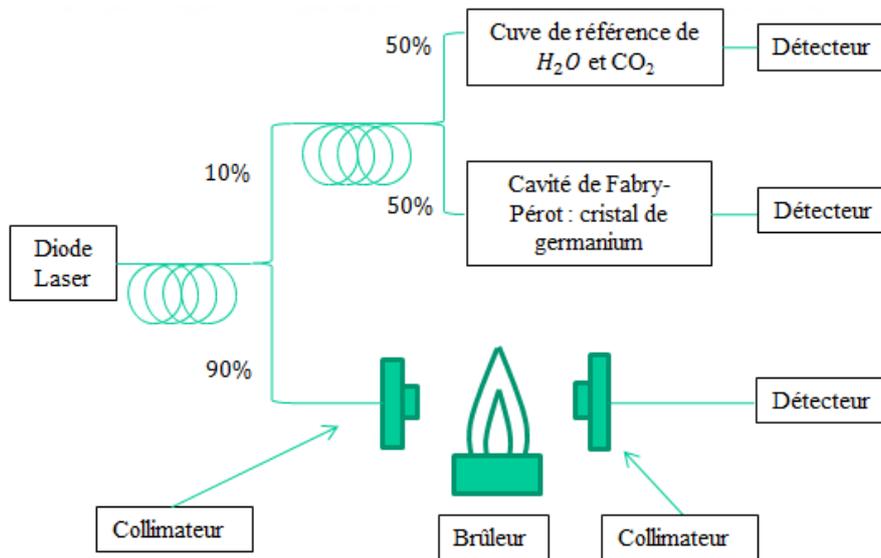


Figure 28 : Schéma de principe du spectromètre permettant de caractériser les espèces H_2O et CO_2

Ce spectromètre est composé d'une diode laser accordable en longueur d'onde entre $3706,3 \text{ cm}^{-1}$ et $3707,0 \text{ cm}^{-1}$ pour acquérir des raies d'absorption de H_2O et de CO_2 suffisamment détectables dans les conditions thermochimiques étudiées. Tout comme pour les autres spectromètres, une partie (10%) de l'émission laser est prélevée et divisée ensuite en deux autres parties qui fournissent les deux spectres particuliers utilisés pour calibrer la résolution spectrale. La première partie traverse une cuve de référence contenant des vapeurs de H_2O et de CO_2 à une pression de 10 kPa et à une température de 300 K, ce qui permet d'obtenir un spectre avec une raie d'absorption identifiée qui sert de référence. Dans la seconde partie, la lumière passe dans un cristal de germanium à faces polies à $\lambda/10$ pour faire office de cavité de Fabry-Pérot et qui produit une figure d'interférence.

IV) Mise en œuvre sur bancs de combustion

Les spectromètres développés ont été implantés dans une baie de façon à disposer d'un système de mesure intégré, transportable et permettant la mesure de cartographies de plusieurs espèces chimiques simultanément. Cependant, avant sa mise en œuvre nous avons dû faire des mesures avec chacun de ces spectromètres séparément en mesures intégrées par TDLAS. L'objectif de ces mesures préalables a été de vérifier le fonctionnement de ces instruments et de quantifier leurs précisions et leurs capacités à détecter les espèces chimiques recherchées. Des mesures intégrées ont été faites sur trois types de systèmes : un brûleur expérimental à flamme plate MacKenna, un banc cryogénique de combustion de méthane/air de l'ONERA appelé MASCOTTE et un banc de combustion de propergol solide de l'ONERA appelé CHAMADE. Les systèmes réalisant la combustion de mélanges

méthane/air ont permis la caractérisation du banc H₂O. Le banc de combustion de propergol a permis de caractériser les spectromètres CO, K et HCl.

1) Essais avec le banc H₂O

a) Mesures sur flamme plate MacKenna

La première étape de test du banc H₂O a été effectuée sur un brûleur expérimental à flamme plate MacKenna. Ce type de brûleur relativement simple fonctionne avec un mélange méthane/air. Les produits de cette combustion sont du H₂O et du CO₂. Il produit une flamme stable dans le temps et à symétrie cylindrique (Figure 29) pour des mélanges gazeux fournissant une richesse $\phi = 1$.

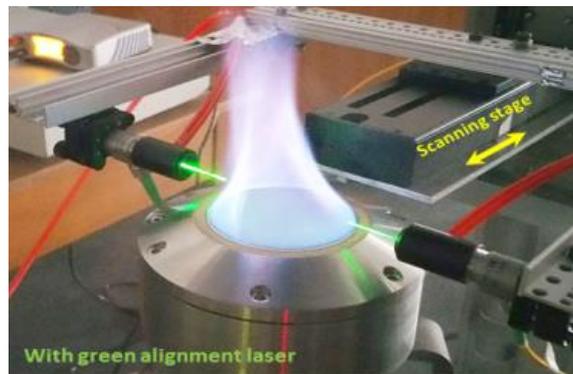


Figure 29 : Image du brûleur MacKenna lors de l'alignement du faisceau laser de TDLAS

La mesure consiste à acquérir un spectre d'absorption passant par le milieu de la flamme. Il est important de noter qu'avant et après avoir traversé la flamme, le faisceau traverse l'atmosphère sur une distance de 5 cm entre le collimateur émetteur et la flamme et sur 5 cm entre la flamme et le collimateur récepteur, soit une distance totale de 10 cm. Ainsi, il est nécessaire de tenir compte de cette longueur d'absorption dans l'inversion spectrale sachant que la contribution de la flamme est seulement intégrée sur une longueur de 6 cm. La longueur totale d'intégration est donc de 16 cm. Nous avons choisi d'enregistrer un spectre d'absorption avec la flamme éteinte pour mesurer l'effet du H₂O atmosphérique sur le spectre d'absorption final (Figure 30).

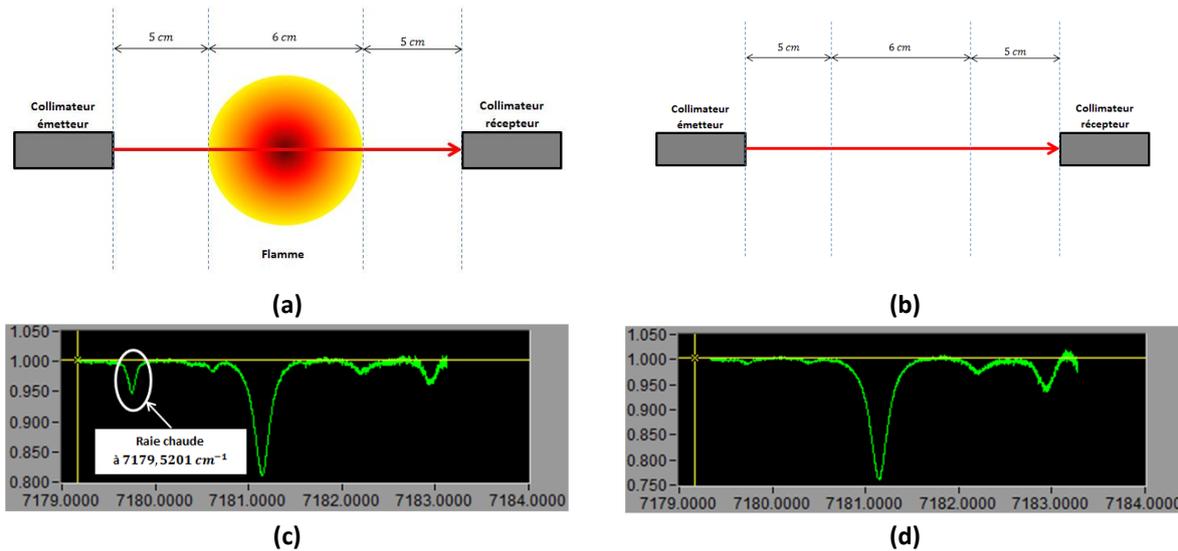


Figure 30 : Mesure de spectres d'absorption à travers la flamme MacKenna, (a) représentation de la mesure avec la flamme allumée et (b) avec flamme éteinte, (c) spectre acquis à travers la flamme allumée et (d) à travers la flamme éteinte

La Figure 30 montre que la plupart des raies d'absorption visibles dans la flamme sont également observées pour le trajet dans l'atmosphère hors flamme. Le changement le plus significatif entre ces deux spectres est l'apparition de la raie à $7179,75201 \text{ cm}^{-1}$ qui est une raie dite chaude très sensible à une forte température. Il est donc indispensable de quantifier l'effet de d'absorption dans l'atmosphère dans l'inversion spectrale. Les valeurs de pression, température et de concentration en H_2O dans l'atmosphère sont considérées égales à $P_{atm} = 760,0 \text{ torr}$, $T_{atm} = 300,0 \text{ K}$ et $X_{atm} = 1,0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. L'inversion du spectre prendra donc en compte l'effet de ces paramètres sur une longueur de 10 cm dans l'intégration du faisceau. La pression dans la flamme est considérée comme égale à la pression atmosphérique $P_{flamme} = 760,0 \text{ torr}$ compte tenu que la flamme n'est pas confinée dans une enceinte fermée.

Un calcul d'incertitude est également réalisé sur pour les valeurs données par l'inversion spectrale, selon le principe présenté en début de ce chapitre.

L'ajustement de courbes pour inverser le spectre en tenant compte de ces contraintes donne une valeur de concentration en H_2O de $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ avec une incertitude calculée de plus ou moins 2,2 % soit $6,6 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et une valeur de température de 1862 K avec une incertitude de plus ou moins 1,5 % soit 28 K . Le spectre mesuré et le spectre reconstruit sont représentés sur la Figure 31.

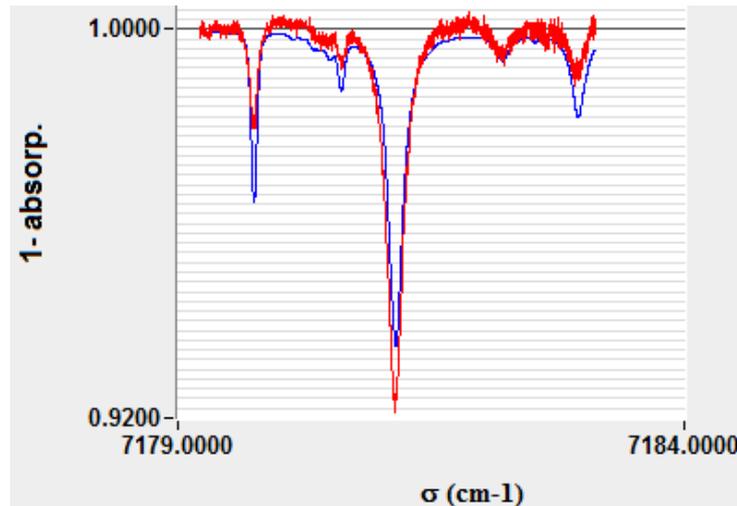


Figure 31 : Spectre d'absorption mesuré à travers la flamme (rouge) et spectre reconstruit (bleu)

La valeur de température reconstruite est en bon accord avec la température attendue au centre d'un brûleur MacKenna qui est environ de 2000 K pour la richesse $\phi = 1$ choisie. La valeur de concentration est en revanche trop faible. Cet écart vient probablement du fait que les valeurs estimées dans l'atmosphère ne correspondent pas parfaitement aux véritables valeurs dans les conditions de l'expérience. Pour pallier ce problème deux solutions peuvent être mises en œuvre.

La première technique consiste à réaliser l'inversion spectrale sur une partie du spectre uniquement autour de la raie chaude. De cette manière, la sensibilité de l'atmosphère serait diminuée et pourrait être retirée du spectre en traitant l'enveloppe de la même manière que sur la Figure 21. La seconde est une modification du montage expérimental. Elle consiste à purger le chemin optique de l'air ambiant en reliant la sortie des collimateurs à des tubes fermés et purgés à l'azote sec. De cette manière, l'eau présente dans l'air ambiant est retirée du chemin optique en dehors de la flamme. Faute de temps cette méthode n'a pas été mise en œuvre ici mais que lors des mesures qui ont suivi sur des bancs de combustion.

Ce premier essai a permis d'évaluer la qualité des mesures qu'il est possible de réaliser avec le banc H_2O sur des flammes à pression atmosphérique. Les résultats obtenus correspondent à ceux attendus. Nous avons cependant vu que l'impact des contributions de l'atmosphère est très important et qu'il modifie grandement le résultat de l'inversion spectrale. Ainsi, pour des mesures sur banc de combustion, il sera primordial d'utiliser les techniques permettant de s'affranchir des effets de l'atmosphère.

b) Mesures sur le banc de combustion MASCOTTE

Le banc H_2O a été utilisé sur le banc cryogénique de l'ONERA appelé MASCOTTE. Ces mesures ont été l'occasion de tester ce spectromètre dans des conditions expérimentales plus difficiles notamment avec des hublots et une flamme turbulente à haute pression. Ce banc de combustion est utilisé pour réaliser des études sur les mélanges utilisés en propulsion spatiale. La combustion pour ce type de moteurs est basée sur un mélange hydrogène/oxygène. Dans le cadre de la conception de nouveaux systèmes de propulsion, il est envisagé d'utiliser le méthane comme carburant à la place de l'hydrogène. Sa forte densité permet d'utiliser des réservoirs de moins grande envergure et sa température de liquéfaction étant plus élevée que celle de l'hydrogène, sa mise en œuvre nécessite moins d'énergie au niveau de son conditionnement cryogénique. Dans le cadre des mesures réalisées au cours de la thèse l'étude portait sur un mélange LOX/ CH_4 qu'il est envisagé d'utiliser dans le moteur PROMETHEUS de la fusée Ariane. La combustion de ce type de mélanges n'est actuellement pas connue précisément notamment dans les simulations numériques. La caractérisation des produits de combustion et notamment de la molécule H_2O , de la pression et la température dans le jet sont des données qui permettraient d'optimiser les calculs numériques modélisant ce phénomène. La méthode par TDLAS a été choisie pour mesurer ces données et le spectromètre H_2O a donc été mis en œuvre sur ce banc de combustion.

L'objectif de ces essais a été de mesurer la concentration en H_2O , la pression et la température en fonction du temps au cours de la combustion lorsque le faisceau traverse la zone de recirculation située au-dessus de la flamme (Figure 32).

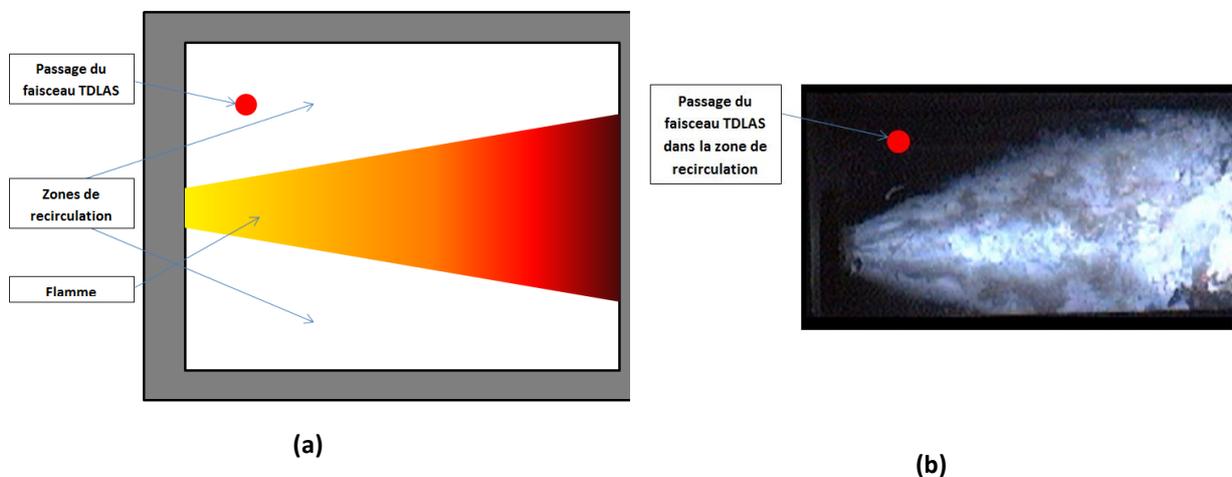


Figure 32 : Représentation de la mesure par TDLAS (a) schéma de la flamme et de la zone de recirculation étudié, (b) image de la flamme et point de passage du faisceau laser

La mesure de la concentration en H_2O informe sur la qualité de la combustion et la mesure de pression et de température permet une comparaison avec les valeurs prédites par les calculs et avec les valeurs données par les thermocouples et les capteurs de pression de la veine d'essai.

Pour ces essais, le spectromètre H_2O était placé dans une pièce voisine de celle où se situe le banc de combustion et le signal était envoyé dans la veine d'essai et récupéré avec des fibres optiques reliées à des collimateurs. Le faisceau traverse des hublots transparents dans le domaine infrarouge du laser et la veine était purgée à l'azote à haute pression. Le H_2O mesuré dans l'enceinte était donc uniquement celui mesuré dans la flamme. Cependant, le faisceau traversait une portion d'atmosphère avant et après la veine d'essai, ce qui produisait une raie d'absorption intense sur le spectre avant la combustion (Figure 33).

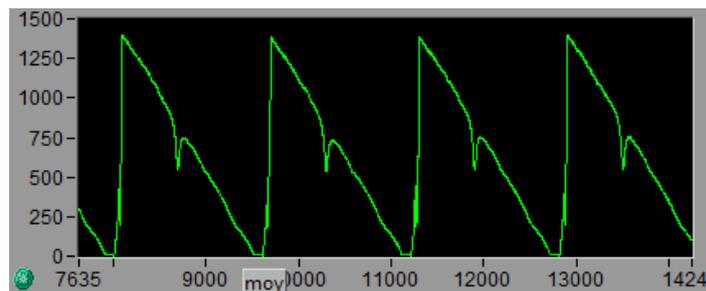


Figure 33 : Série de spectre d'absorption acquis avant l'allumage de la flamme sur lesquels la contribution de l'atmosphère est visible sous la forme d'une forte raie d'absorption de H_2O

Nous avons donc ajouté des tuyaux entre la sortie des collimateurs et les hublots qui sont en permanence purgés à l'azote pour éliminer l'air ambiant et la contribution qu'il ajoutait sur le spectre de H_2O mesuré (Figure 34).

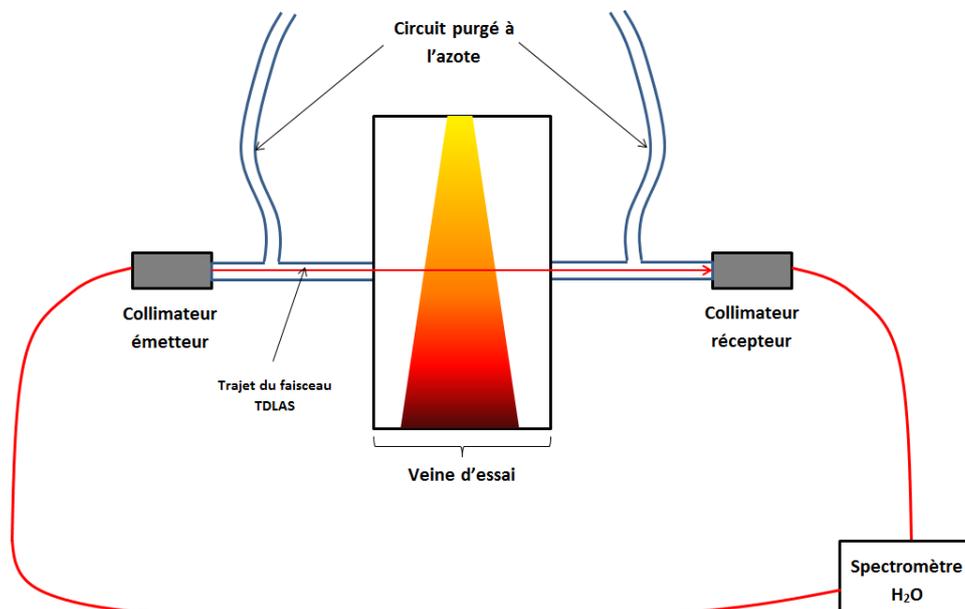


Figure 34 : Schéma du dispositif expérimental mis en place sur le banc MASCOTTE

De cette manière, il est possible de s'affranchir complètement du signal provenant du H₂O atmosphérique. Il est donc possible de faire une inversion spectrale ne tenant compte que de la longueur d'intégration du faisceau dans la veine d'essai. Comme le montre la Figure 35, lorsque la purge d'azote est effectuée dans les tuyaux entre les collimateurs et les hublots, la raie de H₂O atmosphérique est atténuée et elle disparaît complètement lorsque la purge d'azote est effectuée dans la veine d'essai avant l'allumage.

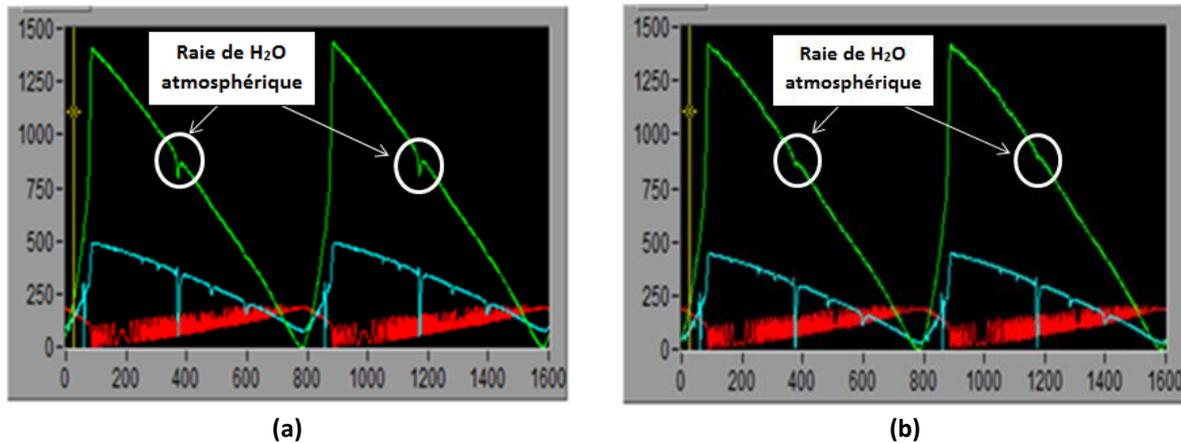


Figure 35 : Atténuation de la raie de H₂O atmosphérique (a) après de la purge à l'azote entre les collimateurs et les hublots et (b) après la purge à l'azote dans la veine d'essais

L'acquisition est composée d'une série de 125 spectres à une cadence de 12,5 kHz sur une durée de 10 ms toute les secondes pendant la durée totale de la combustion de 120 s. Cette cadence permettait d'acquérir un grand nombre de spectres tout au long de la combustion pour observer l'évolution des grandeurs mesurées en fonction du temps, mais également d'obtenir une série de spectres qu'il était possible de moyenner pour limiter l'effet de la déformation des spectres à cause des turbulences dans la chambre. Une de série de spectres acquis est représentée sur la Figure 36 à titre d'exemple.

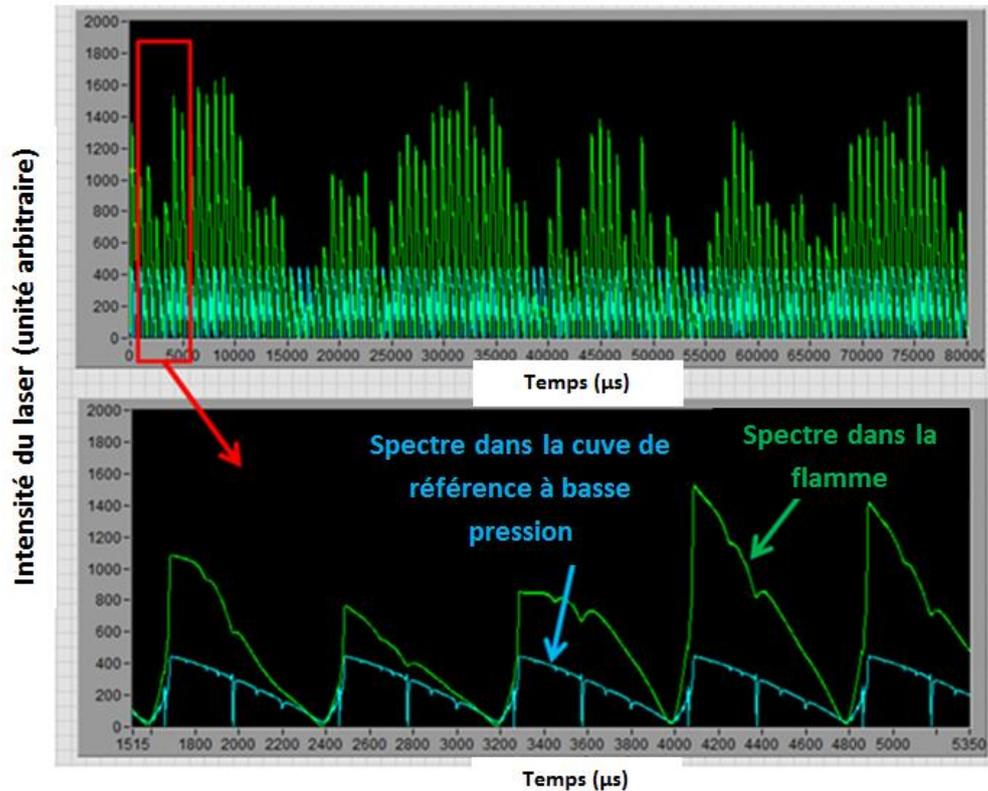
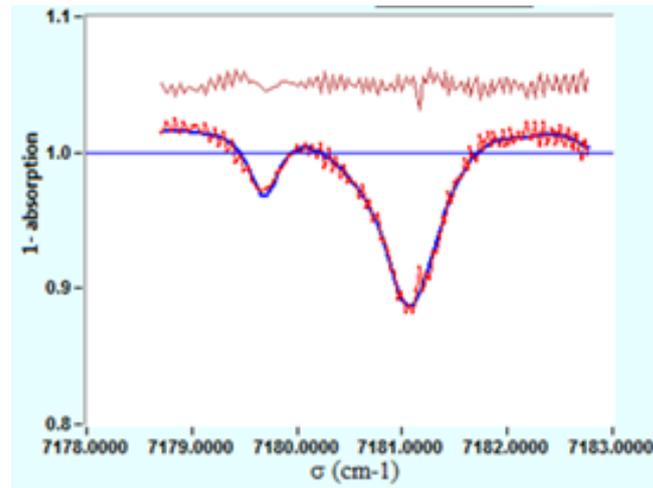
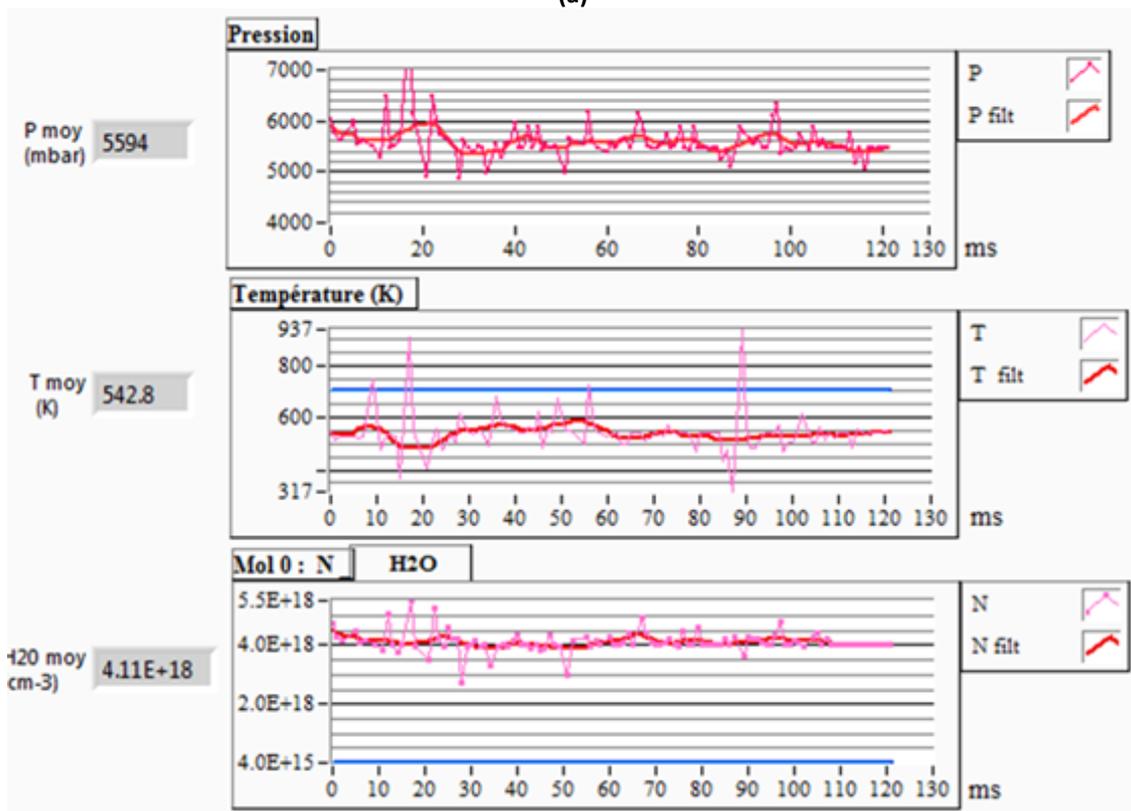


Figure 36 : Exemple de série de spectres d'absorption acquis au cours de la combustion sur le banc MASCOTTE

La flamme étant turbulente, des fluctuations de la forme du signal optique sont visibles sur les spectres acquis. Cet effet est atténué par l'utilisation de la cadence d'acquisition élevée de $12,5 \text{ kHz}$. Par la suite, les déformations persistantes peuvent être supprimées en utilisant une méthode de reconstitution d'enveloppe. Sur l'ensemble des spectres acquis, on observe seulement deux raies visibles et persistantes d'un spectre à l'autre. L'inversion spectrale est donc effectuée uniquement sur ces deux raies d'absorption. La Figure 37 montre un exemple de spectre reconstruit ainsi que les résultats de reconstruction de concentration H_2O , de pression et de température sur une série de 125 spectres.



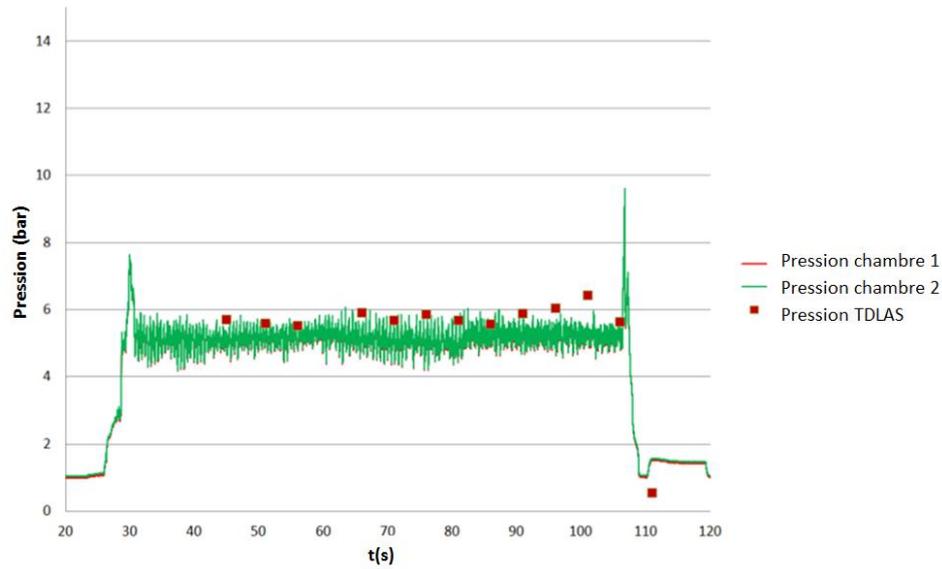
(a)



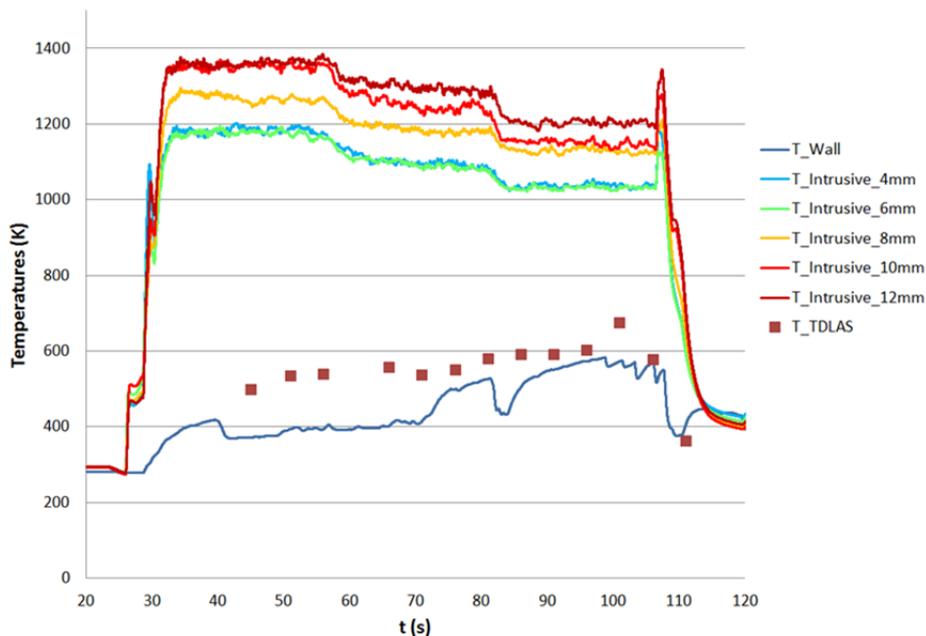
(b)

Figure 37 : Résultats d'inversion spectrale, (a) exemple de spectre inversé donnant des valeurs $X_{H_2O} = 4,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ avec une incertitude de plus ou moins 2 %, $P = 5956 \text{ mbar}$ avec une incertitude de plus ou moins 2,4 % et $T = 549 \text{ K}$ avec une erreur de 3,4 %, (b) évolution de la concentration en H_2O , de la pression et de la température sur une série de 125 spectres avec les valeurs moyennes associées à ces mesures

Chaque moyenne réalisée sur 125 spectres consécutifs acquis toute les secondes a été utilisée pour tracer l'évolution de la pression et de la température au cours de l'essai de combustion. Malgré certains écarts, ces courbes sont proches des valeurs mesurées dans la veine par les thermocouples et capteurs de pression et elles suivent la même évolution au cours de l'essai [62]. Des exemples de ces courbes sont représentés sur la Figure 38.



(a)



(b)

Figure 38 : Comparaison de mesures (a) de pression acquise avec la TDLAS et avec des capteurs de pression situés à deux positions dans la chambre et (b) de température acquise avec la TDLAS et acquise avec des thermocouples placés à plusieurs positions à la paroi le long de l'écoulement

2) Application de la TDLAS à la caractérisation du propergol solide : mesures sur le banc Chamade

Parmi les applications envisagées pour le banc de tomographie par TDLAS développé au cours de la thèse se trouve sa mise en œuvre sur des bancs de combustion de propergol solide [63] de grande envergure. Les espèces à caractériser sont le monoxyde de carbone

CO, l'acide chlorhydrique HCl et le potassium K. Cependant, le comportement d'un spectre d'absorption à travers ce type de flamme est inconnu et il est nécessaire, avant de réaliser des mesures par TDLAT, de caractériser l'absorption des flammes de propergol par des mesures intégrées de TDLAS. Pour cela, plusieurs campagnes de mesures ont été effectuées sur un banc de combustion de l'ONERA appelé CHAMADE. Ce banc est constitué d'une chambre équipée de hublot dans laquelle est placé un petit échantillon de propergol dont la taille est de l'ordre de 5 mm (Figure 39) qui brûle à des pressions supérieures à la pression atmosphérique jusqu'à une dizaine de bars.



Figure 39 : Image du banc de combustion CHAMADE avec un échantillon de propergol

Les hublots de l'enceinte sont en CaF₂ et donc transparents dans l'infrarouge permettant le passage du faisceau laser autour de 5 μm pour le sondage de CO. Une fourche en métal dont les branches sont placées de chaque côté de la chambre maintiennent en position les collimateurs off-axis faisant traverser le faisceau laser dans la flamme au-dessus de l'échantillon brûlé. Lorsque l'enceinte est mise sous pression, un laser CO₂ est utilisé pour chauffer l'échantillon et déclencher son allumage. Ce laser arrive par le haut de la chambre à travers un hublot (Figure 40).

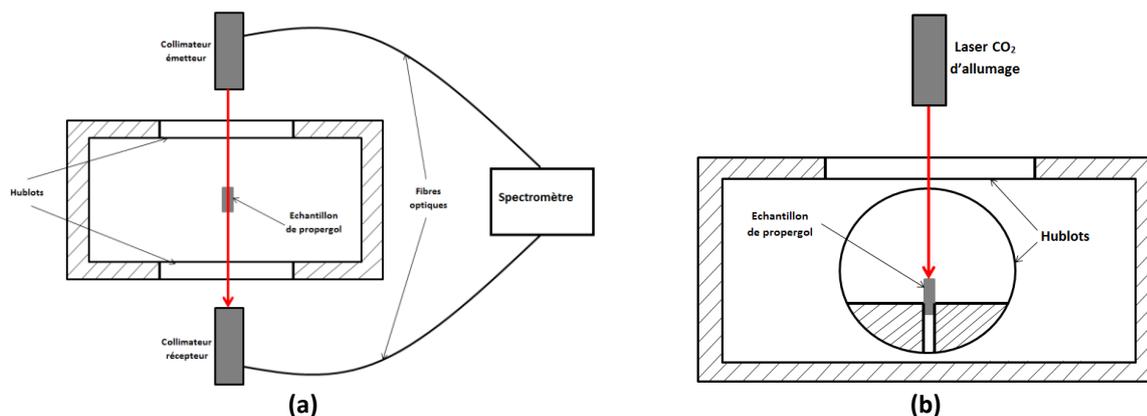


Figure 40 : Représentation schématique du banc de combustion CHAMADE (a) vue en coupe de dessus représentant l'échantillon et le système de mesures par TDALS et (b) vue en coupe de côté représentant l'échantillon et le laser d'allumage

Un inhibiteur en PBHT est placé sur toutes les faces de l'échantillon sauf sur la face supérieure qui doit brûler. De cette manière la flamme se développe sur la face supérieure de l'échantillon et celui-ci brûle de haut en bas sur une durée d'environ 2 secondes. Les faisceaux lasers de mesures passent au-dessus de l'échantillon, ils rasant le haut du propergol au début de la combustion et étant donné que l'échantillon diminue en taille lorsqu'il se consume, le faisceau balaye toute la hauteur de la flamme au cours de la combustion (Figure 41).

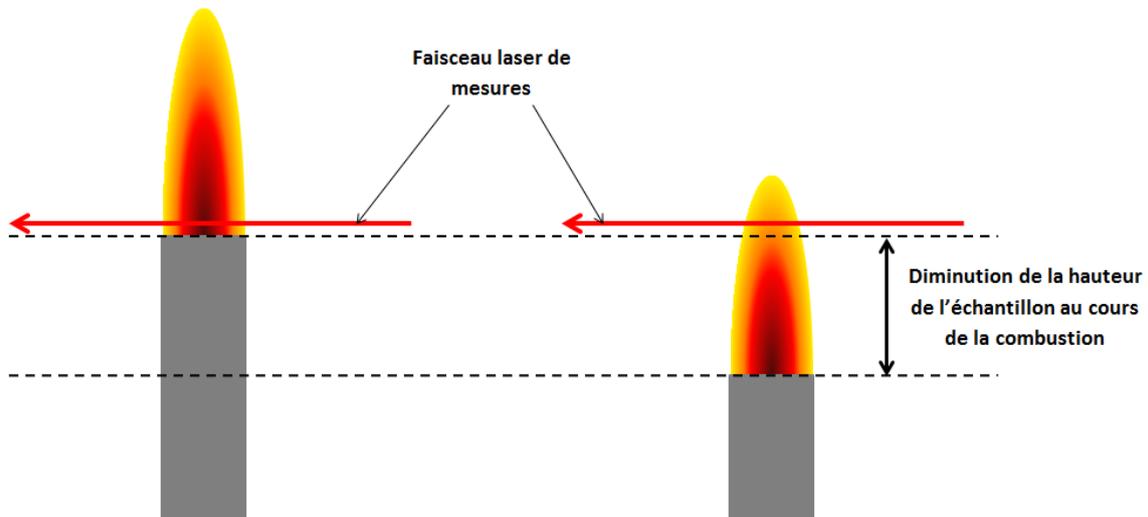


Figure 41 : Représentation de la variation de la hauteur de la flamme au cours de la combustion

Le phénomène observé étant rapide, il a été choisi de faire les mesures selon une séquence d'acquisition à haute cadence. La mesure est faite en continu sur une durée de 5 secondes à une cadence d'acquisition de spectres de 1 kHz , ce qui constitue un total de 5000 spectres acquis lors d'un essai. L'acquisition des spectres est lancée 2 secondes avant l'allumage de la flamme par le laser CO_2 afin de s'assurer d'observer l'ensemble de la combustion lors d'un essai.

a) Caractérisation du CO

La première espèce chimique caractérisée dans le propergol a été le monoxyde de carbone CO. Il s'agit d'une espèce gazeuse produite en grande quantité dans le propergol permettant d'espérer l'obtention des raies d'absorption intenses facilement détectables par le spectromètre développé. Le spectre mesuré à travers la cuve de référence et les deux spectres de références sont représentés sur la Figure 42.

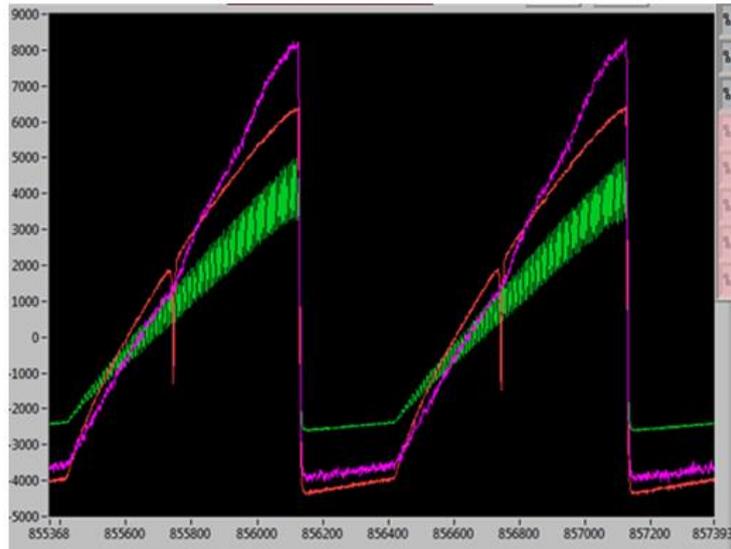


Figure 42 : Spectres utilisés pour la mesure de TDLAS du CO, voie de mesure traversant la chambre sans flamme (violet), voie de référence dans la cuve de CO à basse pression (rouge) et voie de référence acquise à travers la cavité de Fabry-Pérot (vert)

L'intervalle spectral est centré sur la raie à $2179,7719 \text{ cm}^{-1}$ qui est parfaitement visible sur la courbe à basse pression acquise dans la cuve de référence. L'ensemble des spectres mesurés au cours de l'essai est représenté sur la Figure 43.

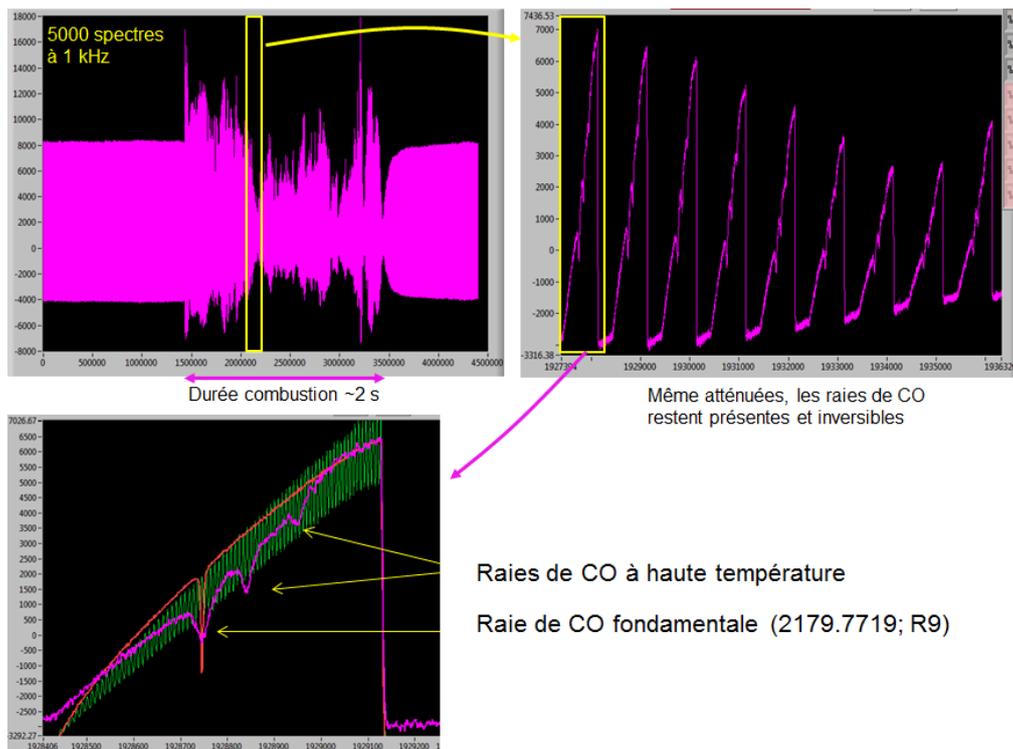


Figure 43 : Série de spectres d'absorption acquis au cours de l'essai complet

On observe sur la Figure 43, l'évolution des spectres d'absorption traversant la chambre au cours de l'essai complet. Pendant environ 1,5 secondes après le début de l'acquisition, le

signal reste inchangé car la flamme n'est pas encore allumée. A partir de l'instant d'allumage, on observe les effets de la flamme par l'apparition de turbulences qui atténuent l'intensité des spectres et leur forme mais présentant la raie d'absorption fondamentale du CO et deux autres raies dont une sera identifiés comme une raie de CO à haute température. Malgré les déformations de l'enveloppe des spectres et les atténuations, les raies d'absorption sont exploitables pour faire une série d'inversion spectrale en fonction du temps. En ce qui concerne l'enveloppe du spectre, les effets des déformations sont traités par la même méthode que pour les mesures H₂O, c'est-à-dire par une méthode de découpage des raies et d'interpolation de l'enveloppe. L'inversion spectrale a été faite sur la raie fondamentale et la raie chaude située à proximité. Un exemple d'inversion spectrale est représenté sur la Figure 44.

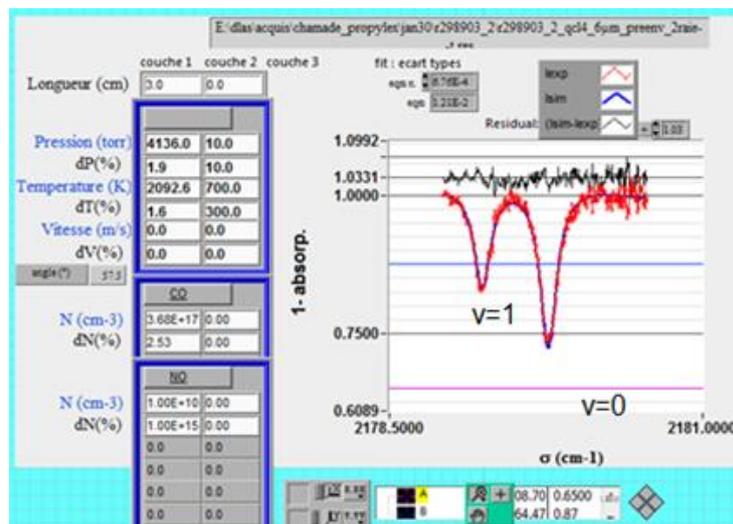


Figure 44 : Exemple de spectre d'absorption de CO inversé avec les raies fondamentales et à haute température donnant des résultats de concentration $X_{CO} = 3,68 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, de pression $P = 4136,0 \text{ torr}$ et de température $T = 2092,6 \text{ K}$

La Figure 44 montre que les mesures sont exploitables pour obtenir des valeurs de concentration en CO, de pression et de température intégrées dans la flamme. En répétant cette opération de traitement d'enveloppe et d'inversion spectrale sur tous les spectres acquis au cours de l'essai, il est possible de récupérer des courbes d'évolution de concentration en CO, pression et température au cours de toute la durée de la combustion (Figure 45).

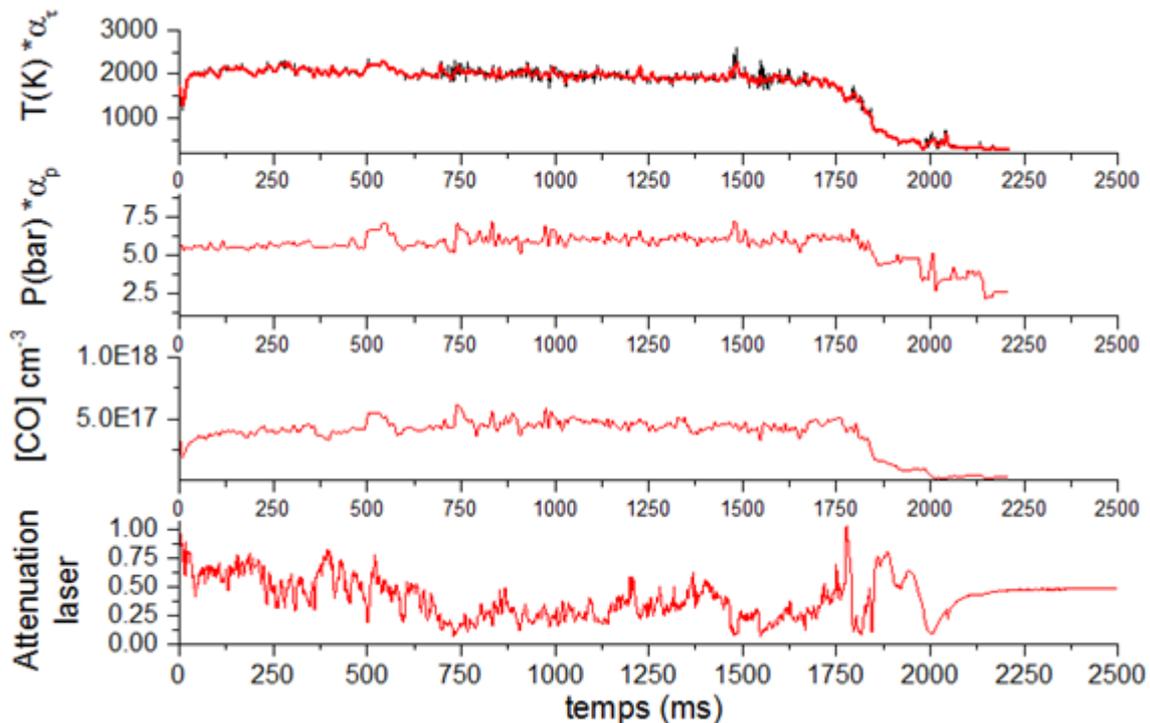


Figure 45 : Evolution de la concentration en CO, de la pression, de la température et de l'atténuation du laser en fonction du temps au cours de la combustion d'un échantillon de propegol solide

Au cours d'un autre essai, une autre courbe représentant l'évolution de la pression au cours de la combustion a également été tracée et comparée avec une mesure de pression effectuée dans la chambre avec un capteur de pression. Ces courbes sont représentées sur la Figure 46 et présentent la même allure d'évolution temporelle. Cependant, en valeur absolue, un écart de valeur de l'ordre de 0,5 bar est présent. L'hypothèse la plus probable pour justifier cet écart est la valeur du γ_{lor} utilisée. En effet, dans toutes les mesures réalisées nous avons utilisé un γ_{lor} donné par HITRAN correspondant au coefficient d'élargissement de la raie dans l'air à pression ambiante. Or, les collisions dans la flamme ne sont pas les mêmes que dans l'air et la pression est bien plus élevée. Une amélioration de ces résultats pourrait donc être faite en calculant un γ_{flamme} tenant compte de ces paramètres.

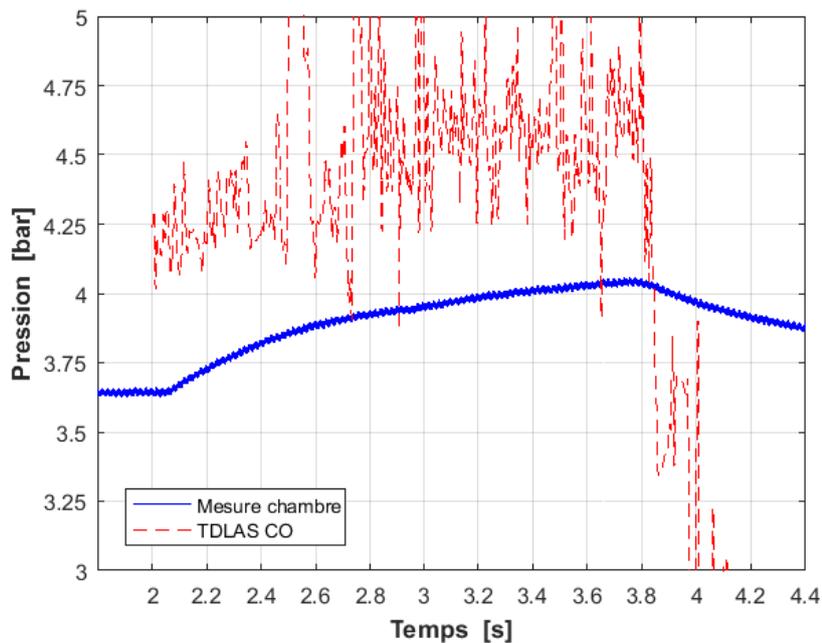


Figure 46 : Evolution de la pression mesurée par TDLAS (courbe rouge) et par un capteur de pression (courbe bleue) au cours de la combustion du propergol

Le tracé de ces courbes sur la Figure 46 a montré que la concentration en CO correspond à ce qui est attendu dans la combustion de ce type d'échantillons de propergol. En ce qui concerne la température, il est possible d'observer la montée en température lors de l'allumage et la redescente lorsque la flamme s'éteint, ainsi que le palier de 2000 K lors de la combustion correspond également aux valeurs attendues pour ce type d'essais.

b) Caractérisation du HCl

Des acquisitions de spectres ont également été réalisées sur le banc CHAMADE avec le spectromètre caractérisant l'acide chlorhydrique HCl. Le protocole et le dispositif expérimental sont identiques à ceux suivis pour la mesure du CO. Dans le cas du HCl, la difficulté principale rencontrée est le fait que les deux raies d'absorption qui sont théoriquement visibles sur l'intervalle balayé par la diode sont très faibles. Ce qui a pu être constaté dans les spectres acquis à travers la cuve de référence à basse pression. Seule la raie la plus intense à $1,7217 \mu\text{m}$ a pu être observée. La mesure était donc effectuée sur un intervalle entourant cette raie. De plus, sa faible intensité la rendait parfois trop difficile à exploiter. Ainsi, au cours des essais, la référence absolue utilisée pour calibrer l'axe des longueurs d'onde était effectuée avec la raie acquise dans la flamme directement. Cette opération était rendue possible par le fait que cette raie était la seule observable sur l'intervalle étudié. Le reste de la calibration a été effectué de la même manière qu'avec les autres spectromètres en utilisant le signal de la cavité de Fabry-Pérot. De nombreux essais

ont été réalisés, en revanche, la raie d'absorption n'a été observée que très rarement sur les séries de spectres acquis lors d'une combustion (Figure 47).

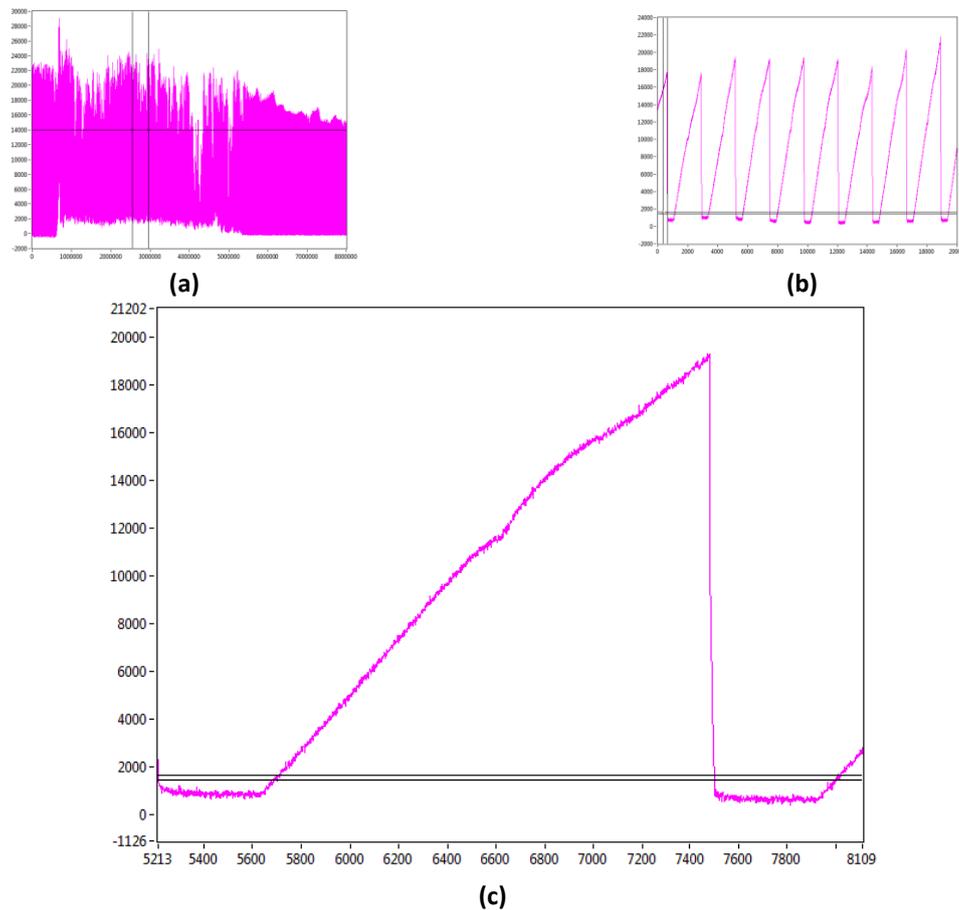


Figure 47 : Exemple de série de spectres du HCl acquis au cours de la combustion d'un échantillon de propergol solide, (a) série complète de spectres, (b) zoom sur 9 spectres au milieu de la combustion et (c) zoom sur un seul spectre

La diode laser utilisée dans ce spectromètre a été choisie afin de mesurer des ordres de grandeurs de concentrations prédites par des simulations de la combustion du propergol. Le fait que la raie soit si faible peut s'expliquer par le fait que la concentration réelle dans la flamme de propergol est beaucoup plus faible que celle attendue et que la raie que l'on utilise n'est pas assez sensible pour des concentrations aussi faibles sur une aussi petite longueur d'intégration. L'utilisation d'un autre intervalle spectral plus approprié pour de faibles concentrations serait donc à envisager. De plus, comme il est possible de le voir sur la Figure 47, la raie est très faible, ce qui peut la rendre difficilement exploitable. Ainsi, dans les cas des mesures sur ces petits échantillons, nous n'avons pas pu réaliser d'inversion spectrale pour mesurer la concentration en HCl. Ces mesures ont néanmoins permis de vérifier que le spectromètre était capable de voir les raies d'absorption de cette espèce. Des mesures sur des flammes plus grande taille permettraient probablement d'obtenir des raies plus intenses et exploitables.

c) Caractérisation du potassium K

Dans le cas du potassium, le même type de difficulté que pour le HCl a été rencontré. Le dispositif et le protocole expérimental sont également les mêmes. Au cours d'un essai, le signal est perturbé tout comme pour la série de spectres du CO mais la raie d'absorption du potassium n'est présente que sur certains spectres (Figure 48) montrant que la présence de K n'est pas régulière tout au long de la combustion de l'échantillon.

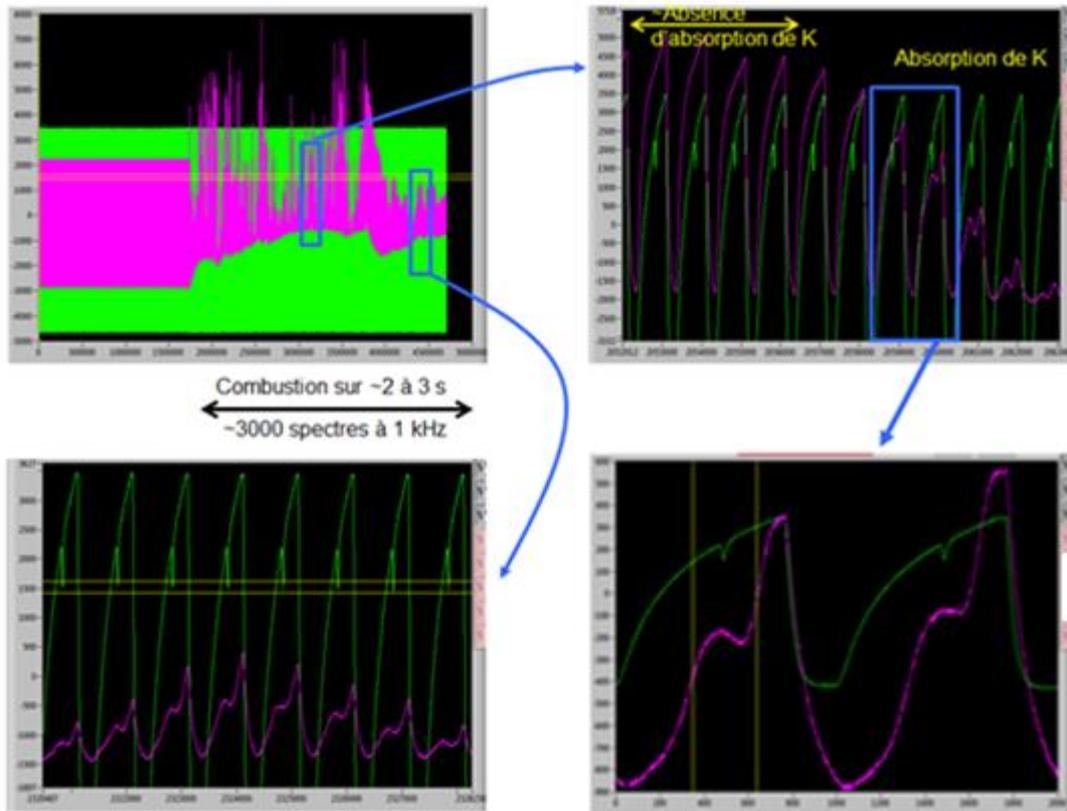


Figure 48 : Exemple de série de spectres d'absorption du potassium K au cours d'essai sur CHAMADE

Sur les spectres où la raie du potassium a pu être observée, on remarque que la raie est relativement intense mais aussi qu'elle est très élargie et décalée par rapport à sa position de référence. Ce qui peut s'expliquer par la pression très importante dans la chambre au moment de la combustion.

Ainsi, que ce soit pour le potassium ou le HCl, ces essais montrent que pour caractériser de manière quantitative ces deux espèces, il est nécessaire d'augmenter la sensibilité de détection. Une solution possible est de faire des mesures sur des flammes de plus grandes dimensions pour augmenter la longueur d'intégration. Par ailleurs, il est probable que ces deux espèces sont présentes dans la flamme mais de manière discontinue tant sur le plan spatial que temporel. Des mesures par tomographie permettraient peut-être d'observer plus

précisément ce phénomène et de quantifier plus précisément la concentration de ces espèces chimiques.

V) Conclusion sur les essais TDLAS et extension vers la TDLAT

Les essais réalisés en TDLAS ont permis une première mise en œuvre des spectromètres développés. Ils ont tout d'abord permis d'obtenir des valeurs de concentration, pression et température intégrées qui donnent un premier ordre de grandeur des valeurs à retrouver par tomographie dans les flammes étudiées. Cependant, ces essais ont surtout permis de connaître les performances et incertitudes que peuvent présenter les mesures par TDLAS de chaque spectromètre ainsi que les contraintes expérimentales qui doivent être prises en compte dans le système de mesure et dans l'algorithme de reconstruction tomographique conduisant à la TDLAT.

Chapitre 3 : Mise en œuvre d'un banc de TDLAS multi-espèces sur un banc de combustion de propergol solide

Ce chapitre porte sur une implémentation simultanée des spectromètres balayant les raies de CO, du potassium et de HCl sur un propulseur à propergol solide. Un effort important est actuellement entrepris par plusieurs équipes au niveau mondial afin de simuler numériquement la combustion de ce type de flamme. Cependant ces simulations dépendent de données d'entrée difficiles à connaître, en particulier les grandeurs thermodynamiques telles que pression, température et vitesse dans le jet mais également les concentrations des espèces chimiques. Des études expérimentales doivent donc être conduites pour nourrir les modèles de simulations de données d'entrée et vérifier leurs prédictions en sortie. Des mesures à sondes classiques peuvent fournir des informations sur la pression et la température, mais perturbent toujours très sensiblement l'écoulement réactif. Pour mesurer la forme quantitative des profils de pression, température et concentration des espèces, des techniques de mesures non-intrusives comme la TDLAS sont nécessaires. Dans ce cadre, une campagne d'essai organisée à l'ONERA autour d'un banc de combustion de propergol solide a eu pour objectif de réaliser des mesures de pression, température et concentrations chimiques par TDLAS. Ces essais ont été pour nous l'occasion de mettre en œuvre un dispositif de balayage spatial permettant de faire l'acquisition de spectres d'absorption à plusieurs positions et angles autour du jet. L'idée est d'obtenir l'évolution spatiale des grandeurs physiques recherchées sachant que les mesures sont faites sur des jets hétérogènes et turbulents. Ce chapitre présente le dispositif expérimental mis en œuvre sur le banc de combustion avec la description des spectromètres TDLAS utilisés, du système de balayage spatial et de la configuration des rayons de mesures imposée par la nature du jet étudié. Nous présentons enfin les résultats des mesures obtenus qui sont comparés aux simulations numériques. Pour des raisons de confidentialité, aucune grandeur numérique sur les résultats ou sur les caractéristiques du moteur ne sont présentées. Tous les schémas et graphiques sont présentés sans dimensions ni unités de mesures mais avec seulement des valeurs normalisées.

I) Objectifs de la campagne de mesures

1) Présentation du banc de combustion et des contraintes expérimentales

Le banc de combustion sur lequel sont faites les mesures est un moteur de propergol solide. Ce banc permet de créer un jet issu de la combustion de propergol solide et d'étudier sa composition dans des conditions thermodynamiques proches des simulations numériques. La Figure 49 montre une représentation schématique du propulseur et du jet (l'échelle n'est pas respectée).

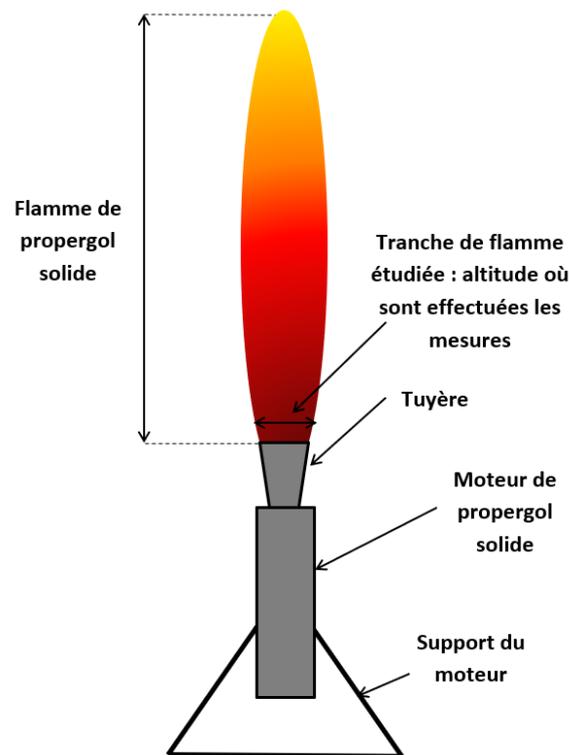


Figure 49 : Représentation schématique de la flamme de propergol solide produite par le moteur étudié

De nombreux modèles essaient de reproduire le comportement thermodynamique de ce type de flamme. Il s'agit d'un jet cylindrique, à la sortie de la tuyère, qui a ensuite un comportement turbulent plus haut dans la flamme. L'étude portera sur une hauteur de flamme à quelques centimètres de la sortie de la tuyère pour obtenir des mesures avant la post-combustion.

Réaliser les mesures TDLAS à cette altitude simplifiera l'analyse pour des raisons liées à la nature du jet et à nos contraintes expérimentales :

- Dans cette zone, la simulation est moins sujette à des incertitudes et des hypothèses non vérifiées que dans le reste de la flamme, ce qui permettra de la comparer plus

facilement avec les mesures. Plus l'altitude dans le jet est élevée plus la flamme est turbulente. Cette zone est donc relativement stable par rapport au reste du jet.

- Les conditions thermodynamiques prédites par la simulation à cette hauteur sont également favorables aux mesures d'absorption ; en particulier, les raies de CO et HCl ne devraient pas être saturées la plupart du temps.
- Cette hauteur de mesure permet d'installer et de faire les différents réglages et alignement optique facilement et de manière reproductible autour du moteur dans les conditions de sécurité de la zone pyrotechnique.

A partir de ces différents besoins et contraintes expérimentale, une configuration de mesures a été mise en place pour les différents spectromètres TDLAS.

2) Objectifs des mesures par TDLAS

Les objectifs des mesures TDLAS sur cette installation sont de :

- Réaliser des mesures de pression et de température à partir des spectres d'absorption du monoxyde de carbone CO.
- Mesurer la concentration sous forme neutre du potassium atomique qui est un métal alcalin présent normalement sous forme de trace dans le propergol.
- Mesurer la concentration de l'acide chlorhydrique HCl qui est une espèce chimique présente en abondance dans la flamme de propergol.

De plus, dans le cadre de cette campagne d'essai, on a choisi d'acquérir les spectres d'absorption à plusieurs angles et positions autour de la flamme. Cette opération sera effectuée avec un système de balayage par rotation qui présente des intérêts multiples.

Le premier est de faire varier la longueur d'intégration des faisceaux lasers dans la flamme. En effet, la concentration des espèces prédites par les simulations entraîne une saturation des raies dans le cas du potassium et dans le cas du CO lorsque le laser passe au centre du jet comme on peut le voir Figure 50. Même si la tranche de flamme étudiée est à une altitude où son diamètre est le plus faible, la longueur d'intégration reste importante et avant un premier essai, il n'est pas possible d'être certain que l'absorption ne sera pas saturante au centre de la flamme ou encore dans le cas contraire insuffisante si le faisceau passe au bord de la flamme.

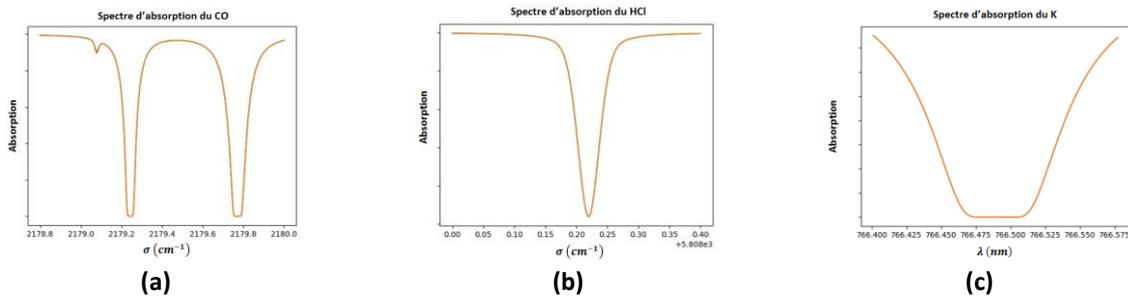


Figure 50 : Exemples de spectres d'absorption (a) du CO, (b) du HCl et (c) du K simulés pour un faisceau passant par le centre du jet sur lesquels on observe les phénomènes de saturation de raies

Ainsi, faire varier la position et l'angle des faisceaux de mesures autour du jet permettra de faire varier la longueur d'intégration pendant l'essai et donc d'éviter de complètement saturer ou de ne pas observer de raie d'absorption sur tous les spectres.

Le second intérêt vise à obtenir une première exploration spatiale des mesures. Le fait de scanner le jet selon plusieurs angles et positions différentes peut permettre de remonter à des profils de concentration, pression et température en fonction de la trajectoire des faisceaux à travers le jet. Chaque spectre à chaque position et angle autour de la flamme peut également être calculé à partir des distributions spatiales simulées du jet. Ainsi, les valeurs intégrées des paramètres thermodynamiques simulées et expérimentaux pourront être comparées.

Ces essais vont donc nécessiter l'utilisation des spectromètres sensibles au CO, au K et au HCl et dont les faisceaux lasers seront envoyés dans la flamme par un système mécanique les mettant en rotation autour du jet.

3) Description du système expérimental

Le moteur qui fait l'objet de notre étude présente des contraintes expérimentales dont il a fallu tenir compte pour la mise en œuvre du système de mesures.

Tout d'abord, les spectromètres balayant les raies de CO, de K et de HCl sont placés dans une baie de mesures installée dans une remorque protectrice située à environ 5 mètres du propulseur. Les faisceaux lasers sont acheminés de la baie jusqu'au moteur et en sens inverse par des fibres optiques reliées à des collimateurs, émettant et collectant le signal, disposés autour du jet. L'ensemble du système est piloté à distance par des ordinateurs placés dans la salle de commande du propulseur.

Les collimateurs optiques d'émission et de réception sont placés sur une couronne métallique mise en rotation autour du jet par un moteur électrique également piloté à distance. Cette couronne met en rotation 5 faisceaux de mesures : 1 faisceau pour le CO, 2

faisceaux pour le potassium et 2 faisceaux pour le HCl. Il a été choisi de ne pas diviser le signal des spectromètres K et HCl en plus de deux faisceaux pour ne pas trop diminuer la puissance optique. Pour ce qui est du CO, nous n'avons pas pu séparer le signal en plusieurs faisceaux en raison du manque de fibres optiques nécessaires pour acheminer le signal jusqu'à la flamme.

La couronne est excentrée par rapport à l'axe du jet de manière à multiplier le nombre de faisceau de mesures tout en faisant varier la longueur d'intégration de chacun de ces faisceaux (Figure 51).

La rotation de la couronne est limitée à une amplitude angulaire de 90° autour de l'axe du jet pour éviter les tensions sur les fibres optiques qui ne sont pas assez longues pour supporter des rotations plus importantes.

La disposition des faisceaux laser sur la couronne sont choisies pour que pendant une rotation chaque faisceau traverse consécutivement le centre et le bord de la flamme. De plus, dans le cas du potassium et du HCl, les faisceaux sont positionnés de telle sorte que l'ensemble des scans des faisceaux couvrent le plus de surface possible sur la tranche de jet.

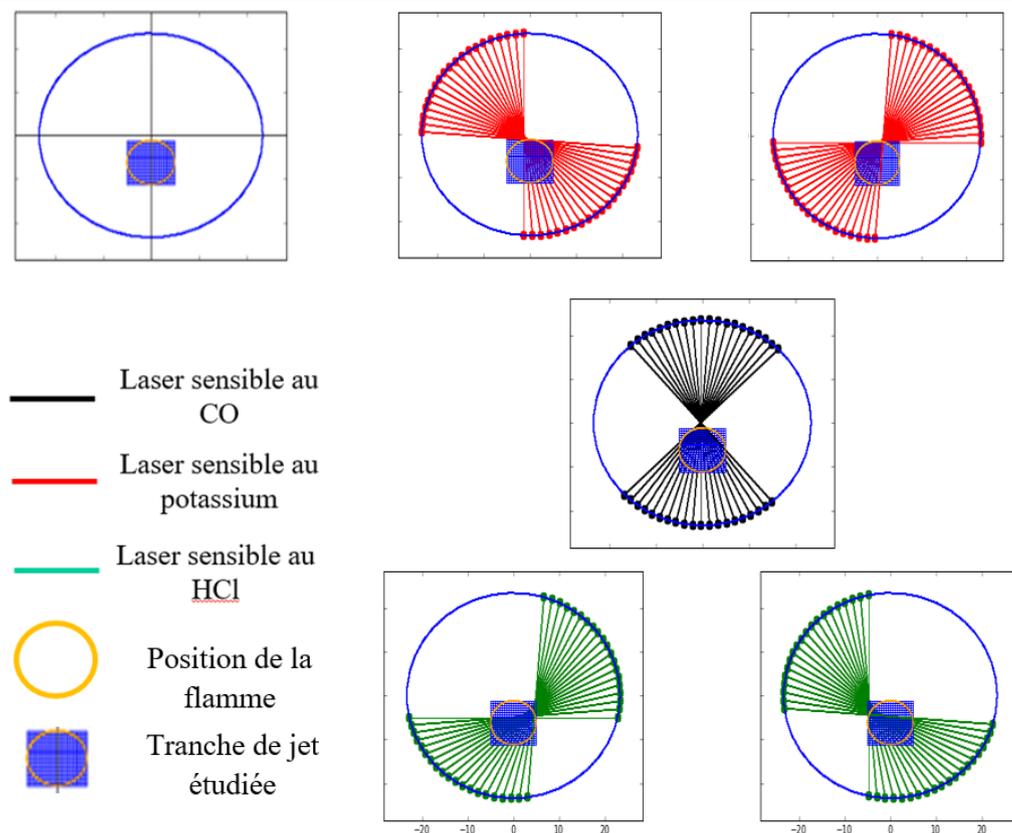


Figure 51 : Configuration des faisceaux de mesures de chaque rayon autour de la flamme

La couronne est mise en rotation par un moteur électrique pas à pas. La durée minimum pour une rotation de 90° est de 2,15 secondes. Etant donné que la durée totale de la

combustion du propergol est de 4 secondes, cette durée de rotation est suffisante pour que toute la zone balayée par les faisceaux soit couverte pendant la combustion. Le système de scan complet est schématisé et représenté en image sur la Figure 52.

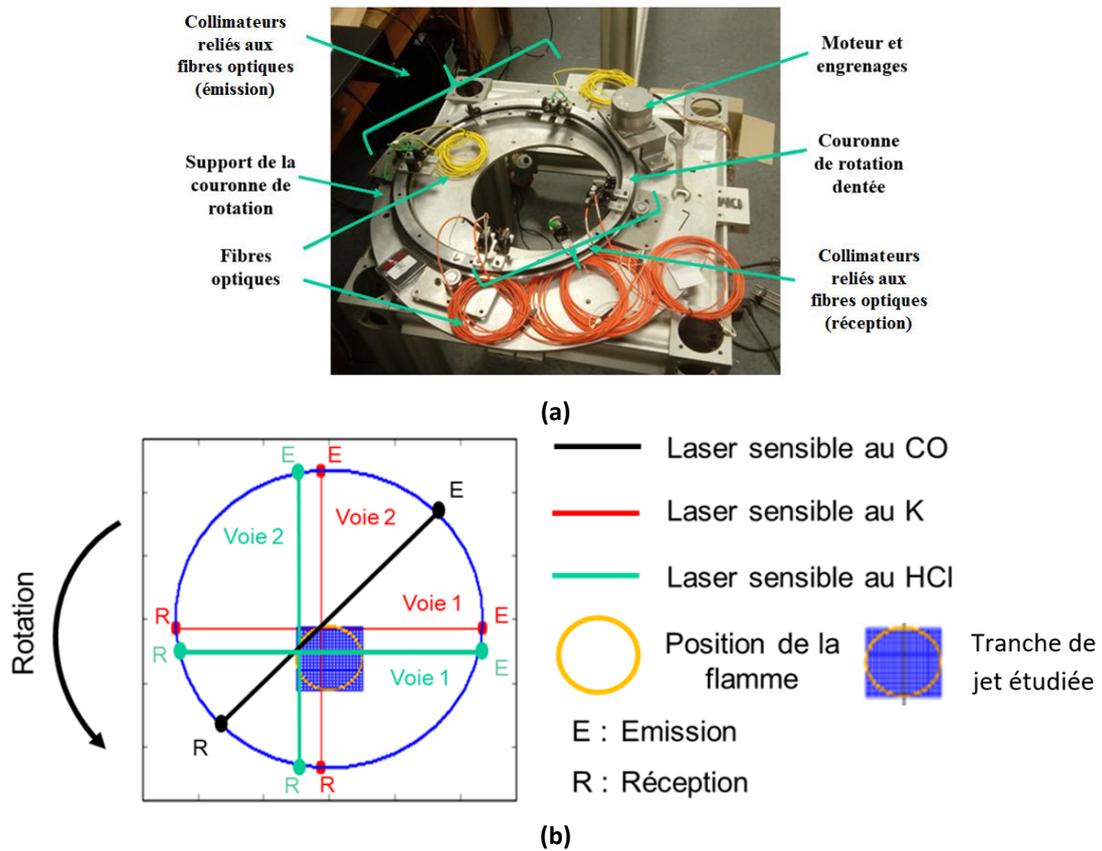


Figure 52 : Image (a) de la couronne de scan excentrée et (b) configuration de faisceaux associée

L'ensemble du système de mesures installé sur le moteur est représenté sur la Figure 53.

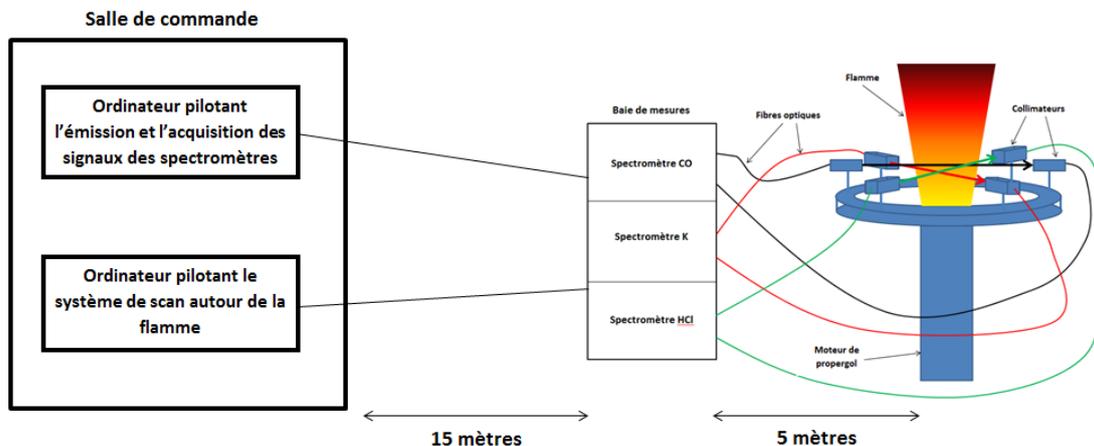


Figure 53 : Schéma du système de mesures complet

4) Démarche de la comparaison entre simulations et mesures

Les mesures effectuées sont destinées à être comparées avec des simulations numériques modélisant ce jet afin de valider, d'ajuster ou d'améliorer le modèle. A partir des simulations, il est possible d'extraire des cartographies en deux dimensions des concentrations en CO, HCl et K ainsi que des distributions de pression et température à l'altitude où sont faites les mesures (Figure 54). Or, les mesures effectuées par les faisceaux lasers sont intégrées sur leurs lignes de visée, une démarche de calcul est nécessaire pour comparer les simulations aux résultats de mesures.

Cette démarche pour comparer les valeurs expérimentales intégrées aux cartographies simulées est la suivante. Les faisceaux de mesures ont chacun une trajectoire connue précisément au cours du balayage. A chaque position représentée sur la Figure 51, ils fournissent un spectre d'absorption qu'il est possible d'inverser afin de déterminer des valeurs de pression, température et concentration intégrées sur la ligne de visée. Ainsi, les spectres acquis pourront fournir des profils intégrés en fonction de la position angulaire de chaque faisceau au cours du temps. De la même manière, il est possible de générer numériquement des spectres d'absorption à partir de distributions numériques de pression, température et concentrations sur les mêmes trajectoires de faisceaux puis de les inverser pour déterminer les valeurs intégrées de pression, température et concentrations. Ainsi, nous disposons également de profils intégrés en fonction de la trajectoire du faisceau au cours du temps issues des mesures dans la flamme réelle et issues des distributions simulées qui sont comparables. La comparaison entre ces profils issus des inversions est une première forme d'exploration spatiale.

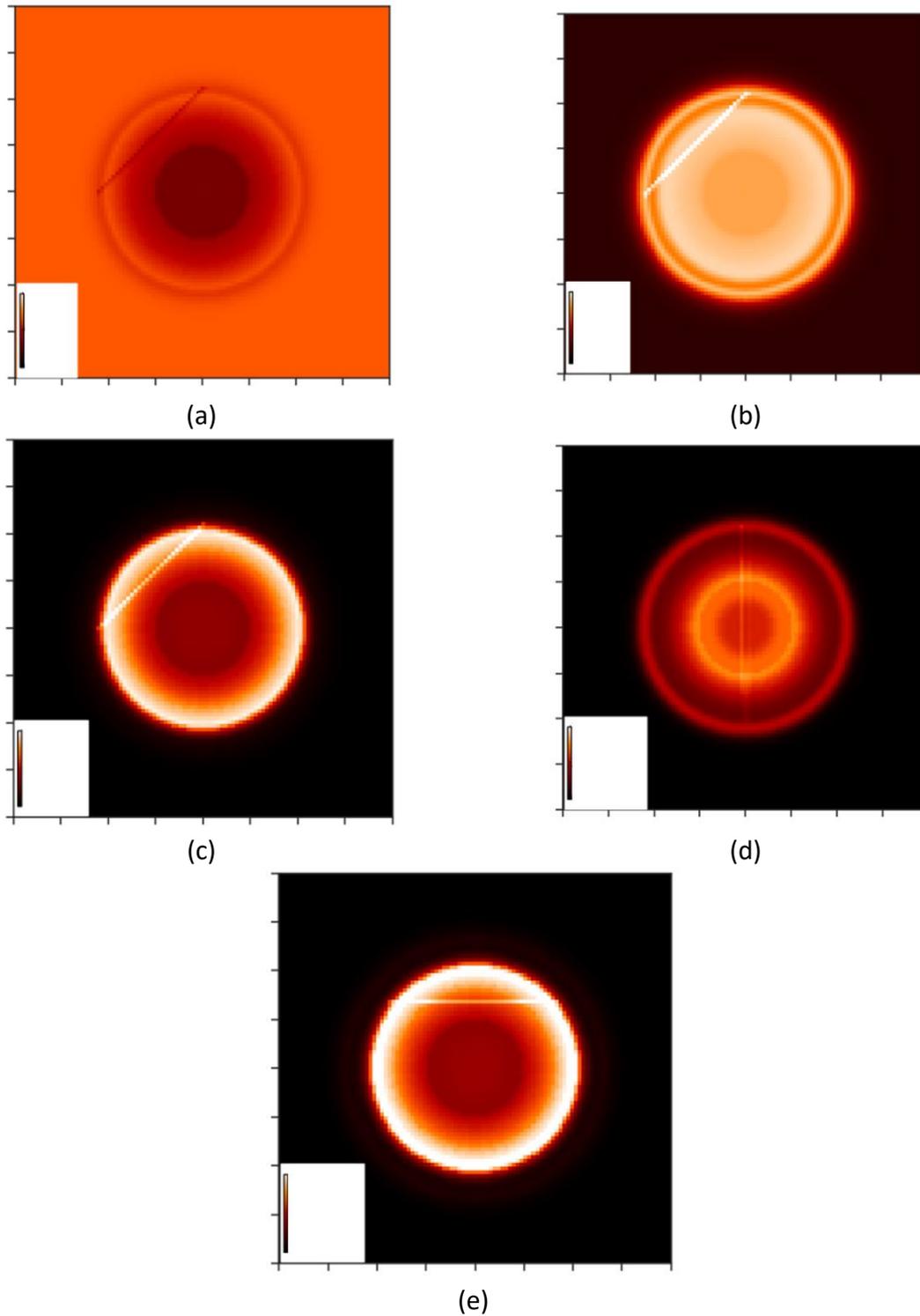


Figure 54 : Distributions simulées en deux dimensions de (a) pression, (b) température et des concentrations de (c) CO, (d) K et (e) HCl dans la tranche du jet étudié

II) Acquisition et traitement des spectres d'absorption

1) Séquence d'acquisition

Le temps de combustion étant très court, nous avons dû synchroniser les acquisitions avec le déclenchement du système de scan et avec la séquence d'allumage du moteur. D'après les prédictions numériques, le temps de combustion attendu est de 4 secondes. Après la mise à feu, on observe une rapide montée en pression. Ce comportement caractérise le temps d'allumage du moteur et la stabilisation de la combustion. Ensuite, la pression se stabilise à une valeur, ce qui indique que la flamme est stable. Pendant la dernière seconde, la pression diminue à la fin de la combustion. Cette évolution de la pression prédite par les simulations est confirmée expérimentalement pour l'essai mené comme illustré sur la Figure 55.

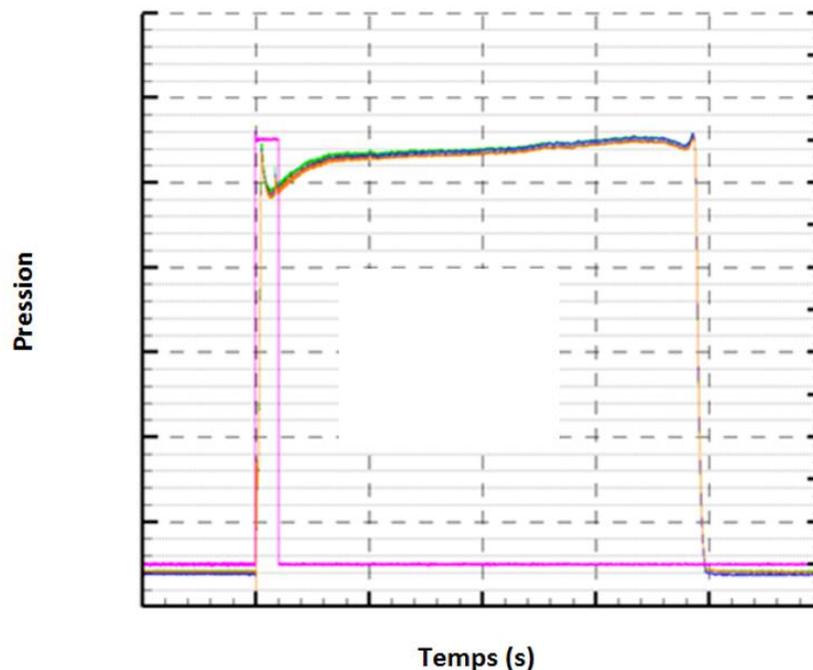


Figure 55 : Courbes représentant l'évolution de la pression mesurée avec plusieurs capteurs de pression dans le moteur au cours de la combustion du propergol avec une représentation du signal de mise à feu (courbe violette)

Compte tenu de la limitation en durée pour la rotation, nous avons choisi d'effectuer le balayage des faisceaux que pendant la phase où la flamme est supposée stable. Ainsi, nous avons choisi de démarrer la rotation juste après la phase de montée en pression. La durée d'enregistrement des spectres est moins contraignante. L'acquisition des spectres débute 0,3 s avant la mise à feu et le démarrage du scan débute 0,5 s après la mise à feu. La flamme est balayée pendant une durée de 2,15 s pendant la phase de stabilité, puis le scan s'arrête mais l'acquisition des spectres est maintenue pendant 1,05 s après l'arrêt du

balayage. La Figure 56 représente une frise temporelle schématisant la séquence d'acquisition au cours de l'essai.

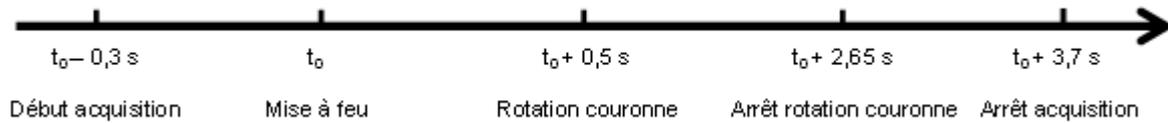


Figure 56 : Déroulement de la séquence d'acquisition au cours de l'essai

2) Acquisition des spectres

Avant de traiter les spectres, il est nécessaire d'étudier les phénomènes qui ont pu perturber les mesures.

La séquence d'acquisition a fonctionné correctement et la rotation de la couronne s'est déclenchée au bon moment après l'allumage du moteur. Cependant, certaines des voies de mesures sont inexploitable : il s'agit de l'une des voies du HCl et de l'une des voies du potassium. Ainsi, l'inversion spectrale ne peut être faite que sur trois séries de spectres d'absorption. Dans le cas du HCl, la cause la plus probable est un éblouissement du détecteur en raison de la luminosité trop importante de la flamme lors de l'allumage. Dans le cas du potassium, un filtre interférentiel placé sur le collimateur de réception a été endommagé probablement par la brusque montée en température du milieu lors de l'allumage ou du rayonnement trop important de la flamme. Ce filtre ne laisse plus passer de lumière (vérifié après essai), ce qui explique la coupure du signal. Les séries de faisceaux utilisées pour le calcul sont donc celles représentées sur la Figure 57.

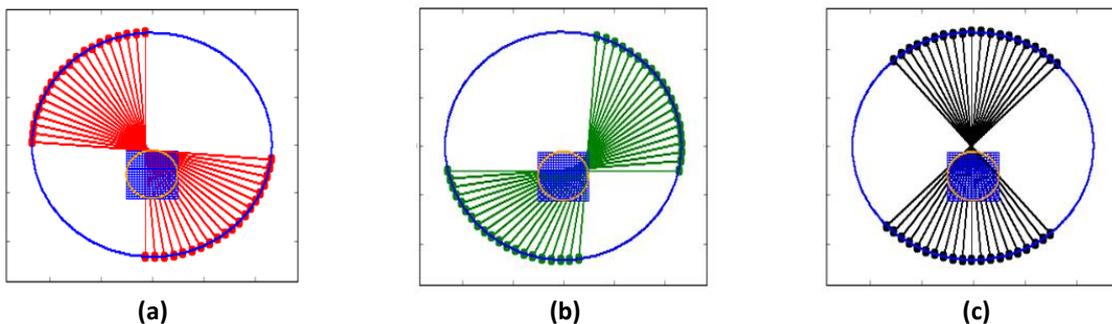


Figure 57 : Séries de faisceaux exploitables après le tir de propegol, (a) faisceau du K, (b) faisceaux du HCl et (c) faisceau du CO

Les spectres d'absorption de ces trois voies exploitables seront inversés en fonction de la longueur d'intégration de chaque faisceau au travers de la flamme pendant la rotation (Figure 58).

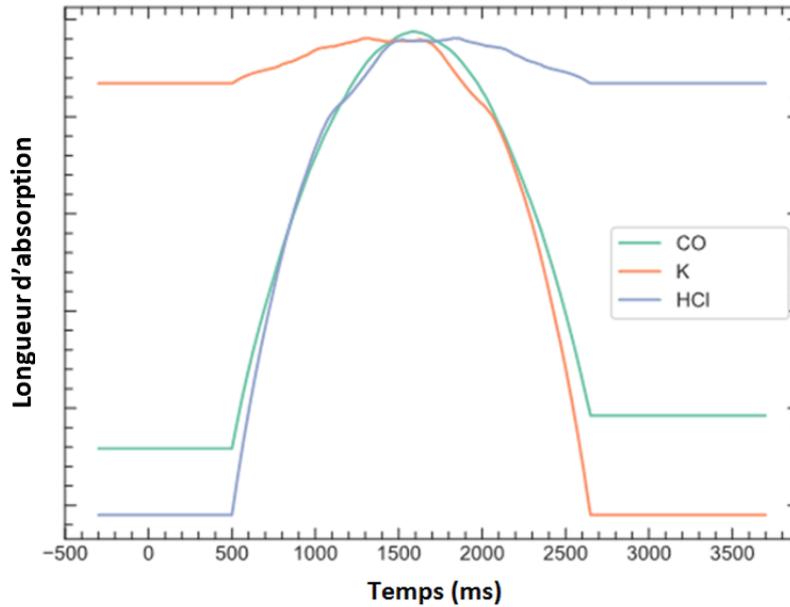


Figure 58 : Evolution de la longueur d'absorption des trois faisceaux au cours de la rotation de la couronne

Par ailleurs, des problèmes de bruit et de saturation de raie ont aussi été rencontrés. Sur la voie de mesure du CO, deux raies d'absorption sont visibles. Elles sont bruitées mais le signal reste exploitable. Dans le cas d'un spectre acquis par un faisceau passant au centre de la flamme, on remarque que les raies prédites par la simulation sont saturées contrairement aux raies expérimentales (Figure 59). Ce constat est vu également sur les raies acquises à d'autres positions dans la flamme. Ce qui laisse à penser que la concentration en CO mesurée n'est pas aussi élevée que celle prédite par les calculs.

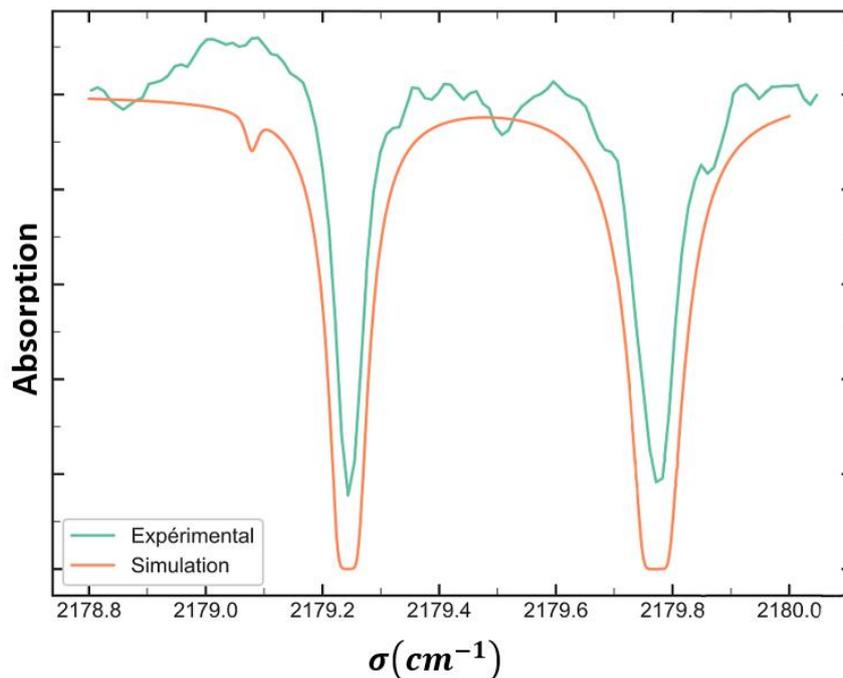


Figure 59 : Exemple de spectre d'absorption du CO acquis au centre de la flamme

Dans le cas du HCl, le spectre est également bruité avec un écart semblable à celui des spectres du CO et des différences sont observées entre spectres simulés et mesurés. En effet, en périphérie de la flamme l'intensité de la raie d'absorption est plus faible que pour le spectre simulé (Figure 60). Dans l'ensemble, la série de spectres est exploitable malgré le bruit de mesure.

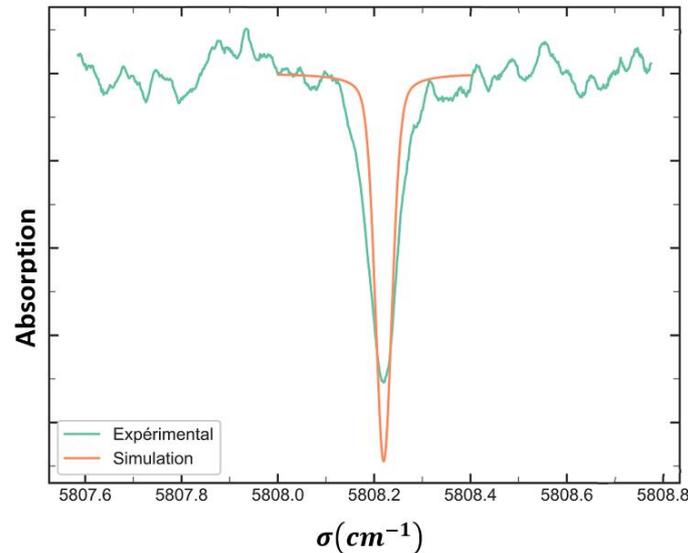


Figure 60 : Exemple de spectre d'absorption du HCl acquis au centre de la flamme

En ce qui concerne les spectres du potassium, ils sont bruités et la raie est fortement saturée pendant toute la durée de la combustion (Figure 61). Ce qui est le cas pour aussi bien pour le spectre expérimental que pour le spectre simulé. Néanmoins, une inversion spectrale peut se faire uniquement sur les ailes de la raie. Elle sera moins précise mais donnera néanmoins l'information de concentration de K.

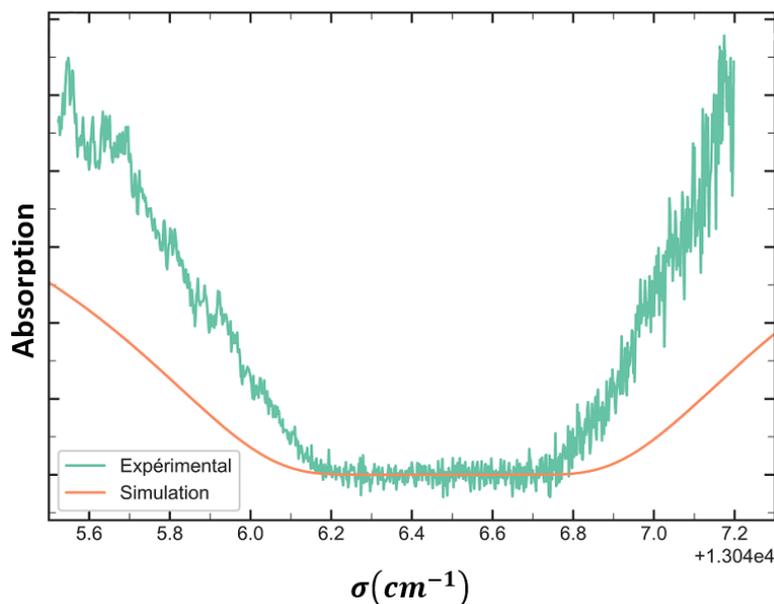


Figure 61 : Exemple de spectre d'absorption du K au centre de la flamme

III) *Exploitation des données expérimentales*

1) **Reconstruction des paramètres thermodynamiques**

Malgré les perturbations des spectres par le bruit, l'inversion est possible pour obtenir des profils intégrés de concentration en CO, HCl et K, pression et température pour chaque position de faisceau au cours de la rotation de la couronne. Ces profils ont été tracés et superposés à ceux obtenus à partir de la tranche de flamme simulée sur la Figure 54.

En ce qui concerne les paramètres thermodynamiques, à savoir pression et température, ils ont été obtenus à partir des spectres d'absorption du CO. Nous avons choisi d'exploiter les spectres du CO et non les spectres du K ou de HCl car le coefficient d'élargissement collisionnel γ_{lor} du CO dans la flamme de propergol a pu être mesuré², ce qui n'est pas le cas pour le HCl ou le K dont les coefficients γ_{lor} utilisés fournis par la base de données HITRAN sont des coefficients mesurés dans l'air (donc avec des partenaires de collisions O₂ et N₂ peu représentatifs du mélange de la flamme). De plus, le spectre de CO présentant deux raies d'absorption, cela permet de s'assurer que l'étalonnage spectral est correct. Les spectres du CO fournissent donc une information plus fiable pour mesurer la pression et la température dans le propergol. Le coefficient γ_{lor} du CO a été déterminé lors d'essais dans l'installation Chamade à partir de la mesure de l'élargissement des raies d'absorption dans la flamme de plusieurs échantillons de propergol solide qui ont brûlé à différentes pressions entre 3 *bar* et 8 *bar*.

La Figure 62 représente un spectre de CO mesuré ainsi que le spectre reconstruit après inversion. Si l'inversion semble correcte, on remarque cependant que le maximum des raies n'est pas parfaitement reproduit. Une explication possible est dans les erreurs lors de l'opération de suppression de l'enveloppe spectrale. Ces écarts peuvent engendrer des erreurs sur la reconstruction de la concentration et de la température.

² Mesure effectuée au cours d'expériences extérieure à la thèse. Le résultat a seulement été récupéré pour traiter les spectres mesurés.

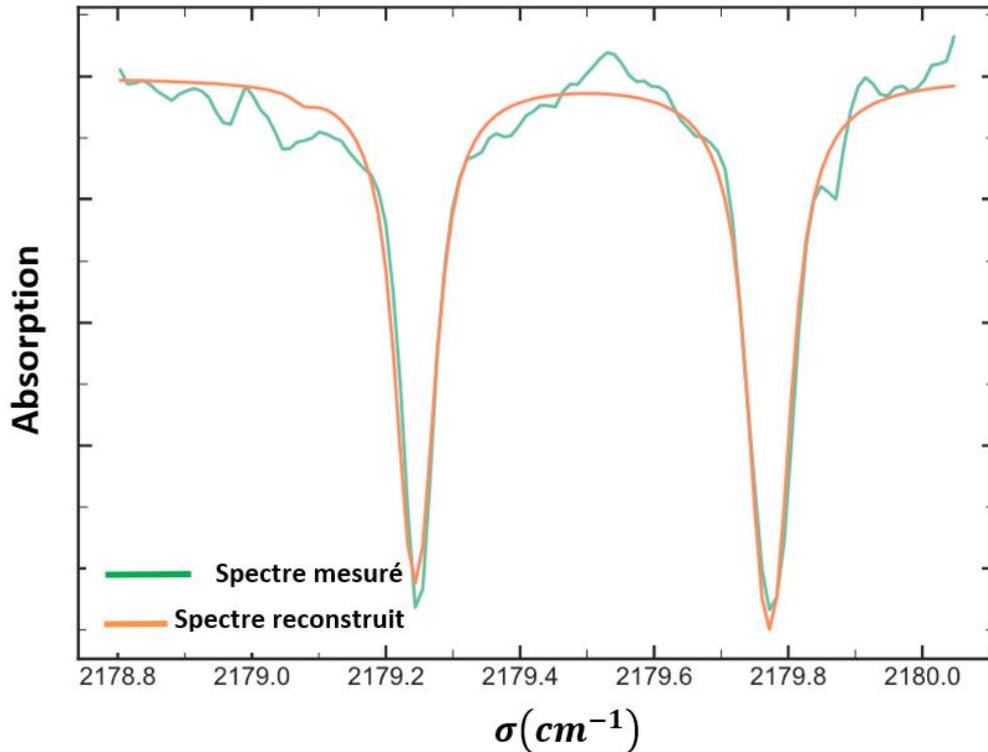


Figure 62 : Exemple de spectre d'absorption du CO reconstruit après inversion spectrale superposé au spectre mesuré

Dans le cas du CO, le faisceau est initialement positionné au bord du jet, puis il passe par le centre et termine son mouvement sur le bord opposé. Les profils de pression et de température expérimentaux sont représentés sur la Figure 63 et la Figure 64 superposés aux profils simulés aux mêmes positions.

En ce qui concerne le profil de pression, la valeur mesurée est environ deux fois supérieure à la valeur prédite par les simulations. De plus, les mesures présentent une forte dispersion, avec un écart type de 85 %.

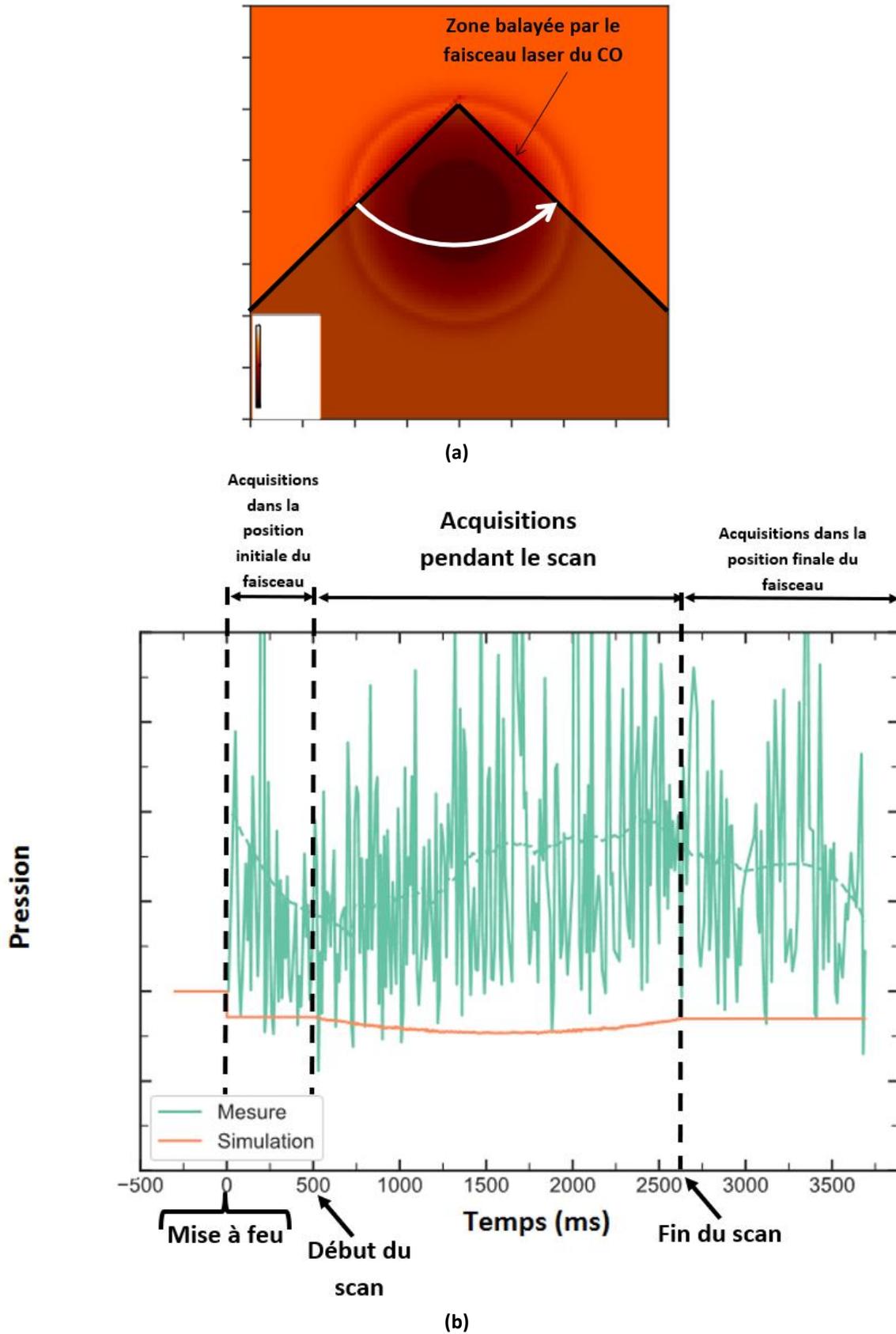


Figure 63 : (a) schéma de la trajectoire des faisceaux de mesures dans le profil 2D de pression et (b) représentation des valeurs intégrées de pression simulées et expérimentales selon la position du faisceau au cours du temps de rotation

Dans le cas de la température, les profils simulés et reconstruits sont assez proches malgré le fait que la mesure donne un profil moyen de température 25% plus élevé que celui mesuré. L'écart type des mesures est moindre (22%).

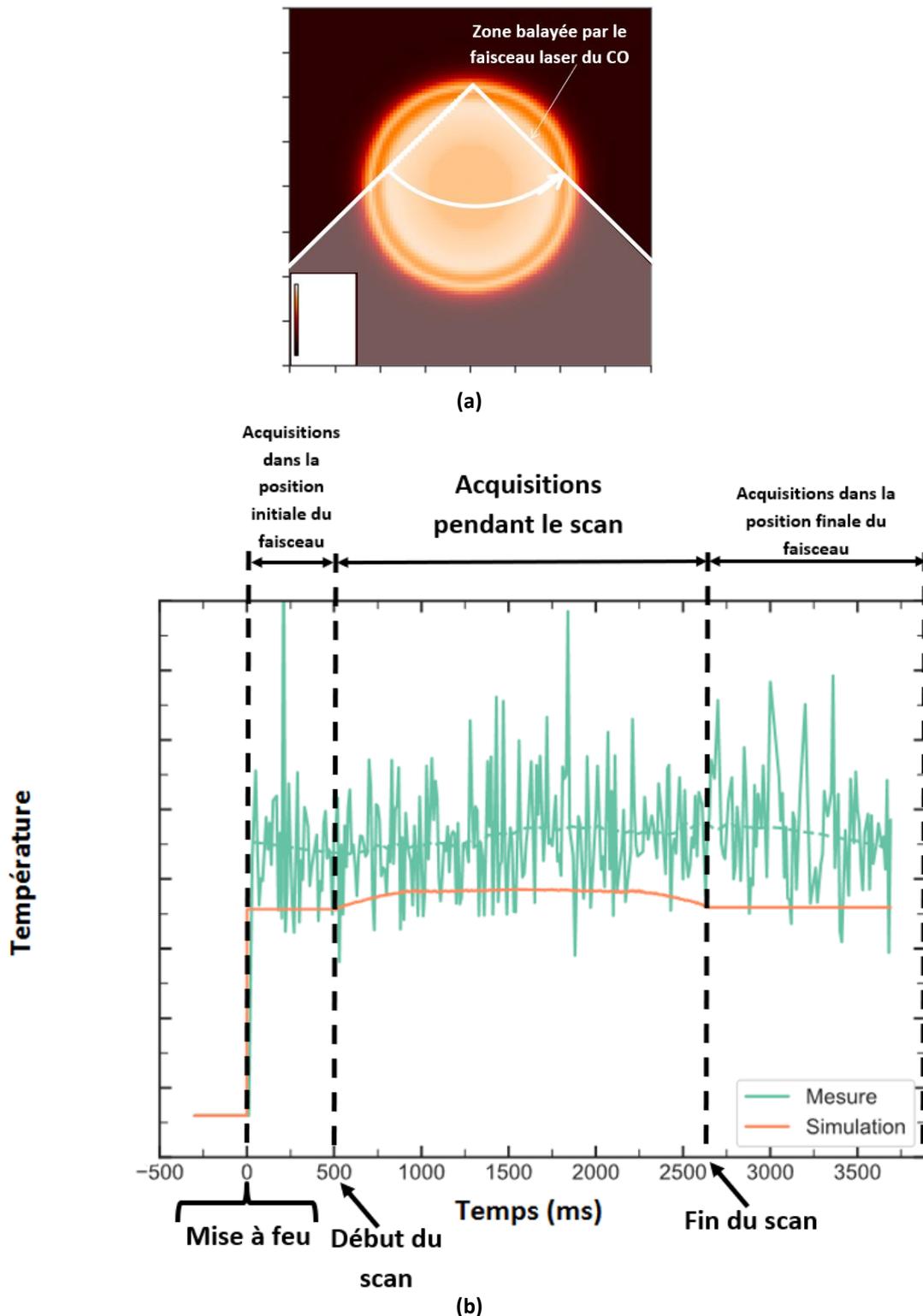


Figure 64 : (a) schéma de la trajectoire des faisceaux de mesures dans le profil 2D de température et (b) représentation des valeurs intégrées de température simulées et expérimentales selon la position du faisceau au cours du temps de rotation

2) Reconstruction des profils de concentration

a) Profil de CO

Dans le cas du CO, la trajectoire du faisceau et les résultats des inversions des spectres superposés au profil simulé sont représentés sur la Figure 65. On observe des écarts relativement importants entre profils simulés et mesurés. Pendant l'ensemble du scan, la concentration de CO reste environ trois fois inférieure à celle prévue par les simulations. Cependant, l'évolution spatiale du profil en fonction de la rotation du faisceau est correctement reproduite notamment au début du scan entre 0 ms et 3000 ms. En effet, la concentration intégrée est plus faible lorsque le faisceau passe au centre du jet que lorsqu'il passe au bord. De plus, on constate une légère asymétrie entre les deux bords. La concentration sur le bord final est environ 33% plus faible que sur le bord initial. Cet écart peut s'expliquer par une asymétrie de la concentration en CO dans le jet ou par une évolution temporelle de la concentration.

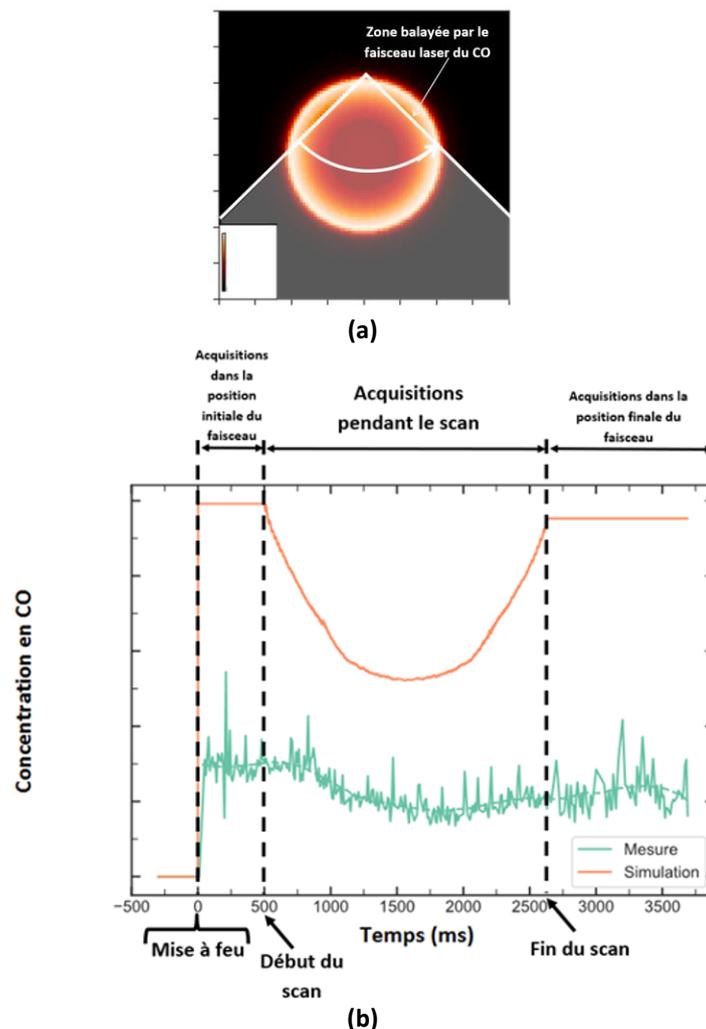


Figure 65 : (a) représentation de la zone balayée par le faisceau laser dans le profil 2D de concentration en CO et (b) profils simulés et expérimentaux intégrés en fonction de la position du faisceau au cours du temps de rotation

Il existe plusieurs phénomènes physiques se produisant dans le jet qui peuvent ajouter des incertitudes sur les mesures en plus des erreurs liées au traitement des données expérimentales. On peut citer la présence de particules d'alumines dont la taille est de l'ordre de la dizaine de micromètres. Le faisceau fait un diamètre d'environ 2 mm et fait une intégration spatiale sur sa section. Ainsi, ces particules peuvent obstruer en partie la section d'intégration et donc diminuer la puissance laser reçue par le détecteur.

Par ailleurs, il est possible que l'absorption du signal par d'autres espèces chimiques contribue à l'atténuation du laser. En effet, dans une zone spectrale proche de l'intervalle spectral balayé, il est possible de trouver des raies de N_2O qui est une espèce présente dans le jet de propergol. Ainsi, il est possible que l'intervalle spectral que l'on observe se situe sur une aile d'une grande raie de N_2O et qu'une partie signal soit quasiment uniformément absorbée sur tout l'intervalle spectral. Ce qui peut induire une erreur sur la suppression de l'enveloppe spectrale.

b) Profil de HCl

L'inversion des spectres de HCl est satisfaisante comme il est possible de le constater sur la Figure 66 montrant la comparaison d'un spectre mesuré et d'un spectre reconstruit. La superposition semble parfaite au niveau du profil de raie mais pas en dehors de ce profil..

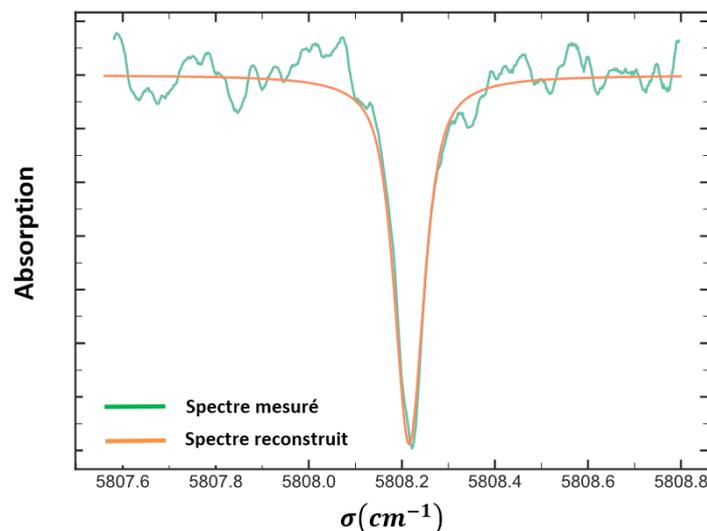


Figure 66 : Exemple de spectre d'absorption du HCl reconstruit après inversion spectrale superposé au spectre mesuré

La trajectoire du faisceau et les résultats de mesures sont représentés sur la Figure 67. La reconstruction spectrale a été faite avec la valeur moyenne de la température mesurée avec les spectres de CO qui est considérée comme constante pour toutes les positions du

faisceau. Le profil reconstruit indique une concentration intégrée plus importante au bord de la flamme qu'au centre. L'écart type des mesures est de 21% et l'écart entre concentration simulée et mesurée est d'environ 30% pendant la rotation de la couronne. Sur l'ensemble du profil, la valeur mesurée est légèrement supérieure à la valeur simulée.

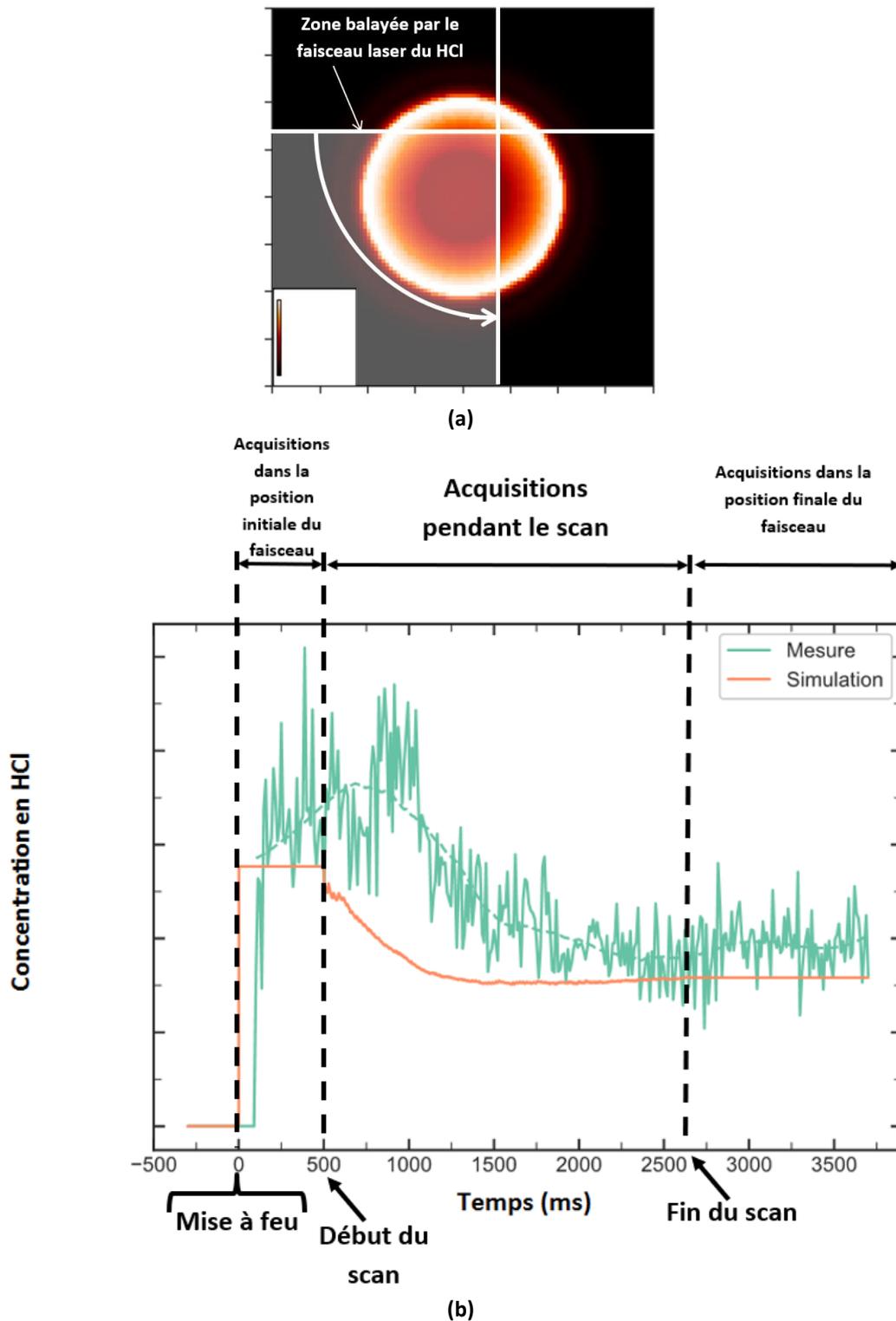


Figure 67 : (a) représentation de la zone balayée par le faisceau laser dans le profil 2D de concentration en HCl et (b) profils simulés et expérimentaux intégrés en fonction de la position du faisceau au cours du temps de rotation

c) Profil de K

En ce qui concerne le potassium, l'inversion spectrale a été plus délicate en raison de la forte saturation de la raie d'absorption sur l'ensemble des spectres. Un exemple de spectre reconstruit superposé au spectre mesuré est représenté sur la Figure 68. Cette saturation pose plusieurs problèmes. Le premier est que le fait de ne pas voir le maximum de la raie rend la mesure imprécise et nous force à utiliser uniquement les ailes de la raie. Ensuite, on remarque que la raie mesurée occupe tout l'intervalle spectral utilisé (et permise par la diode laser à notre disposition), ainsi le spectre ne dispose d'aucune zone sans absorption pour réaliser la suppression de l'enveloppe spectrale. Ce qui ajoute une incertitude sur la forme de la raie et donc sur la reconstruction de la concentration.

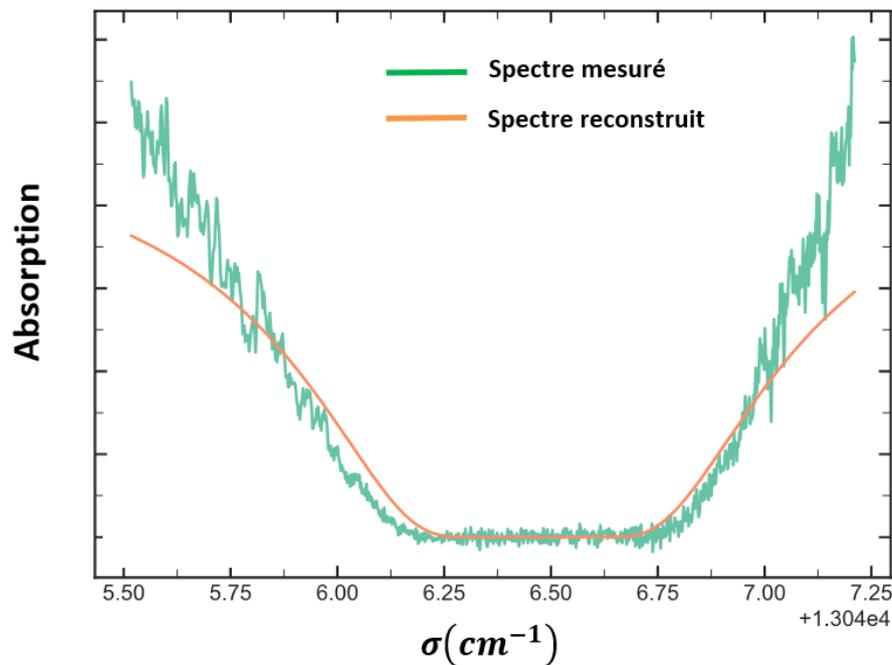


Figure 68 : Exemple de spectre d'absorption du potassium reconstruit après inversion spectrale superposé au spectre mesuré

La trajectoire du faisceau et les résultats de mesures sont représentés sur la Figure 69. L'inversion des spectres a également été faite (tout comme pour le HCl) avec la valeur moyenne de la température mesurée avec les spectres de CO qui est considérée comme constante pour toutes les positions du faisceau.

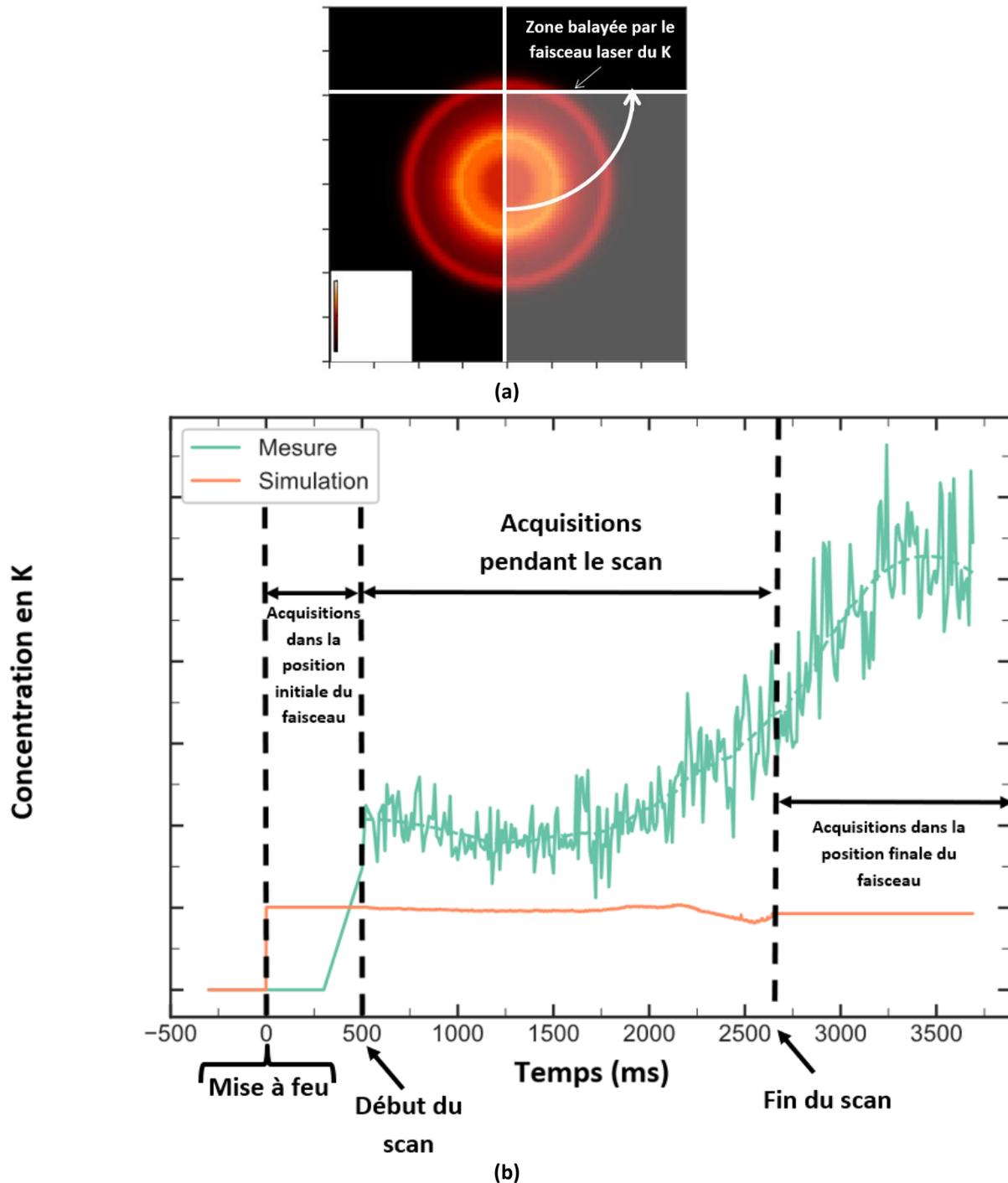


Figure 69 : (a) représentation de la zone balayée par le faisceau laser dans le profil 2D de concentration en K et (b) profils simulés et expérimentaux intégrés en fonction de la position du faisceau au cours du temps de rotation

Dans les 500 premières millisecondes de l'acquisition lorsque le faisceau est au centre du jet le signal est inexploitable à cause d'une trop forte atténuation du signal. Le traitement des spectres n'a été possible qu'à partir de 500 ms. L'inversion spectrale donne un profil intégré de concentration en potassium avec un écart type de 15%. Tout comme pour les autres espèces, la concentration en potassium intégrée est plus importante sur les bords du jet

qu'au centre. Ce qui n'est pas en accord avec le profil prédit par la simulation qui est quasiment constant sur toute la durée du balayage spatial. La concentration mesurée est deux fois supérieure à la concentration au centre de la flamme tandis qu'elle devient trois fois supérieure au bord de la flamme. De plus, on remarque que la concentration en potassium mesurée augmente continuellement lorsque que le faisceau est dans la position finale du scan et que la longueur d'intégration est la plus faible. Ce résultat peut s'expliquer par le fait que lorsque la fin de la combustion approche, l'environnement autour de la flamme se soit rempli de potassium gazeux. Ainsi, même avec une faible longueur d'intégration dans la flamme, le faisceau laser pourrait être absorbé par le potassium dans le milieu ambiant qui serait en constante augmentation. Cependant, la validité des mesures est également discutable en raison du fait que l'inversion spectrale sur une raie saturée induit une grande valeur d'incertitude sur le résultat.

Pour confirmer ces mesures, il serait plus judicieux d'utiliser des raies de K moins intenses à d'autres longueurs d'ondes (par exemple celle à 405 nm) afin d'éviter les problèmes de saturation.

IV) Bilan des essais TDLAS avec balayage tournant

Cette étude de TDLAS avec balayage tournant des faisceaux de mesures a permis d'obtenir des résultats donnant une première forme d'exploration spatiale. Nous avons pu faire des comparaisons quantitatives avec des simulations. Cette expérience a permis d'étudier le comportement des paramètres qui influent sur la qualité d'une reconstruction TDLAS dans un jet turbulent de grande envergure tels que les incertitudes sur le comportement physique du jet, les problèmes liés au bruit de mesure, à l'obstruction des faisceaux et à l'étalonnage spectral. Ces informations nous seront utiles pour la mise au point d'un système de tomographie optimisé et opérationnel. Dans la suite de la thèse, nous considérons l'application d'un algorithme de tomographie pour exploiter des spectres mesurés avec ce dispositif de scan par rotation. Le développement d'un tel algorithme combiné avec ce système de mesures doit permettre une amélioration importante de la résolution spatiale et d'arriver, à terme, à une reconstruction expérimentale de profils en deux dimensions de pression, température et concentrations.

Chapitre 4 : Méthode de reconstruction tomographique et étude paramétrique

Ce chapitre est consacré à présentation de la méthode numérique de reconstruction tomographique utilisée pour traiter des spectres d'absorption et cartographier les concentrations d'espèces chimiques, la pression et la température dans les flammes. Pour cela, nous revenons dans un premier temps sur le modèle mathématique de reconstruction tomographique, qui avait été présenté dans le premier chapitre. Nous présentons ensuite l'algorithme de reconstruction fondé sur une méthode de minimisation non-linéaire appliquée à un critère faisant apparaître un terme de régularisation. Cette première partie se termine par une synthèse des différents paramètres (expérimentaux et algorithmiques) qui influencent la qualité de la reconstruction. Les paramètres principaux que nous identifions sont les coefficients pondérant les termes de régularisation : nous étudions différents critères pour proposer une stratégie de réglage malgré la non-linéarité du problème. Nous effectuons ensuite une étude plus générale abordant l'ensemble des paramètres influençant la qualité de reconstruction. Cette étude se termine par l'application du protocole de réglage proposé à plusieurs objets synthétiques différents afin d'apprécier la robustesse de notre approche.

1) Modèle de reconstruction tomographique

Dans cette thèse, nous avons choisi de baser notre méthode de reconstruction sur le principe de la tomographie hyper-spectrale avec une reconstruction globale non-linéaire des spectres d'absorption. Cette méthode est similaire à celle utilisée par Cai dans l'article [43] que nous avons étudié dans le chapitre 1 III) 3) page 41. Le principe consiste à acquérir plusieurs spectres d'absorption autour d'une zone d'étude et à réaliser une inversion globale des spectres par modification des profils de concentration, température et concentration. Pour réaliser cette méthode, nous avons mis en œuvre un algorithme de minimisation de moindres carrés non-linéaires, implémenté à l'aide plusieurs outils numériques dont nous allons détailler le fonctionnement.

1) Principe général de l'algorithme développé

Le code de reconstruction tomographique développé fonctionne selon le principe introduit dans chapitre 1 III) 3) (page 41) et utilisé en TDLAS dans le chapitre 2. Pour rappel, il est fondé sur un ajustement de courbe entre un spectre mesuré à travers un milieu inconnu et un spectre calculé numériquement à partir de valeurs de pression, température et concentration. Ces quantités, qui sont les paramètres recherchés, sont modifiées par itérations successives pour faire correspondre au mieux les deux spectres. Dans le cas de l'algorithme de TDLAT développé, le même principe est utilisé mais avec plusieurs faisceaux acquis à plusieurs positions et angles différents autour de la zone d'étude contenant des profils 2D de pression, température et concentration. Le principe de la méthode est résumé sur la Figure 70.

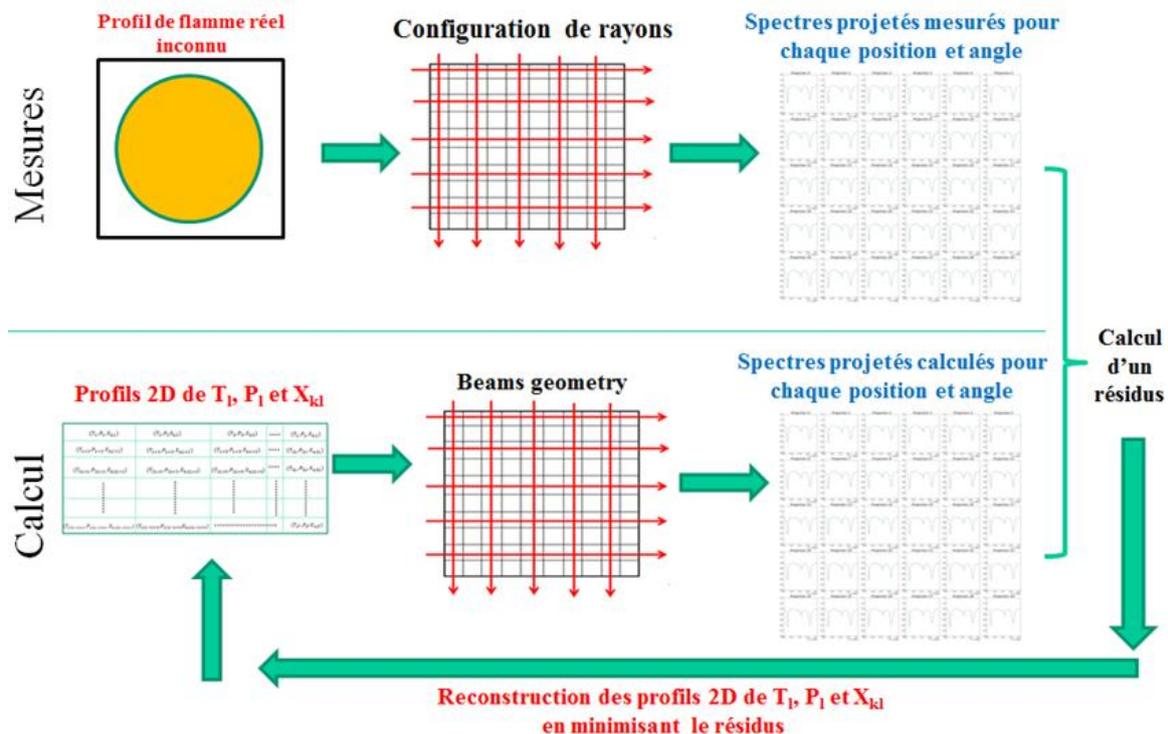


Figure 70 : Principe de la méthode de TDLAT

Tout comme pour la méthode développée par Cai [43], ce choix d'algorithme permet d'exploiter directement les variables d'intérêt associées à un pixel pour correspondre aux données expérimentales, sans passer par une étape de tomographie linéaire en absorption. Cette méthode a été choisie pour permettre d'exploiter au maximum l'information spectrale dans la reconstruction tomographique en espérant que cette information spectrale puisse lever des ambiguïtés géométriques provenant du manque d'accès optique et de limiter l'impact du bruit sur les spectres mesurés. En revanche, le choix de cette approche conduit à devoir résoudre un problème inverse non-linéaire.

Pour mettre en œuvre cet algorithme, plusieurs étapes sont nécessaires. Nous avons tout d'abord développé un algorithme de lancer de rayons afin de pouvoir générer des matrices de projections simulant l'ensemble des configurations de mesure souhaitées. Ensuite, nous avons développé un code de minimisation de moindres carrés non-linéaire permettant d'effectuer les reconstructions tomographiques dans les configurations de rayons choisies. Comme discuté dans le chapitre 1, du fait des limitations sur les données disponibles, il nous faut introduire des termes de régularisation dans le critère effectivement minimisé, ce qui implique le choix des paramètres de régularisation correspondant. Nous allons donc détailler ces différentes étapes de la mise en œuvre de l'algorithme.

2) Discrétisation de la zone d'étude et lancer de rayon

Le modèle de zone d'étude est une tranche de flamme en deux dimensions divisée en pixels. Chaque pixel contient des valeurs de concentration d'une ou plusieurs espèces chimiques, de pression et de température. Un faisceau traversant ce milieu subit un phénomène d'absorption optique local à travers chaque pixel. Cette absorption locale est notée selon une équation similaire à l'équation (8) de la page 15. Pour un pixel l donné, l'absorption s'écrit :

$$\alpha_l(\sigma, P_l, T_l, X_{kl}) = \sum_{kr} S(\sigma_{kr}, T_l) \cdot X_{kl} \cdot f(\sigma - \sigma_{kr}, P_l, T_l) \quad (73)$$

Notre objectif est de faire le lien cette absorption locale et l'absorption intégrée de tous les pixels sur une projection j . En tomographie linéaire, l'influence d'un pixel l sur une projection donnée par un faisceau j est un coefficient noté w_{jl} donné par longueur d'intersection de la surface du pixel l par le faisceau j . Nous allons donc modéliser la construction d'un spectre d'absorption acquis à travers la zone de pixels de la même manière.

La première étape du calcul de tomographie est donc de déterminer les valeurs des coefficients w_{jl} pour chaque pixel et rayon. Pour cela, nous avons écrit un programme qui permet de tracer n'importe quel rayon dans la zone d'étude et de calculer la longueur d'intersection de ce rayon avec chaque pixel.

Dans la pratique les rayons utilisés en TDLAS ont un diamètre d'environ 2 mm ou 3 mm. Cependant, dans le modèle de spectroscopie TDLAS le calcul de l'absorption se fait uniquement par une intégration linéique des grandeurs mesurées sur la ligne de visée du faisceau. Pour la TDLAT aussi, nous choisiront de considérer l'effet du diamètre du faisceau comme négligeable par rapport à sa longueur.

Ainsi, dans le cas de la TDLAT, un rayon est défini comme un segment infiniment fin entre un point source de coordonnées (x_S, y_S) et un point détecteur de coordonnées (x_D, y_D) . Avec ces deux points, on définit l'équation de droite du rayon. Le quadrillage est défini comme deux séries de segments horizontaux et verticaux chacun défini lui aussi par une équation de droite. A partir de ces équations de droite, on calcule les coordonnées des points d'intersection entre un faisceau et les côtés de chaque pixel. La longueur d'intersection est ensuite déduite de ces coordonnées. Répéter cette opération pour chaque rayon permet d'obtenir tous les coefficients de la matrice de projection w_{jl} (Figure 71).

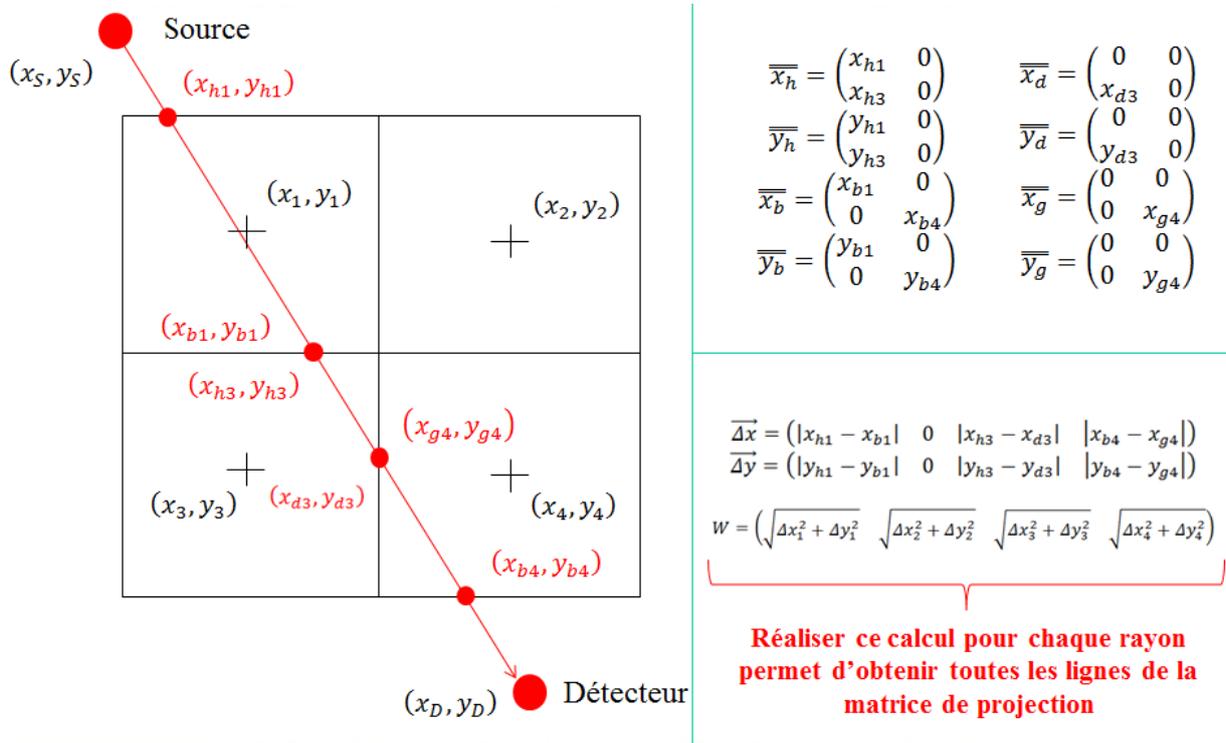


Figure 71 : Principe de la méthode de calcul de la longueur d'intersection entre un rayon quelconque et un pixel de l'image dans un cas simplifié d'une image de 2 par 2 pixels

En résumé, la méthode décrite permet, pour toute position de sources et de détecteurs, de calculer la matrice de projection permettant de modéliser la log-absorption globale comme la somme de log-absorption locales, discrétisées sur une grille pixel.

Ainsi, pour les champs 2D de pression, température et concentrations discrétisés sur la zone d'étude et dont les valeurs pour un pixel l sont notées (P_l, T_l, X_{kl}) , un spectre projeté indicé j peut s'exprimer comme la somme des contributions des absorptions de chaque pixel l pondéré par la longueur d'intersection entre le faisceau j et le pixel l . Pour un rayon j on obtient l'expression :

$$p_{calc,j}(\sigma, P_l, T_l, X_{kl}) = \sum_l \sum_k w_{jl} \cdot \alpha_l(\sigma, P_l, T_l, X_{kl}) \tag{74}$$

Avec σ le nombre d'onde, $\mathbf{p}_{calc,j}(\sigma, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl})$ les projections calculées avec j l'indice de la projection, $(\mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl})$ les champs de pression, température et concentration chimique des espèces indicées k en utilisant un scalaire l pour désigner un pixel de l'image à reconstruire, et $\alpha_l(\sigma, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl})$ l'absorption locale dans le pixel l . En remplaçant $\alpha_l(\sigma, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl})$ par son expression en fonction de la pression, de la température et de la concentration, on obtient une équation similaire à l'équation (58) du chapitre 1 page 42 (à la différence que nous ne faisons pas l'approximation permettant de linéariser l'effet de la pression sur le spectre) :

$$\mathbf{p}_{calc,j}(\sigma, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl}) = \sum_l \sum_{kr} \mathcal{S}(\sigma_{kr}, \mathbf{T}_l) \cdot \mathbf{X}_{kl} \cdot \mathbf{f}(\sigma - \sigma_{kr}, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l) \cdot \mathbf{w}_{jl} \quad (75)$$

Dans la pratique, les spectres d'absorption sont tracés à partir de $\exp(-\mathbf{p}_{calc,j}(\sigma, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl}))$. Les calculs se font en revanche directement sur le terme $\mathbf{p}_{calc,j}(\sigma, \mathbf{P}_l, \mathbf{T}_l, \mathbf{X}_{kl})$.

Considérons les champs recherchés notés sous la forme d'un vecteur $\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{T}, \mathbf{P}, \mathbf{X}_k)$ et l'ensemble des projections indicées par j rassemblées dans un vecteur $\mathbf{p}_{calc}(\sigma, \boldsymbol{\theta})$, les équations d'observation (74) peuvent alors s'écrire sous forme matricielle :

$$\mathbf{p}_{calc}(\sigma, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\sigma, \boldsymbol{\theta}) \quad (76)$$

Chaque vecteur \mathbf{P} , \mathbf{T} et \mathbf{X}_k à la dimension des images à reconstruire. On définit L le nombre de pixels d'une ligne de l'image et donc $N_{pixels} = L^2$ le nombre total de pixels de l'image. Le vecteur $\boldsymbol{\theta}$ contient donc N_{pixels} valeurs inconnues de pression, N_{pixels} valeurs inconnues de températures et $K \cdot N_{pixels}$ valeurs inconnues de concentrations, K étant le nombre total d'espèces chimiques étudiées. Le vecteur $\boldsymbol{\theta}$ a donc une dimension de $N_{inconnues} = 2 \cdot N_{pixels} + K \cdot N_{pixels}$.

On considère un nombre de spectres projetés noté N_{proj} et un nombre de points par spectre noté N_σ . Le vecteur $\mathbf{p}_{calc}(\sigma, \boldsymbol{\theta})$ a donc une dimension de $N_{données} = N_\sigma \cdot N_{proj}$. La matrice de projection \mathbf{W} est de dimension de $N_{proj} \times N_{pixels}$.

3) Algorithme de reconstruction tomographique

Le calcul de reconstruction tomographique est basé sur la minimisation d'un critère de moindres carrés non-linéaires régularisé.

Le premier terme de ce critère est l'écart entre les projections mesurées, notées $\mathbf{p}_m(\sigma)$ et les projections prédites par le modèle donné dans la section précédente $\mathbf{p}_{calc}(\sigma, \theta)$ qui dépend du paramètre $\theta = (T, P, X_k)$. Pour simplifier l'écriture pour les prochains calculs, les projections mesurées et calculées seront notées \mathbf{p}_m et $\mathbf{p}_{calc}(\theta)$. On définit donc un terme *res* qui est appelé le résidu de taille $N_\sigma \cdot N_{proj}$ qui s'écrit :

$$\mathbf{res} = \mathbf{p}_m - \mathbf{p}_{calc}(\theta) \quad (77)$$

Le terme de moindres carrés non-linéaire est alors :

$$C_{mcnl} = \|\mathbf{res}\|^2 = \|\mathbf{p}_m - \mathbf{p}_{calc}(\theta)\|^2 \quad (78)$$

Cet algorithme de tomographie étant destiné à des applications sur banc de combustion, les difficultés d'accès optique vont entraîner des problèmes de conditionnement de matrice et de sous-détermination du problème comme il l'a été évoqué dans le chapitre 1 (II)2)g) page 30). Ainsi, l'ajout de termes de régularisation est primordial dans cet algorithme et nous avons choisi d'utiliser l'ajout d'information a priori par régularisation de Tikhonov, ce qui est utilisé le plus souvent en tomographie. L'ajout de ces termes aura donc pour effet de lisser la solution. Pour simplifier les expressions suivantes, nous allons supposer dans cette section que le paramètre recherché est un unique champ 2D de valeurs (par exemple $\theta = (T)$) sur lequel on peut définir simplement des dérivés numériques par l'application de matrices de dérivées spatiales horizontales et verticales d'ordre 1 D_x et D_y servant à définir un terme de régularisation de type Tikhonov :

$$R(\theta) = \|D_x \cdot \theta\|^2 + \|D_y \cdot \theta\|^2 = \theta^T \cdot D_x^T \cdot D_x \cdot \theta + \theta^T \cdot D_y^T \cdot D_y \cdot \theta \quad (79)$$

Le critère global à minimiser devient alors :

$$C_{global} = \|\mathbf{p}_m - \mathbf{p}_{calc}(\theta)\|^2 + \lambda R(\theta) \quad (80)$$

Avec :

$$R(\theta) = \|D_x \cdot \theta\|^2 + \|D_y \cdot \theta\|^2 = \theta^T \cdot D_x^T \cdot D_x \cdot \theta + \theta^T \cdot D_y^T \cdot D_y \cdot \theta \quad (81)$$

Le terme de régularisation est pondéré par un coefficient de régularisation λ .

La principale difficulté de la minimisation de ce critère provient du terme de résidu qui est non-quadratique, et qui peut donc présenter un certain nombre de minima locaux et un minimum global. L'algorithme utilisé dans l'article de Cai [43] est le recuit simulé qui peut

permettre, avec des réglages bien choisis, de sélectionner le minimum global lors de l'optimisation. Dans notre cas, nous avons choisi d'utiliser l'algorithme de Gauss-Newton. Cet algorithme garantit une convergence vers un minimum local mais pas nécessairement vers le minimum global. Nous avons choisi cet algorithme pour sa simplicité de mise en œuvre, en étant conscient que le minimum obtenu dépendra alors du point de départ. Il sera donc nécessaire d'étudier les solutions données par l'algorithme en fonction de l'initialisation.

Nous allons décrire en détail le fonctionnement de cet algorithme, en nous fixant d'abord sur l'optimisation du terme de données. Pour une itération donnée notée i , les projections calculées $\mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\theta})$ peuvent être estimée à l'ordre 1, par l'équation :

$$\mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}) \approx \mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)}) + \frac{\partial \mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})}{\partial \boldsymbol{\theta}} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{(i)}) \quad (82)$$

Notons le terme $\boldsymbol{\delta\theta} = \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{(i)}$. On définit alors un critère quadratique :

$$C_{GN}^{(i)} = \left\| \mathbf{p}_m - \mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)}) - \frac{\partial \mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})}{\partial \boldsymbol{\theta}} (\boldsymbol{\delta\theta}) \right\|^2 + \lambda \mathbf{R}(\boldsymbol{\theta}^{(i)}) \quad (83)$$

Le terme $\frac{\partial \mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ est la matrice Jacobienne constituée des dérivées partielles de l'ensemble des projections par rapport à $\boldsymbol{\theta}$. On la note $\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})$. Elle est constituée de la concaténation de trois matrices :

- Une matrice contenant les dérivées partielles de tous les spectres d'absorption $\mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})$ par rapport à des variations de **pression** dans tous les pixels. Ce qui est une matrice de $N_\sigma \cdot N_{proj}$ lignes par N_{pixels} colonnes
- Une matrice contenant les dérivées partielles de tous les spectres d'absorption $\mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})$ par rapport à des variations de **température** dans tous les pixels. Ce qui est une matrice de $N_\sigma \cdot N_{proj}$ lignes par N_{pixels} colonnes.
- Une matrice contenant les dérivées partielles de tous les spectres d'absorption $\mathbf{p}_{calc}(\boldsymbol{\theta}^{(i)})$ par rapport à des variations de **concentration** dans tous les pixels. Ce qui est une matrice de $N_\sigma \cdot N_{proj}$ lignes par $K \cdot N_{pixels}$ colonnes.

Cette matrice a donc un nombre de colonnes égale au nombre de pixels multiplié par le nombre profils à reconstruire, c'est-à-dire un profil de pression, un profil de température et K profils de concentrations, soit le nombre d'inconnues $(2 + K) \cdot N_{pixels}$. Son nombre de lignes est égal au nombre de projections multiplié par le nombre de points par spectres soit $N_\sigma \cdot N_{proj}$. La matrice Jacobienne a donc $(N_\sigma \cdot N_{proj}) \times ((K + 2) \cdot N_{pixels})$ coefficients :

cette grande dimension amènera dans l'implémentation à éviter de réaliser des opérations utilisant toute la matrice et à procéder éventuellement par une boucle sur les données.

Une itération de la méthode de Gauss-Newton consiste à déterminer le terme $\delta\theta = (\theta - \theta_i)$ qui minimise le critère quadratique C_{GN} . Ce terme est solution d'un système linéaire que nous explicitons ci-dessous. Cependant la minimisation doit tenir compte du terme de régularisation. Celui-ci peut s'écrire sous la forme :

$$R_\theta = \left\| D_x \cdot ((\theta - \theta^{(i)}) + \theta^{(i)}) \right\|^2 + \left\| D_y \cdot ((\theta - \theta^{(i)}) + \theta^{(i)}) \right\|^2 \quad (84)$$

Ce qui est équivalent à :

$$R_\theta = \left\| D_x \cdot ((\delta\theta) + \theta^{(i)}) \right\|^2 + \left\| D_y \cdot ((\delta\theta) + \theta^{(i)}) \right\|^2 = (\delta\theta + \theta)^T \cdot D_x^T \cdot D_x \cdot (\delta\theta + \theta) + (\delta\theta + \theta)^T \cdot D_y^T \cdot D_y \cdot (\delta\theta + \theta) \quad (85)$$

Ainsi, la minimisation du critère $C_{GN}^{(i)}$ de l'équation (83) s'obtient en annulant son gradient, ce qui est équivalent à résoudre le système :

$$(J^T \cdot J \mp \lambda(D_x^T \cdot D_x + D_y^T \cdot D_y)) \delta\theta = J^T (p_m(\sigma) - p_{calc}(\sigma, \theta^{(i)})) - \lambda(D_x^T \cdot D_x \cdot \theta^{(i)} + D_y^T \cdot D_y \cdot \theta^{(i)}) \quad (86)$$

En écrivant :

$$\begin{cases} \mathbf{b} = J^T (p_m(\sigma) - p_{calc}(\sigma, \theta^{(i)})) - \lambda(D_x^T \cdot D_x \cdot \theta^{(i)} + D_y^T \cdot D_y \cdot \theta^{(i)}) \\ \mathbf{A} = (J^T \cdot J + \lambda(D_x^T \cdot D_x + D_y^T \cdot D_y)) \end{cases} \quad (87)$$

Le système de l'équation (86) peut se mettre sous la forme :

$$\mathbf{A} \cdot \delta\theta = \mathbf{b} \quad (88)$$

Le système de l'équation (88) est donc un système matriciel linéaire. Sa résolution fournit une valeur de $\delta\theta$ correspondant à des valeurs de $(\delta T, \delta P, \delta X_k)$. Ainsi, pour minimiser le critère global C_{global} défini dans l'équation (80), l'algorithme calcule par itération successives des incréments $\delta\theta$ qui seront ajoutés au vecteur $\theta^{(i)}$ de l'itération précédente.

L'algorithme de tomographie est donc constitué de plusieurs étapes. Une première qui initialise des valeurs de (T, P, X_k) afin de calculer des spectres projetés numériques $p_{calc}(\sigma, \theta)$. Ensuite à partir de ces projections calculées et des projections mesurées $p_m(\sigma)$, le critère quadratique du gradient conjugué de l'équation (83) est calculé. Ce critère est ensuite minimisé en inversant le système de l'équation (88), ce qui donne comme résultats intermédiaires des incréments $(\delta T, \delta P, \delta X_k)$. Ensuite ces incréments sont

ajoutés à (T, P, X_k) pour calculer de nouvelles projections et démarrer une nouvelle boucle de calculs. Une représentation schématique de l'algorithme est présentée sur la Figure 72.

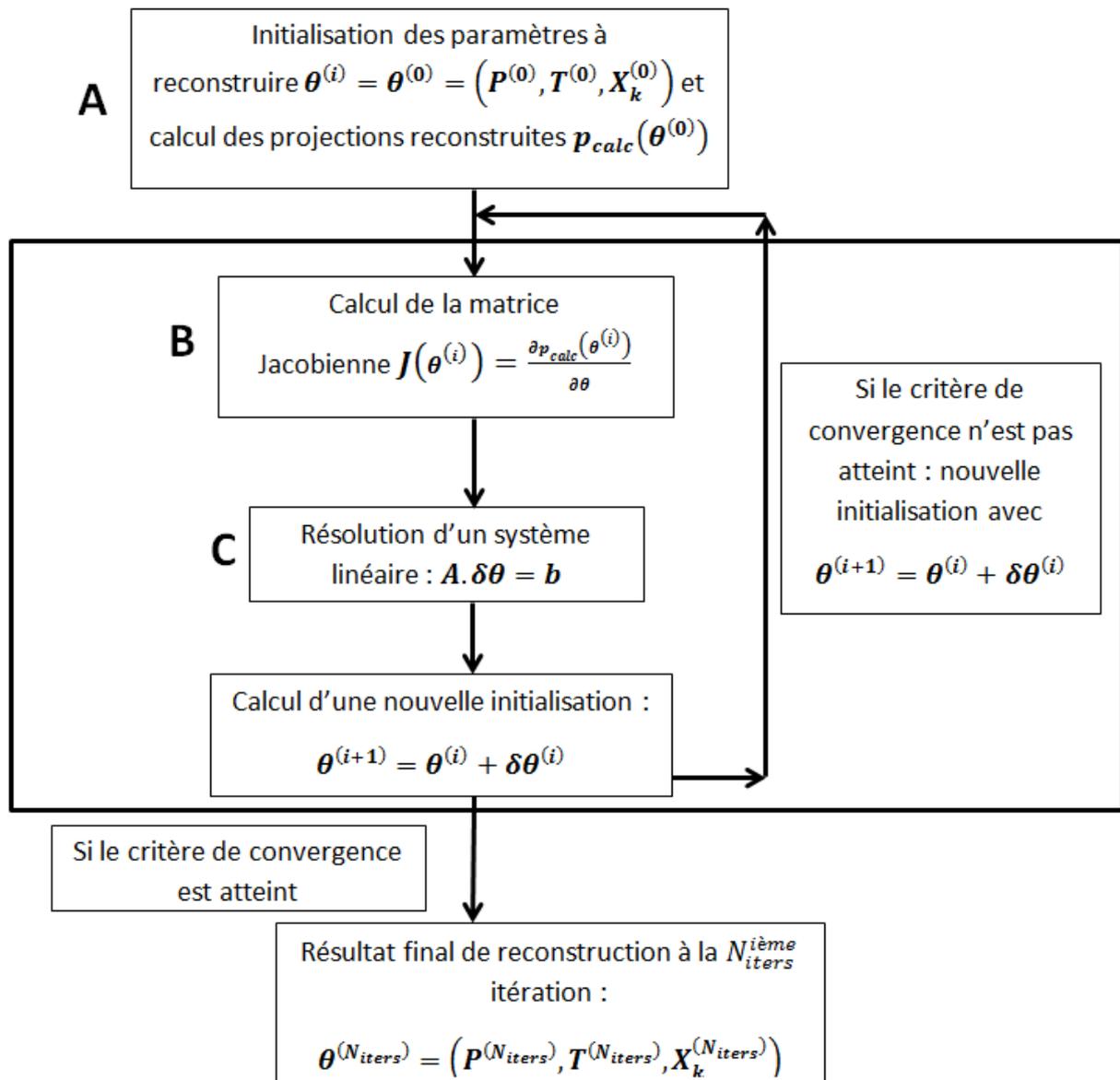


Figure 72 : Représentation schématique de l'algorithme de reconstruction tomographiques

4) Mise en œuvre

Dans cette partie nous allons décrire la mise en œuvre numérique concrète de cet algorithme de tomographie. Pour ce faire, nous allons nous baser sur la schématisation de l'algorithme de la Figure 72 et les principales étapes désignées par des lettres (A, B, C). Commençons par indiquer un point important concernant la normalisation des variables.

a) Normalisation des grandeurs physiques à reconstruire

Les grandeurs physiques à reconstruire (T, P, X_k) sont exprimées dans des unités différentes. Elles sont homogènes respectivement à des températures exprimées en Kelvin, des pressions exprimées en Torr et des concentrations chimiques exprimées en cm^{-3} . De plus, en termes de valeurs numériques seulement, les amplitudes de variations des trois types de grandeurs sont très différentes. En ce qui concerne la pression exprimée en torr les valeurs peuvent prendre des valeurs de l'ordre de 760 torr à 2000 torr selon les cas (voire jusqu'à 8000 torr dans certains cas que nous n'étudierons pas en tomographie dans ce cette thèse). Pour la température, les valeurs peuvent être de l'ordre du kelvin comme au minimum 300 K et atteindre des valeurs de l'ordre de 3000 K. Les ordres de grandeurs des valeurs numériques sont donc assez proches pour la pression et la température. Cependant, dans le cas de la concentration, les ordres de grandeurs des valeurs numériques sont compris entre $1,0 \cdot 10^{16}$ et $1,0 \cdot 10^{20}$ (les valeurs peuvent parfois être inférieures ou supérieures aux valeurs comprises dans cet intervalle mais la plupart des cas étudié dans cette thèse, il s'agit d'un intervalle représentatif). Ainsi, pour la concentration les valeurs numériques sont beaucoup plus importantes que pour la pression et la température. Nous avons donc choisi de réaliser une normalisation des valeurs de concentrations dans la partie de l'algorithme calculant les spectres d'absorption. Cette normalisation est faite par un changement de variable. Dans le calcul du profil de Voigt, des multiplications par $1,0 \cdot 10^{16}$ des de la concentration faite à l'intérieur du programme, ce qui a pour conséquence que les valeurs données à l'algorithme pour la concentration sont du même ordre de grandeur que la pression et la température (c'est-à-dire des ordres de grandeurs de 1 à 1000).

b) Initialisation des champs 2D à reconstruire et des spectres projetés (étape A)

En ce qui concerne l'initialisation des paramètres, des images sont générées dans des vecteurs à deux dimensions : un vecteur pour la pression, un vecteur pour la température et K vecteur pour les concentrations chimiques étudiées. La mise en forme selon un vecteur colonne à une dimension de ces images donne donc le vecteur $\theta^{(i)}$.

Ensuite, à partir de ces profils, l'absorption $\alpha_l(\sigma, \theta^{(i)})$ que l'on notera par la suite $\alpha_l(\theta^{(i)})$ est calculée dans chaque pixel en fonction du nombre d'onde. Il s'agit donc d'un volume en trois dimensions de taille $N_{pixels} \cdot N_\sigma$ qui peut être représenté comme sur la Figure 11 du chapitre 1 (page 40). On appelle ce volume noté $\alpha_l(\theta^{(i)})$ le volume spectral d'absorption. Les projections $p_{calc,j}(\theta^{(i)})$ pour chaque faisceau indicé j sont calculées avec la combinaison linéaire décrite dans l'équation (74).

Ces étapes de calculs sont assez rapides et peu coûteuses en mémoire. Elles nécessitent de construire $(2 + K)$ matrices de N_{pixels} et $N_{\sigma} \cdot N_{proj}$ spectres projetés. Le calcul intermédiaire du volume spectral $\alpha_l(\sigma, \theta^{(i)})$ est en revanche coûteux en temps de calcul. En effet, le calcul de ce volume met en jeu le calcul numérique de profil de Voigt par la méthode de Hui [58] décrite dans le chapitre 2 l) 2) page 50, qui répétée sur un grand nombre de pixels ce qui peut prendre un temps de calcul important. Cependant, le nombre de pixels des images que l'on traite est suffisamment faible pour que ce calcul reste rapide.

c) Calcul numérique de la matrice Jacobienne (étape B)

L'étape suivante consiste à calculer la matrice Jacobienne des projections par rapport à $\theta^{(i)} = (\mathbf{P}^{(i)}, \mathbf{T}^{(i)}, \mathbf{X}_k^{(i)})$. La matrice Jacobienne est une matrice qui fait le lien entre un vecteur contenant des spectres d'absorption $\mathbf{p}_{calc}(\theta^{(i)})$ et l'incrément sur les variables $\delta\theta$. Pour calculer cette matrice Jacobienne, il faut déterminer les dérivées partielles de l'ensemble des spectres d'absorption par rapport aux variations de pression, température et concentrations dans chaque pixel de la zone d'étude. Pour cela, nous utilisons une approximation de dérivée partielle par différence finie. On définit des incréments notés $(\varepsilon_P, \varepsilon_T, \varepsilon_{X_k})$ qui sont ajoutés respectivement à tous les pixels de $\mathbf{P}_l^{(i)}, \mathbf{T}_l^{(i)}$ et $\mathbf{X}_{kl}^{(i)}$. Ensuite, trois dérivées partielles du volume spectral sont calculées à partir de $(\mathbf{P}_l^{(i)} + \varepsilon_P)$, de $(\mathbf{T}_l^{(i)} + \varepsilon_T)$ et de $(\mathbf{X}_{kl}^{(i)} + \varepsilon_{X_k})$ de la manière suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_l}{\partial P_l} \approx \frac{\alpha_l(\mathbf{P}_l^{(i)} + \varepsilon_P, \mathbf{T}_l^{(i)}, \mathbf{X}_{kl}^{(i)}) - \alpha_l(\mathbf{P}_l^{(i)}, \mathbf{T}_l^{(i)}, \mathbf{X}_{kl}^{(i)})}{\varepsilon_P} \\ \frac{\partial \alpha_l}{\partial T_l} \approx \frac{\alpha_l(\mathbf{P}_l^{(i)}, \mathbf{T}_l^{(i)} + \varepsilon_T, \mathbf{X}_{kl}^{(i)}) - \alpha_l(\mathbf{P}_l^{(i)}, \mathbf{T}_l^{(i)}, \mathbf{X}_{kl}^{(i)})}{\varepsilon_T} \\ \frac{\partial \alpha_l}{\partial X_{kl}} \approx \frac{\alpha_l(\mathbf{P}_l^{(i)}, \mathbf{T}_l^{(i)}, \mathbf{X}_{kl}^{(i)} + \varepsilon_{X_k}) - \alpha_l(\mathbf{P}_l^{(i)}, \mathbf{T}_l^{(i)}, \mathbf{X}_{kl}^{(i)})}{\varepsilon_{X_k}} \end{cases} \quad (89)$$

On obtient donc un volume spectral dérivé par rapport à la pression $\frac{\partial \alpha_l}{\partial P_l}$, un autre par rapport à la température $\frac{\partial \alpha_l}{\partial T_l}$ et K autres par rapport aux concentrations chimiques étudiées $\frac{\partial \alpha_l(\theta^{(i)})}{\partial X_{kl}}$. Chacun de ces volumes fait la taille du volume spectral $\alpha_l(\theta^{(i)})$ à savoir $N_{pixels} \cdot N_{\sigma}$.

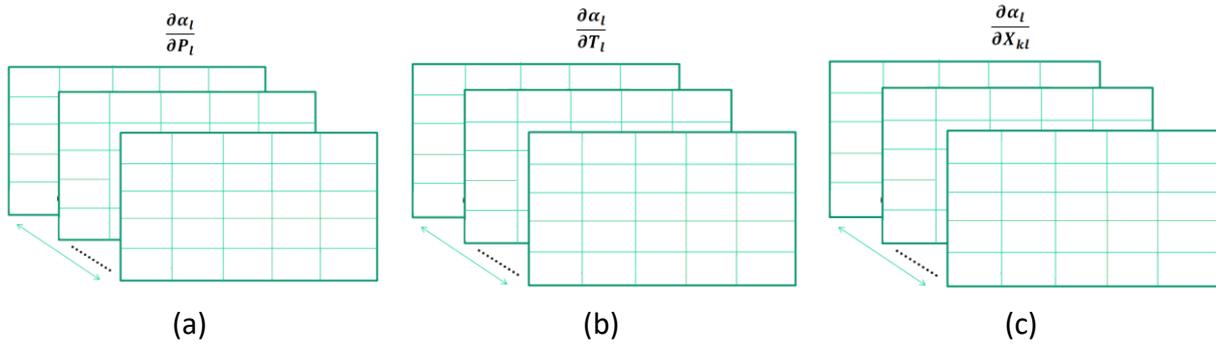


Figure 73 : Représentation schématique des dérivées des volumes spectraux en fonction de (a) la pression, (b) la température et (c) la concentration qui seront utilisés pour le calcul de la matrice Jacobienne

L'étape suivante est de déterminer les dérivées partielles des spectres d'absorption à partir de ces dérivées partielles de volumes spectraux. Pour décrire cette construction, prenons par exemple la construction de la partie de la matrice liée à la température. Cette matrice est composée de $N_{proj} \cdot N_{\sigma}$ lignes et de N_{pixels} colonnes. La dérivée partielle d'un spectre j par rapport à la température contenue dans un pixel l est égale à la dérivée de l'absorption locale par rapport à la température dans ce pixel l multipliée par la longueur d'intégration du faisceau j dans ce pixel soit le coefficient de la matrice de projection w_{jl} . Pour un nombre d'onde σ donnée, un coefficient de la matrice Jacobienne exprimant l'impact de la température contenue dans le pixel l sur la projection j est donc exprimé par l'équation :

$$\frac{\partial p_{calc,jl}(\sigma, \theta_l^{(i)})}{\partial T_l} = w_{jl} \frac{\partial \alpha_l(\sigma, \theta_l^{(i)})}{\partial T_l} \quad (90)$$

Pour obtenir la dérivée partielle de tout le spectre d'absorption par rapport à la température dans ce pixel, il suffit de répéter ce calcul pour chaque nombre d'onde. Un schéma de la construction de la partie de la matrice Jacobienne concernant la température est représenté sur la Figure 74.

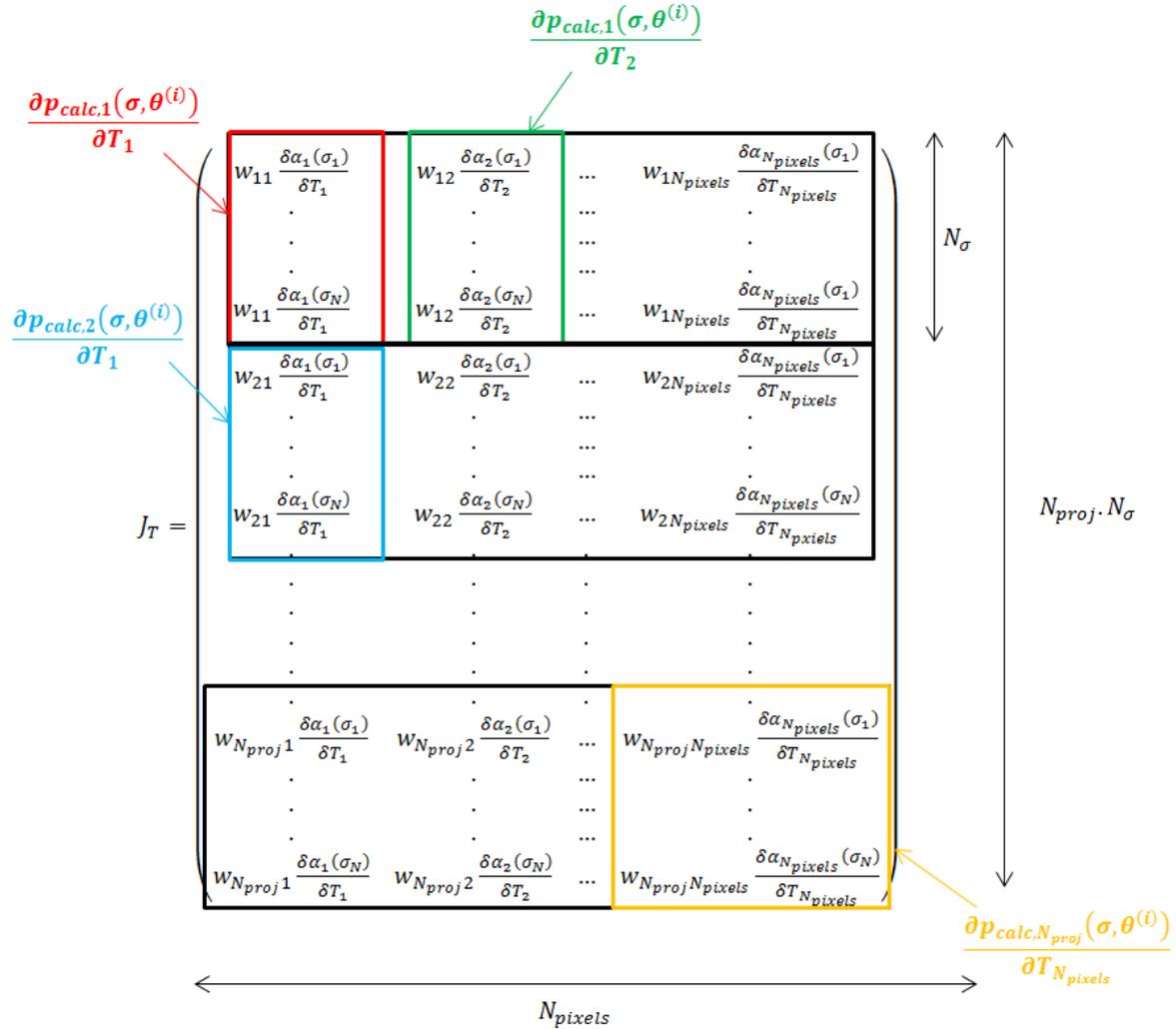


Figure 74 : Représentation de la construction de la matrice Jacobienne pour la température

Pour la pression et les concentrations chimiques étudiées, les expressions sont identiques à l'équation (90) :

$$\begin{cases} \frac{\partial p_{calc,jl}(\sigma, \theta_l^{(i)})}{\partial P_l} = w_{jl} \frac{\partial \alpha_l(\sigma, \theta_l^{(i)})}{\partial P_l} \\ \frac{\partial p_{calc,jl}(\sigma, \theta_l^{(i)})}{\partial X_{k_l}} = w_{jl} \frac{\partial \alpha_l(\sigma, \theta_l^{(i)})}{\partial X_{k_l}} \end{cases} \quad (91)$$

La matrice Jacobienne complète peut donc être construite par blocs en assemblant les parties (comme celles représentés sur la Figure 74) liées à la pression, la température et aux concentrations chimiques étudiées. Une représentation schématique de la matrice Jacobienne complète est montrée sur la Figure 75.

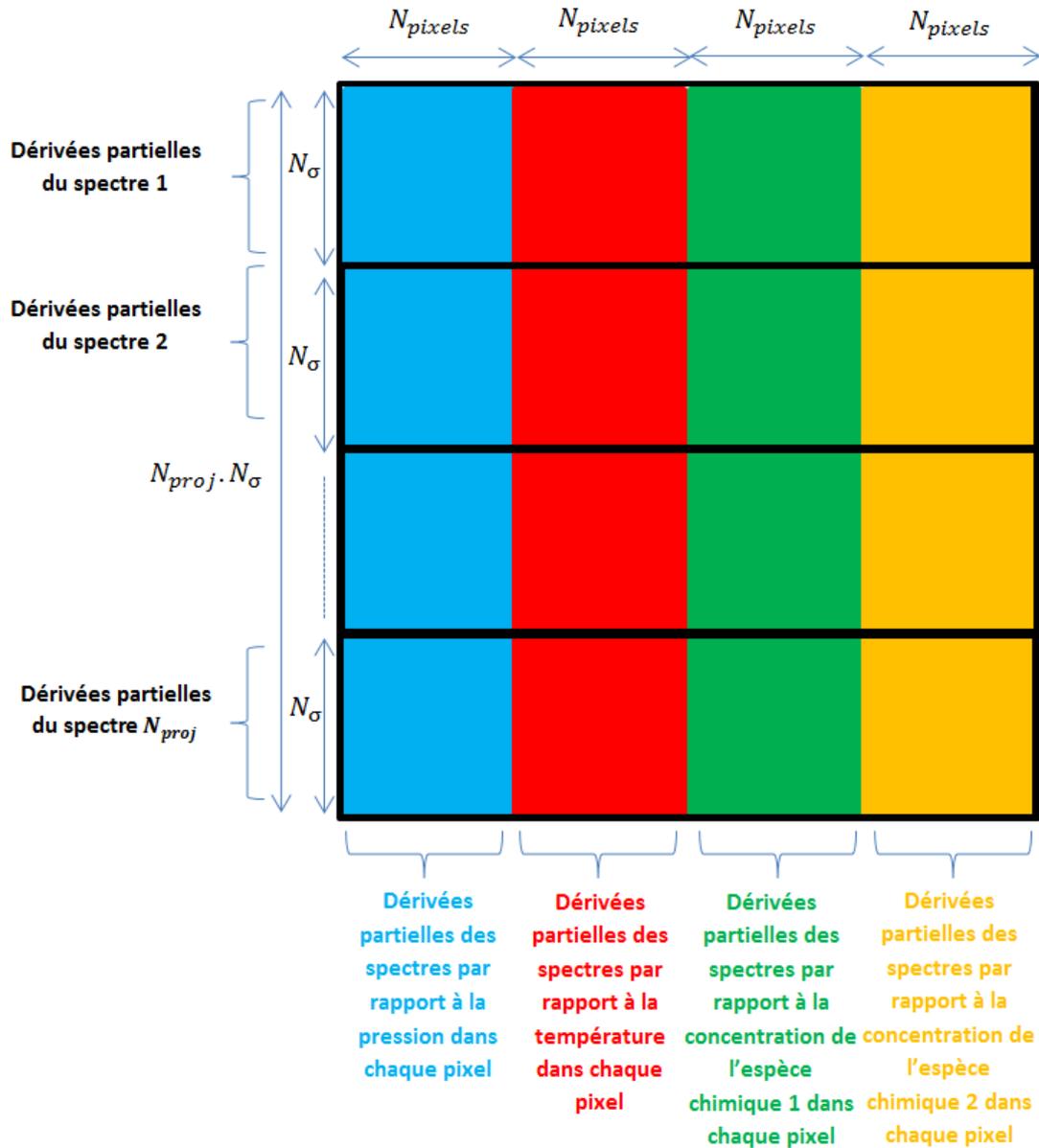


Figure 75 : Représentation schématique de la matrice Jacobienne complète dans le cas où le profil de pression, le profil de température deux profils d'espèces chimiques sont à reconstruire ($K = 2$)

Le calcul du Jacobien est la partie de l'algorithme la plus coûteuse en mémoire et en temps de calcul. En effet, comme le montre la Figure 75, cette étape nécessite de calculer une matrice de taille $(N_{\sigma} \cdot N_{proj}) \cdot (2 + k) \cdot N_{pixels}$. Ainsi, dans le cas où on travaille avec un grand nombre de projections avec une grande résolution spectrale et un maillage très fin de la zone d'étude des problèmes de saturation de mémoire peuvent être rencontrés. Il nous a donc fallu optimiser le maillage, le nombre de points par spectres et le nombre de projections pour réaliser les différents calculs.

Cette étape est également très coûteuse en temps de calcul. Le calcul de la matrice Jacobienne met en jeu le calcul de $(2 + K)$ volumes spectraux $\alpha_l(\sigma, \theta^{(i)})$ de

taille $N_{pixels} \cdot N_{\sigma}$. Ce qui donc le calcul de $(2 + K) \cdot N_{pixels}$ profils de Voigt à calculer. Or, le calcul de profil de Voigt est une partie coûteuse en temps de calculs. Ainsi, la répétition en grand nombre de cette opération rend le calcul de la matrice Jacobienne très coûteux aussi en temps de calcul.

d) Inversion du système linéaire (étape C)

Une fois la matrice Jacobienne calculée, l'étape suivante est d'inverser le système linéaire de l'équation (88). En raison du fait que la matrice à inverser est carrée de taille $[(2 + K) \cdot N_{pixels}] \cdot [(2 + K) \cdot N_{pixels}]$ et que sa taille est relativement faible, une simple inversion de matrice avec un solveur numérique permet d'inverser le système. Cette opération est rapide et peu coûteuse en temps de calcul. Les résultats de ce calcul sont ensuite récupérés pour effectuer une nouvelle itération jusqu'à la minimisation optimale du critère global.

e) Convergence de l'algorithme

D'après la Figure 72, l'algorithme est arrêté lorsqu'un critère de convergence est atteint. Différents critères de convergence peuvent être utilisés (gradient nul, évolution faible des variables, etc.). Après avoir vérifié la convergence sur un certain nombre d'exemples, nous avons choisi de forcer l'algorithme à s'arrêter au bout d'un certain nombre d'itérations. Dans tous les différents cas de reconstructions que nous avons testées, le critère diminue très vite au cours des 5 premières itérations puis tend de plus en plus lentement vers une valeur constante. Ainsi, nous avons estimé raisonnable d'arrêter l'algorithme au bout de 10 itérations. Cette règle d'arrêt simple aura également pour avantage de permettre une comparaison de la convergence de l'algorithme en fonction des réglages de ce dernier.

f) Gestion du pas à chaque itération

A chaque itération, un vecteur $\theta^{(i)}$ est calculé pour minimiser le critère global. Or, en raison de la non-linéarité du problème, il peut arriver que le pas $\delta\theta$ calculé au cours d'une itération engendre un $\theta^{(i+1)}$ qui fasse augmenter le critère plutôt que de le diminuer. Pour éviter ce phénomène, nous avons choisi de régler le pas de descente appliqué à $\delta\theta$ à chaque itération. En initialisant le pas à 1, l'algorithme détermine si le critère est descendu ou pas. Si

ce n'est pas le cas, le pas est divisé par 2. Si le critère ne descend toujours pas, le pas est à nouveau divisé par 2 et ainsi de suite jusqu'à ce que le critère diminue. De cette manière, on évite d'augmenter le critère à certaines itérations. De plus, la fraction obtenue pour le pas est conservée à l'itération suivante. C'est-à-dire que si le pas a été divisé par 8 à l'itération i , il sera automatiquement divisé par 8 à l'itération $i + 1$ ou divisé à nouveau par 2.

Cette technique peut avoir pour conséquence de ralentir la descente du critère. Ainsi, une amélioration que nous n'avons pas mise en œuvre aurait pu être d'augmenter le pas appliqué à l'incrément $\delta\theta$ si la valeur précédente du pas permet de diminuer immédiatement le critère à l'itération courante. On peut, par exemple, multiplier le pas par un coefficient supérieur à 1 tant que le critère n'augmente pas à nouveau. Cet ajout serait une amélioration de l'algorithme à considérer en perspective. Par ailleurs, il existe dans la littérature [64] des méthodes bien établies pour optimiser la recherche suivant la direction de descente qui sont disponibles dans des bibliothèques d'optimisation et qu'il conviendrait de mettre en œuvre.

5) Paramètres influençant la qualité de la reconstruction tomographique

Un grand nombre de paramètres influence la reconstruction tomographique. Nous allons dans cette section déterminer quels sont ces paramètres.

Un premier paramètre lié au critère qui est minimisé est le coefficient de régularisation de Tikhonov qui a une grande influence sur la forme de la solution obtenue. Il s'agit donc d'un paramètre à étudier prioritairement.

Deuxièmement, étant donné que l'on utilise l'algorithme de Gauss-Newton, le critère de convergence ne descend que dans un minimum local, il est donc important de choisir une initialisation des variables $(\mathbf{P}^{(0)}, \mathbf{T}^{(0)}, \mathbf{X}_k^{(0)})$ permettant de converger vers un minimum local le plus proche possible d'une solution optimale. Ainsi, l'initialisation de l'algorithme est un des paramètres étudiés.

D'autres contraintes expérimentales peuvent également constituer des paramètres à étudier. Le premier est le bruit sur les mesures. En effet, en TDLAS, les spectres d'absorption peuvent être entachés de bruit plus ou moins important. Comme il l'a été montré dans le chapitre 1 II)2)g) page 30, l'ajout d'informations a priori par régularisation de Tikhonov vise à limiter l'impact du bruit. Il est donc nécessaire d'observer l'évolution de la régularisation de Tikhonov en fonction du bruit sur les mesures.

Un autre paramètre lié à l'expérience est la complexité de la forme l'objet à reconstruire. En effet, un objet présentant des singularités de formes sera a priori plus difficile à reproduire

qu'un objet avec une forme simple et continue. De plus, la forme de l'objet peut également être restituée plus ou moins précisément en fonction du lissage de la régularisation de Tikhonov. De nouveau ce paramètre de forme de l'objet doit être étudié en lien avec le choix du coefficient de régularisation.

Ensuite, nous souhaitons voir l'impact de la configuration de rayons et du nombre de points spectraux sur la qualité de la reconstruction. Dans le cadre de notre étude de tomographie, nous avons choisi d'étudier une configuration de mesures qu'il nous est possible de mettre en œuvre expérimentalement. C'est pour cette raison que nous allons étudier des configurations de tomographie basées sur le système de scan par rotation qui a été utilisé lors de nos essais sur banc de combustion de propergol (chapitre 3 l)3) page 86).

Le scan par rotation, permet d'obtenir autant de positions angulaires que possibles autour de la flamme pour chacun des cinq faisceaux. En revanche, dans un souci d'économie de mémoire et de temps de calcul, nous avons restreint le nombre de positions faisceaux et également le nombre de points spectraux par faisceaux. Une restriction trop forte du nombre de faisceaux pas scan peut diminuer la qualité de la reconstruction mais un nombre trop important peut également être redondant et inutile si le maillage de l'image à reconstruire est trop grossier. Ainsi, pour étudier l'impact de cette restriction sur la qualité de la reconstruction, nous avons choisi d'étudier des séries de scan avec plusieurs nombres de faisceaux différents et aussi avec plusieurs nombres de points spectraux différents.

Les paramètres énumérés sont de plusieurs natures différentes et nous les divisons en trois catégories qui sont globalement représentées dans la Figure 76 :

- Les **contraintes expérimentales subies**, dont certaines sont non modifiables par l'expérimentateur. Il s'agit du niveau de bruit sur les spectres et la complexité de l'objet à reconstruire.
- Les **paramètres de réglage** de l'algorithme comme l'initialisation et le coefficient régularisation qui sont à optimiser.
- Les **paramètres expérimentaux** liés à la configuration de rayons qui sont le nombre de faisceaux utilisés au cours du scan, le nombre de points par spectres et l'intervalle spectral choisi. Ils sont aussi à optimiser.

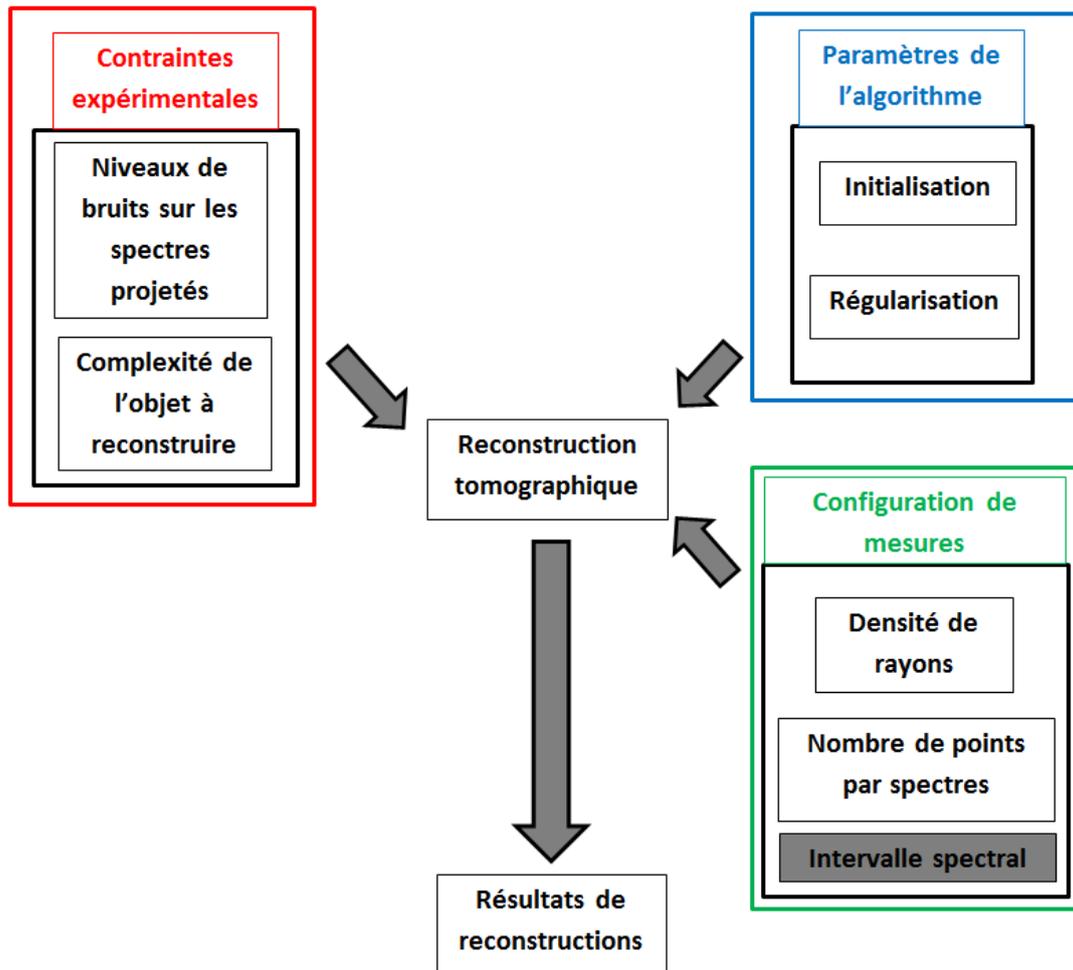


Figure 76 : Schéma de dépendance entre paramètres expérimentaux et algorithmiques et qualité de reconstruction tomographique

Dans le cas de l'intervalle spectral, nous n'allons pas pouvoir tester plusieurs reconstructions tomographiques avec plusieurs intervalles spectraux différents. Tous les tests seront faits sur le même intervalle. Nous avons fait ce choix car nous étudions dans l'étude paramétrique une configuration qu'il nous est possible de reproduire expérimentalement. Étudier un autre intervalle spectral nécessiterait le développement d'un autre spectromètre avec une autre diode laser, d'autres détecteurs et un autre système d'étalonnage spectral. Une étude avec un autre intervalle spectral serait néanmoins intéressante dans les perspectives de ce travail si un autre spectromètre pouvant caractériser les mêmes espèces chimiques était développé.

En ce qui concerne, la régularisation, nous allons étudier son impact en détail et proposer une méthode pour régler au mieux les coefficients de régularisation. Pour les autres paramètres, nous évaluerons la qualité de la reconstruction tomographique en modifiant chaque paramètre de la Figure 76 sur quelques valeurs test et en fixant les autres.

L'objectif final est de contribuer à définir un protocole de mesure performant et à évaluer sa robustesse en fonction des objets à reconstruire et des contraintes expérimentales.

II) Etude la régularisation dans un cas de problème inverse non-linéaire

Dans cette partie, nous allons étudier les effets de la régularisation et trouver un moyen de l'optimiser au mieux en tenant compte de la nature non-linéaire du problème inverse de TDLAT.

Pour cela, nous fixons un objet à reconstruire, une configuration de mesures (nombre de faisceaux et nombre de points par spectres), un niveau de bruit sur les spectres, une initialisation et nous effectuons des séries de reconstructions en modifiant la régularisation. A partir des résultats de ces reconstructions, nous proposerons une méthode d'optimisation adaptée.

1) Influence de la régularisation, choix des paramètres de régularisation

a) Cas d'étude

Le modèle utilisé pour évaluer l'influence de la régularisation sera constitué de champs 2D simulés de pression, température, concentration en H₂O et concentration en CO₂ (ces champs 2D seront dénommés par la suite par le terme ***fantôme***). Ces fantômes constitués d'image de 20x20 pixels représentent une Gaussienne en deux dimensions (reproduisant le profil circulaire et symétrique d'une flamme de combustion). Ces champs en deux dimensions sont représentés sur la Figure 77.

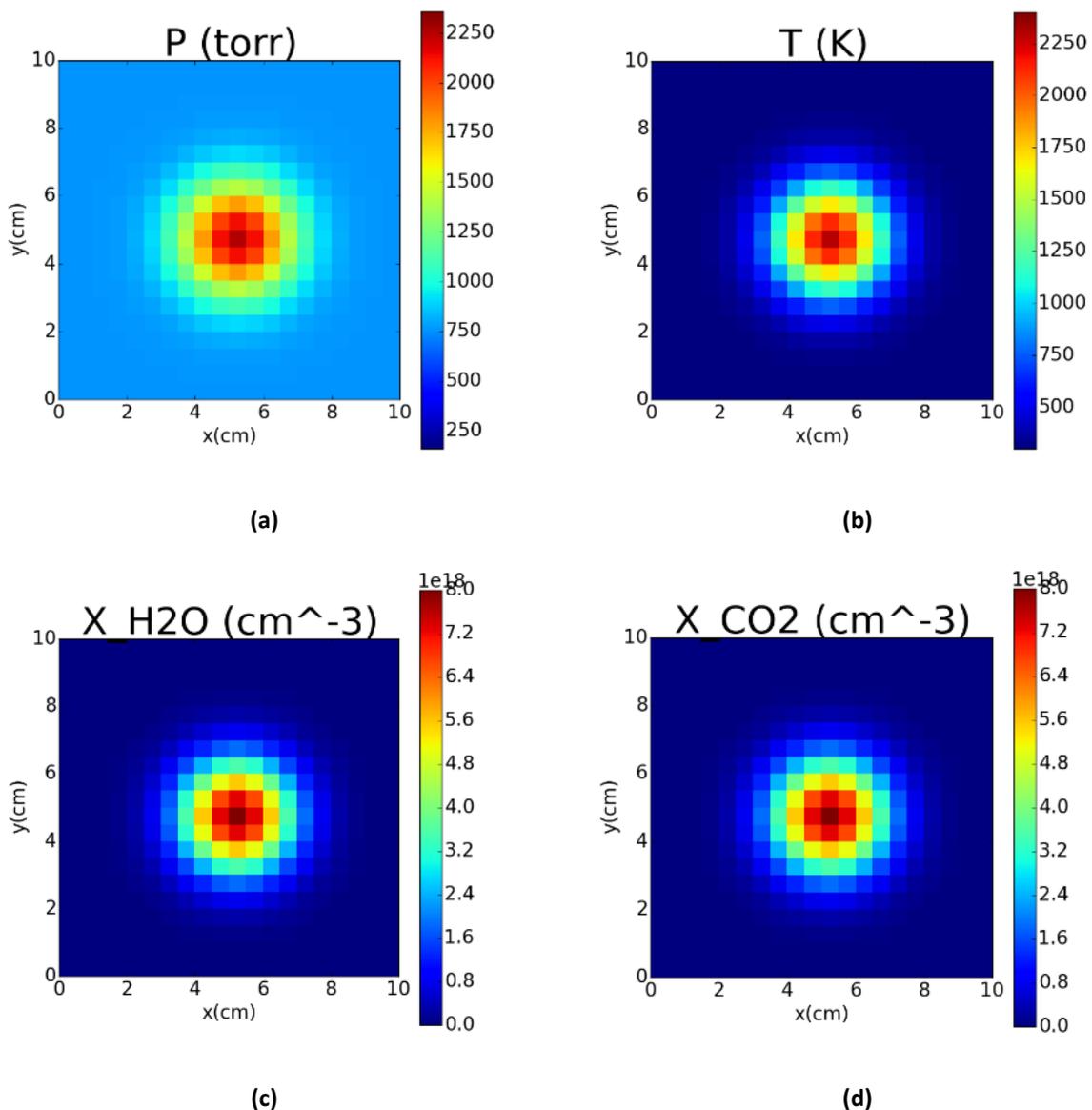


Figure 77 : Profils en deux dimensions des fantômes utilisés pour l'étude d'optimisation de la régularisation : (a) pression, (b) température, (c) concentration en H₂O et (d) concentration en CO₂

Notons que la Figure 77 présente les variables dans leurs unités d'origine mais que, comme cela a été dit (chapitre 3 I)4)a) page 114), en pratique, nous définissons un critère qui dépend de $X \cdot 10^{-16}$ pour tenir compte de la différence d'échelle entre les variables. A travers ces profils, nous simulons l'acquisition de spectres comme s'ils étaient acquis par le spectromètre caractérisant le H₂O et le CO₂ présenté dans la chapitre 2 III) 5) (page 63) émettant sur un intervalle de longueur d'onde compris entre 2,6976 μm et 2,6980 μm soit entre 3706,4 cm^{-1} et 3707,0 cm^{-1} .

En ce qui concerne la configuration des rayons de mesure, nous reproduisons la configuration de rayons utilisée sur le moteur de combustion de propergol (I)3) page 86) à la différence que les cinq faisceaux utilisés sont issus du même laser et balayent tous le même

intervalle spectral. Nous avons choisi d'utiliser cette configuration de faisceaux pour les simulations afin d'étudier un cas qu'il est possible de mettre en œuvre sur une configuration expérimentale réelle. Les collimateurs des faisceaux de mesure sont placés sur une couronne métallique dont le centre est décalé par rapport au centre de la zone d'étude (Figure 78). Chaque faisceau est numéroté de 1 à 5.

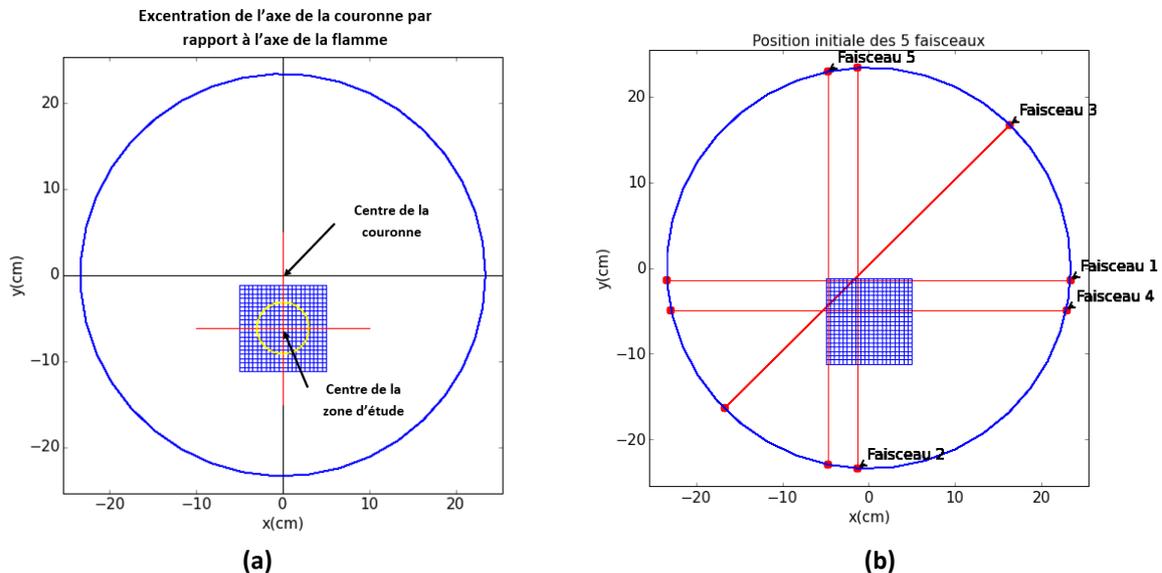


Figure 78 : Représentation (a) de l'excentration de la couronne par rapport au centre de la zone d'étude et (b) des positions initiales des 5 faisceaux sur la couronne avant la rotation

Pendant une acquisition, la couronne fait une rotation de 90° autour de la flamme et nous avons la possibilité de régler l'échantillonnage angulaire pour obtenir plus ou moins de positions de mesure au cours du balayage. Les faisceaux sont placés de manière à balayer le plus possible la zone étudiée avec le maximum de positions et d'angles différents au cours d'une rotation de 90° autour de la flamme. Dans le cas de cette étude, nous avons choisi d'utiliser pour chaque faisceau 40 positions angulaires de mesures au cours de la rotation, ce qui fait un total de 200 spectres, chaque spectre contenant 60 points spectraux (Figure 79).

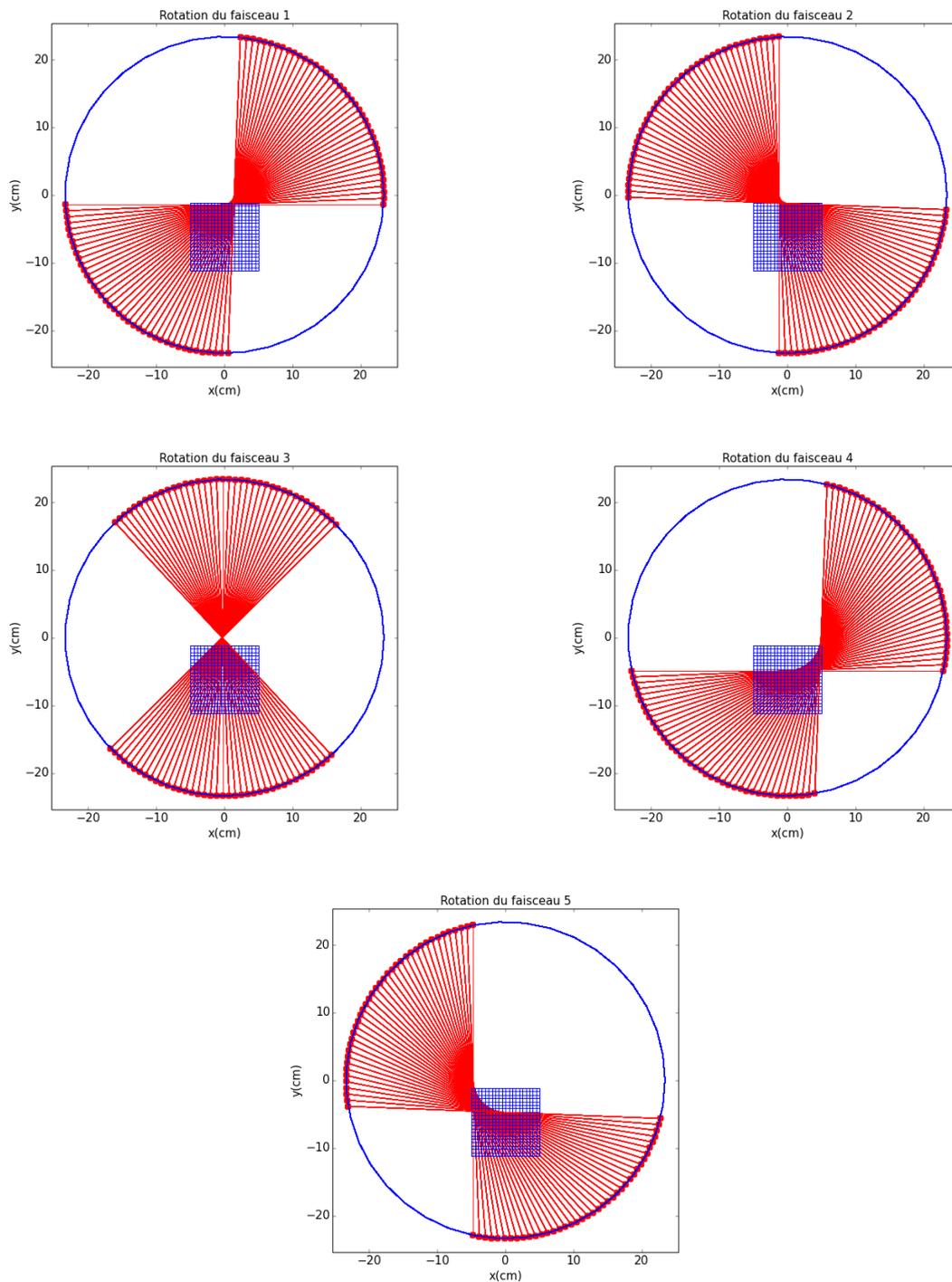


Figure 79 : Les différentes positions des 5 faisceaux de mesures au cours de la rotation de 90° de la couronne

Du bruit de mesure est rajouté numériquement sur ces spectres. Il s'agit d'un bruit Gaussien d'écart type $\sigma_{bruit} = 0,01$. Un exemple de spectre du faisceau 1 acquis au centre de la flamme est représenté sur la Figure 80 pour donner un aperçu du niveau de bruit sur les spectres.

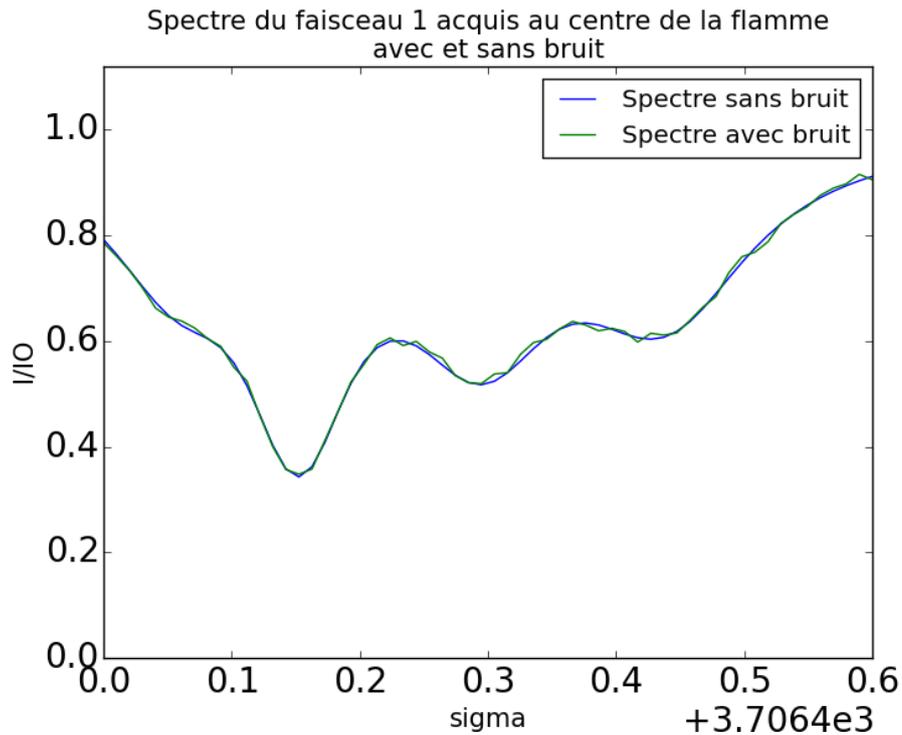


Figure 80 : Spectre du faisceau 1 acquis au centre de la flamme avec écart type du bruit à 0,01

Dans ces conditions de mesure, nous allons réaliser une reconstruction tomographique pour plusieurs valeurs du coefficient de régularisation λ .

Ces reconstructions seront effectuées avec une initialisation des grandeurs à reconstruire représentée sur la Figure 81. Ces initialisations sont également des fonctions Gaussiennes en deux dimensions qui sont plus larges et moins intenses que les fantômes. L'idée est de réaliser une reconstruction comme dans un cas expérimental où nous cherchons à initialiser l'algorithme avec des images en 2D selon un a priori sur la forme de l'objet à reconstruire qui ne correspondent pas parfaitement aux images réelles. Dans la pratique ces a priori seraient basés sur des informations fournies par des capteurs de pression ou des thermocouples placés dans les chambres de combustions qui peuvent donner des informations servant de conditions limites ou encore à partir d'informations fournies par des simulations numériques.

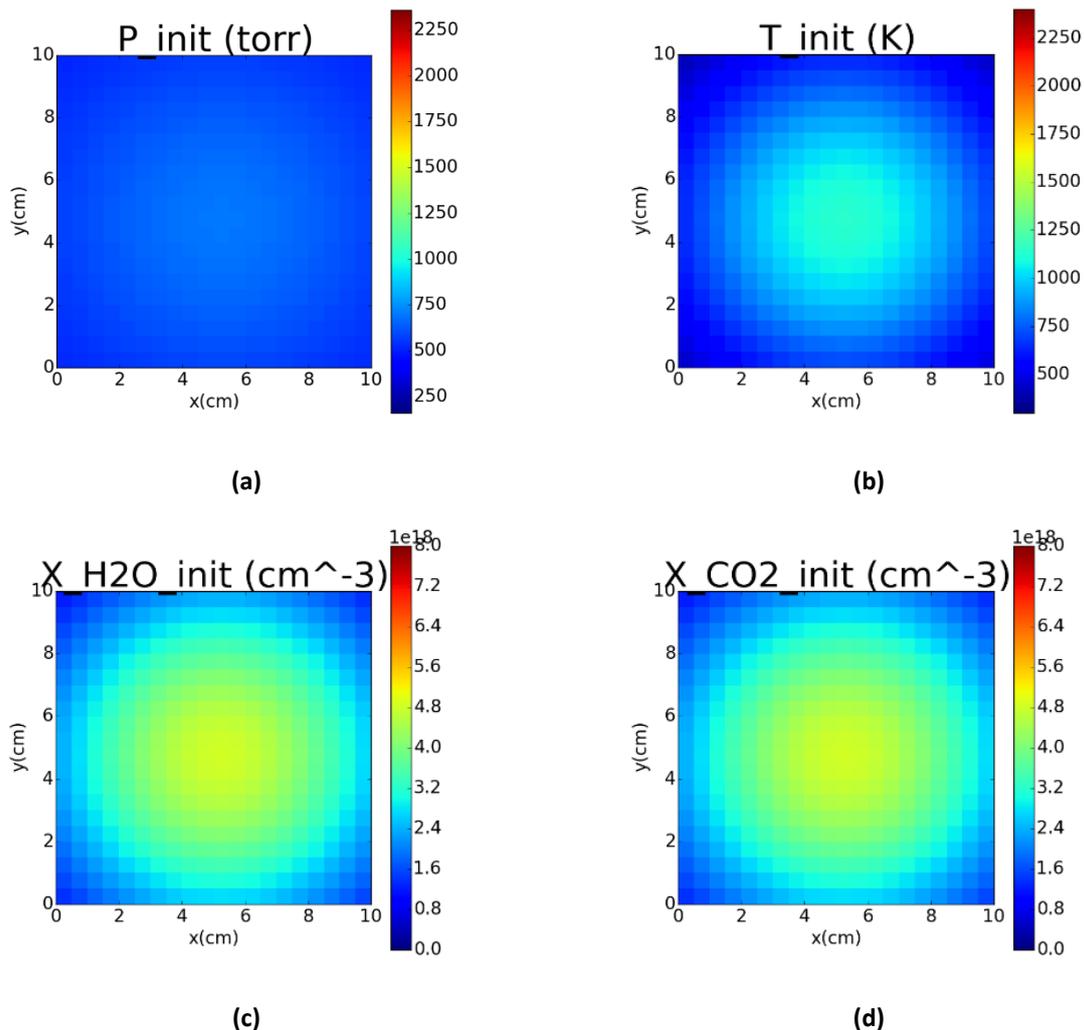


Figure 81 : Initialisation des images à reconstruire de (a) pression, (b) température, (c) concentration en H₂O et (d) concentration en CO₂

b) Grandeurs de contrôle de la qualité d'une reconstruction

Dans la suite de l'étude, quatre grandeurs de contrôle de la qualité de reconstruction vont être utilisées, nous allons tout d'abord les définir.

La première grandeur est l'**adéquation aux données**. Il s'agit du terme $C_{mctl} = \|\mathbf{res}\|^2$ défini dans l'équation (78). La seconde grandeur est le **critère global** noté C_{global} défini par l'équation (80).

La troisième grandeur utilisée est appelée l'**erreur de reconstruction** qui est définie comme la différence normalisée entre un fantôme et sa reconstruction. Pour la pression, la température et la concentration, ces écarts sont exprimés par :

$$\begin{cases} e_T = \frac{\|T_{sim} - T_{rec}\|^2}{\|T_{sim}\|^2} \\ e_P = \frac{\|P_{sim} - P_{rec}\|^2}{\|P_{sim}\|^2} \\ e_{X_k} = \frac{\|X_{k_{sim}} - X_{k_{rec}}\|^2}{\|X_{k_{sim}}\|^2} \end{cases} \quad (92)$$

La quatrième grandeur est l'**erreur globale** de reconstruction sera également utilisée. Elle est définie comme la somme des écarts de reconstruction de chaque paramètre :

$$e_G = e_P + e_T + e_{X_k} \quad (93)$$

c) Observation de l'effet de la régularisation

Dans cette configuration de mesure, nous avons fait une série de reconstructions tomographiques pour plusieurs valeurs du coefficient de régularisation λ . L'objectif est d'observer les effets de cette régularisation sur les résultats et de déterminer comment l'optimiser au mieux. Les reconstructions ont été faites pour un coefficient λ variant de $1,0 \cdot 10^{-16}$ à $1,0$. Des exemples de résultats de reconstructions sont représentés sur la Figure 82.

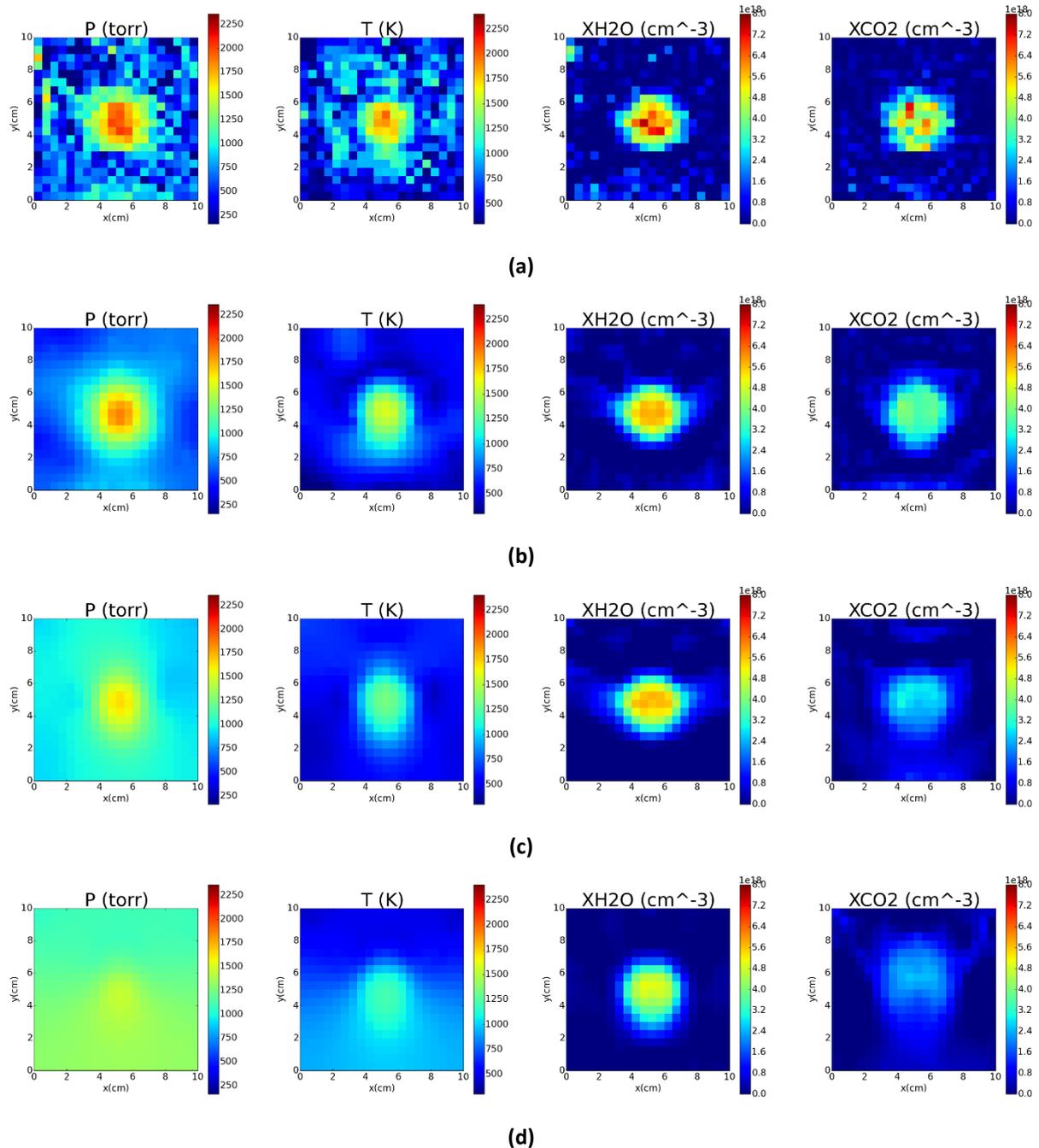


Figure 82 : Reconstructions tomographiques réalisées pour plusieurs valeurs du coefficient de régularisation, (a) $\lambda = 1, 0 \cdot 10^{-16}$, (b) $\lambda = 1, 0 \cdot 10^{-8}$, (c) $\lambda = 1, 0 \cdot 10^{-7}$ et (d) $\lambda = 1, 0 \cdot 10^{-6}$

L'analyse de ces différentes reconstructions tomographiques met en évidence les deux principaux effets suivants.

Premièrement, le taux de lissage est fortement dépendant de l'intensité de λ . En effet, pour une valeur de λ faible, la régularisation est quasiment inexistante et l'algorithme converge vers des champs 2D très bruités et très différents des fantômes. D'un autre côté, lorsque que le coefficient λ est très important, l'information ajoutée par la régularisation est trop importante par rapport aux données apportées par les spectres et on observe un lissage trop

important de la solution. Ces deux premiers résultats montrent l'importance d'optimiser correctement la régularisation.

Deuxièmement, la reconstruction est différente pour chaque paramètre. Pour un coefficient de régularisation donné, la qualité de la reconstruction peut être différente pour chacun des paramètres de la pression, la température ou pour les différentes concentrations chimiques. En effet, les résultats de reconstruction pour $\lambda = 1,0 \cdot 10^{-8}$ montre que l'effet de lissage de la régularisation est plus important sur la température que sur la concentration en H_2O . Ceci n'est pas étonnant puisque les grandeurs recherchées n'ont pas les mêmes valeurs, malgré la renormalisation approximative que nous avons introduite. Aussi, les spectres d'absorption n'ont pas tous la même sensibilité à ces grandeurs. En effet, la concentration a un effet linéaire sur les spectres tandis que la pression et la température ont un effet non-linéaire sur le profil de Voigt et la force de raie. Ainsi, il semble possible qu'un coefficient de régularisation λ soit optimal pour reconstruire par exemple la température mais pas pour reconstruire la pression ou la concentration des espèces chimiques. Il est possible d'observer plus précisément ce phénomène en observant les erreurs de reconstruction de chaque profil reconstruit en fonction de λ représentées sur la Figure 83.

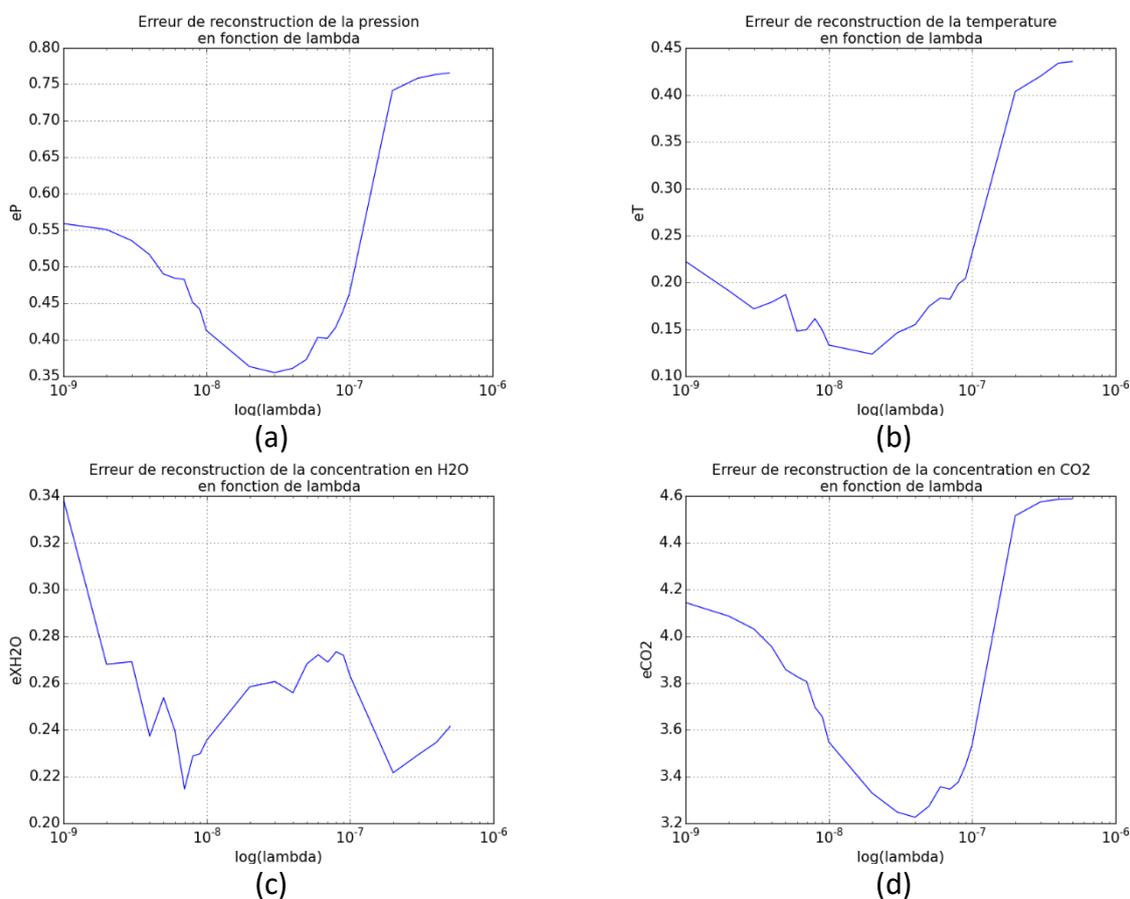


Figure 83 : Représentation de l'erreur de reconstruction en fonction de λ pour (a) la pression, (b) la température, (c) la concentration en H_2O et (d) la concentration en CO_2

Les courbes d'erreur de pression, température, concentration en H₂O et en CO₂ passent toutes par un minimum lorsque la reconstruction est la meilleure (on peut noter que la concentration en H₂O présente deux minima importants cependant une observation des profils de H₂O reconstruits montre que sur la majeure partie de l'intervalle en λ , les profils varient très peu : ces minima ne sont donc pas significatifs).

Ces résultats montrent que le minimum n'est pas atteint pour chaque profil pour la même valeur de λ . Ainsi, il est nécessaire pour améliorer les reconstructions d'adapter la régularisation à chaque grandeur physique à reconstruire. Ce qui nous a donc guidés vers le choix d'un modèle de régularisation avec un coefficient de régularisation propre à chaque grandeur à reconstruire. Le critère à minimiser de l'équation (80) devient donc :

$$C_{global} = \|\mathbf{p}_m - \mathbf{p}_{calc}(\mathbf{P}, \mathbf{T}, \mathbf{X}_k)\|^2 + \lambda_P R_P + \lambda_T R_T + \lambda_{X_k} R_{X_k} \quad (94)$$

Avec :

$$\begin{cases} R_P = \mathbf{P}^T \mathbf{D}_x^T \cdot \mathbf{D}_x \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P}^T \mathbf{D}_y^T \cdot \mathbf{D}_y \cdot \mathbf{P} \\ R_T = \mathbf{T}^T \mathbf{D}_x^T \cdot \mathbf{D}_x \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T}^T \mathbf{D}_y^T \cdot \mathbf{D}_y \cdot \mathbf{T} \\ R_{X_k} = \mathbf{X}_k^T \mathbf{D}_x^T \cdot \mathbf{D}_x \cdot \mathbf{X}_k + \mathbf{X}_k^T \mathbf{D}_y^T \cdot \mathbf{D}_y \cdot \mathbf{X}_k \end{cases} \quad (95)$$

Avec $(\lambda_P, \lambda_T, \lambda_{X_k})$ les coefficients de régularisation appliqués à la pression, à la température et aux concentrations chimiques recherchées indiquées k . Ainsi, pour effectuer la meilleure reconstruction tomographique possible, il est nécessaire d'optimiser les coefficients de régularisation de chaque grandeur à reconstruire.

L'objectif de l'étude de ce chapitre a donc été d'étudier une technique d'optimisation de la régularisation dans un cas non-linéaire de reconstruction de plusieurs paramètres.

2) Optimisation de la régularisation

a) Simplification du modèle

Dans le cas de l'optimisation de la régularisation de plusieurs paramètres, il a été choisi d'étudier un modèle de reconstruction par TDLAT simplifié. Nous avons choisi de réaliser une reconstruction sur seulement deux grandeurs qui sont la concentration en H₂O et la température (Figure 84). De cette manière, il va être possible de réaliser une optimisation de deux paramètres ayant chacun une influence sur les spectres d'absorption mais également avec une grandeur physique ayant une influence linéaire sur les spectres (la concentration) et une grandeur ayant une influence non-linéaire (la température). Dans ce

cas, la pression et la concentration en CO₂ seront considérées comme connues et uniformes sur toute la surface de la zone étudiée. Le critère global à minimiser devient donc :

$$C_{global} = \| \mathbf{p}_m - \mathbf{p}_{calc}(\mathbf{T}, \mathbf{X}_{H_2O}) \|^2 + \lambda_{X_{H_2O}} R_{X_{H_2O}} + \lambda_T R_T \quad (96)$$

Avec :

$$\begin{cases} R_T = \mathbf{T}^T \mathbf{D}_x^T \cdot \mathbf{D}_x \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T}^T \mathbf{D}_y^T \cdot \mathbf{D}_y \cdot \mathbf{T} \\ R_{X_{H_2O}} = \mathbf{X}_{H_2O}^T \mathbf{D}_x^T \cdot \mathbf{D}_x \cdot \mathbf{X}_{H_2O} + \mathbf{X}_{H_2O}^T \mathbf{D}_y^T \cdot \mathbf{D}_y \cdot \mathbf{X}_{H_2O} \end{cases} \quad (97)$$

La configuration de faisceaux étudiée est toujours celle de la Figure 79 avec le même niveau de bruit appliqué sur les spectres.

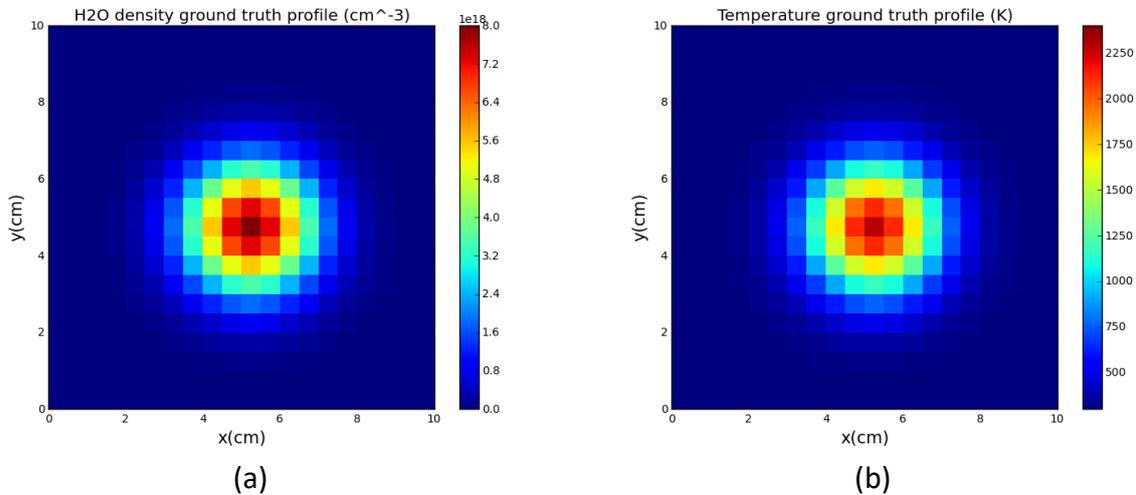


Figure 84 : Profils en deux dimensions de (a) concentration en H₂O et (b) de température

b) Optimisation des paramètres de régularisation

Dans la littérature, le coefficient λ est optimisé par l'utilisation de la méthode de la L-curve (Figure 15 dans le chapitre 1 III)3) page 46). Cette courbe est obtenue en traçant le terme de régularisation par exemple $R_{X_{H_2O}}$ pour la concentration en fonction du terme d'adéquation aux données C_{mcnl} pour plusieurs valeurs de $\lambda_{X_{H_2O}}$. Dans cette partie, nous allons tracer ces courbes pour la concentration en H₂O et pour la température et déterminer s'il est possible de les exploiter pour optimiser les coefficients de régularisations $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T .

Tout d'abord, une première série de reconstructions sera faite sur la concentration en fixant la température (considérée comme connue) en faisant varier le coefficient de régularisation

appliqué à la concentration $\lambda_{X_{H_2O}}$. Le résultat devrait donc être une L-curve typique d'un cas de tomographie linéaire. De cette manière, on pourra récupérer une valeur de $\lambda_{X_{H_2O}}$ optimale pour cette configuration de mesures.

Dans un second temps, le même calcul sera effectué sur la température en fixant la concentration en H_2O . L'idée est de voir si la représentation de la régularisation en fonction de l'adéquation aux données se comporte comme dans le cas linéaire et s'il est possible de déterminer également un λ_T optimal.

Les simulations seront effectuées avec la même configuration de rayons que celle représentée sur la Figure 79, sur le même intervalle spectral et en ajoutant un bruit de même écart type de 0,01 sur tous les spectres d'absorption.

Dans le cas de la concentration en H_2O , les différentes reconstructions sont faites pour un coefficient $\lambda_{X_{H_2O}}$ variant de $1,0 \cdot 10^{-16}$ à 1,0. Comme le montre la Figure 85. La représentation de la régularisation en fonction de l'adéquation aux données correspond bien à une L-curve obtenue pour un cas linéaire.

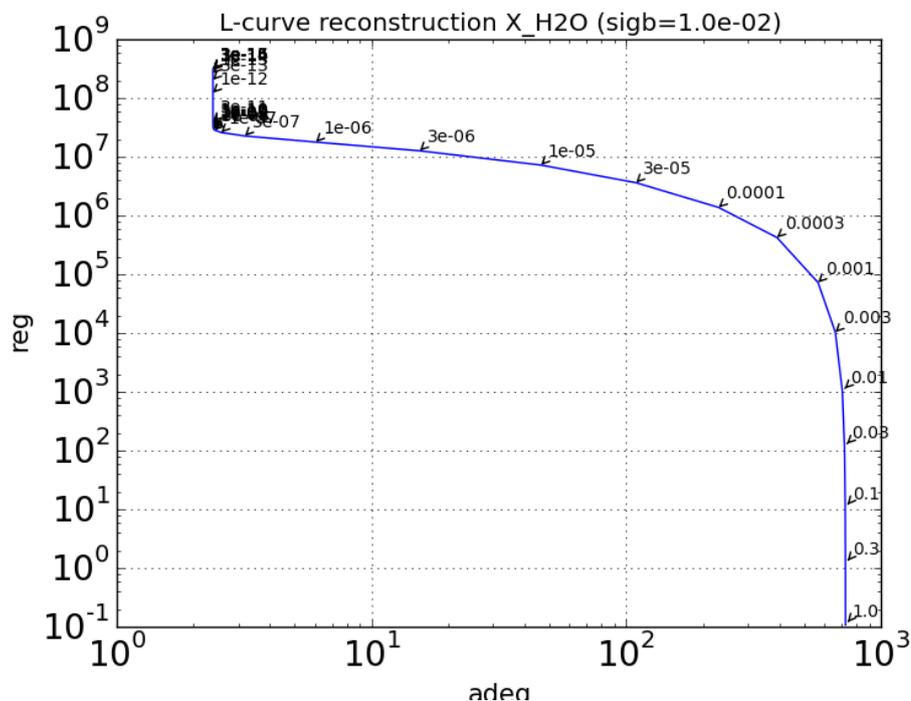


Figure 85 : L-curve de la concentration en H_2O à température fixée

Cette courbe représente les effets de la régularisation en fonction de l'adéquation aux données. Le coefficient $\lambda_{X_{H_2O}}$ optimal est obtenu au point anguleux situé dans la partie supérieure de la courbe pour lequel :

- Le terme d'adéquation est localement minimal.

- La régularisation est localement minimale, ce qui signifie que l'ajout d'information a priori n'est pas trop important dans la minimisation du critère au détriment des informations provenant des mesures.

Dans notre exemple, le point qui respecte à la fois ces deux conditions est donc $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-7}$. Pour cette valeur, la reconstruction tomographique fournit un profil très proche du fantôme initial. Il est possible de vérifier que cette valeur est bien optimale au sens de la distance au fantôme recherché en traçant l'erreur de reconstruction $e_{X_{H_2O}}$ de la concentration en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$, représentée sur la Figure 86.

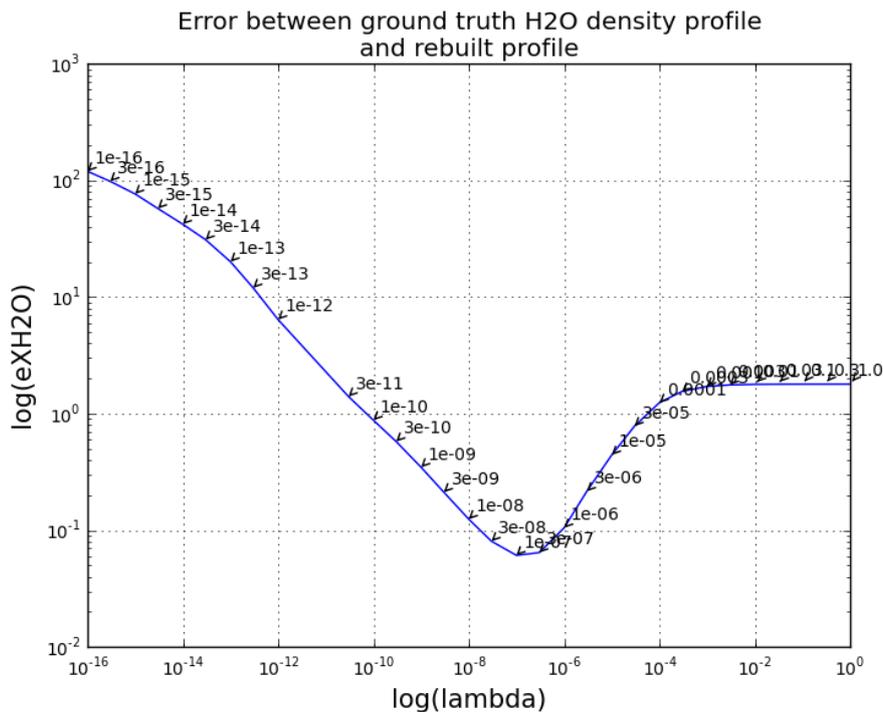


Figure 86 : Représentation de l'erreur de reconstruction $e_{X_{H_2O}}$ en fonction du coefficient de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}}$

La courbe représentant l'erreur de reconstruction $e_{X_{H_2O}}$ en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ montre que la valeur optimale du coefficient de régularisation obtenue avec la L-curve fournit bien l'erreur de reconstruction la plus faible. Sur la Figure 87, où plusieurs exemples de reconstruction avec plusieurs régularisations différentes sont représentés, on constate que, comme attendu, dans le cas d'un $\lambda_{X_{H_2O}}$ trop faible le résultat converge vers une solution bruitée et très éloignée de la forme du fantôme, tandis que pour un $\lambda_{X_{H_2O}}$ élevé la régularisation devient trop importante et l'image reconstruite tend vers une image uniforme à cause d'un lissage trop important.

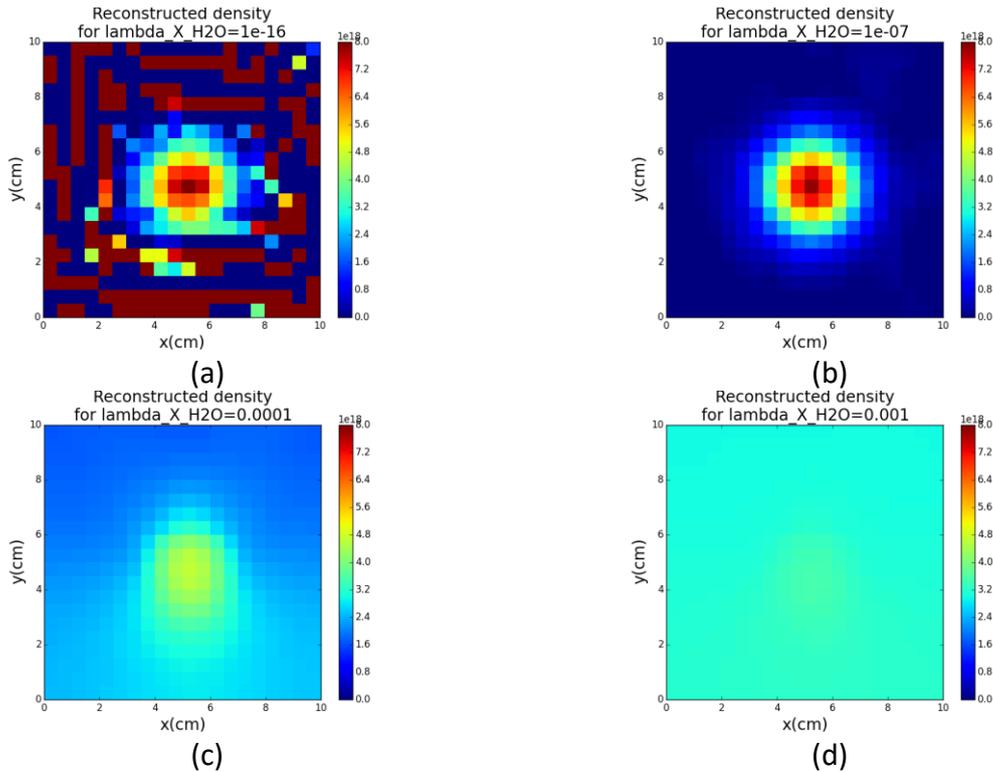


Figure 87 : Différents résultats de reconstructions de la concentration en H₂O à température fixée pour plusieurs valeurs du coefficient de régularisation : (a) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 10^{-16}$ une valeur trop faible, (b) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 10^{-7}$ la valeur optimale, (c) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 10^{-4}$ et (d) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 10^{-3}$ des valeurs trop importantes

Dans le cas de la température, le lien entre le profil à reconstruire et les spectres est non-linéaire. Le tracé de la L-curve n'est pas prévu pour ce cas de reconstruction. Nous avons tout de même tracé la courbe représentant la régularisation en fonction de l'adéquation aux données pour des reconstructions avec plusieurs valeurs de λ_T en considérant cette fois-ci la concentration fixée et connue. La courbe obtenue est représentée sur la Figure 88.

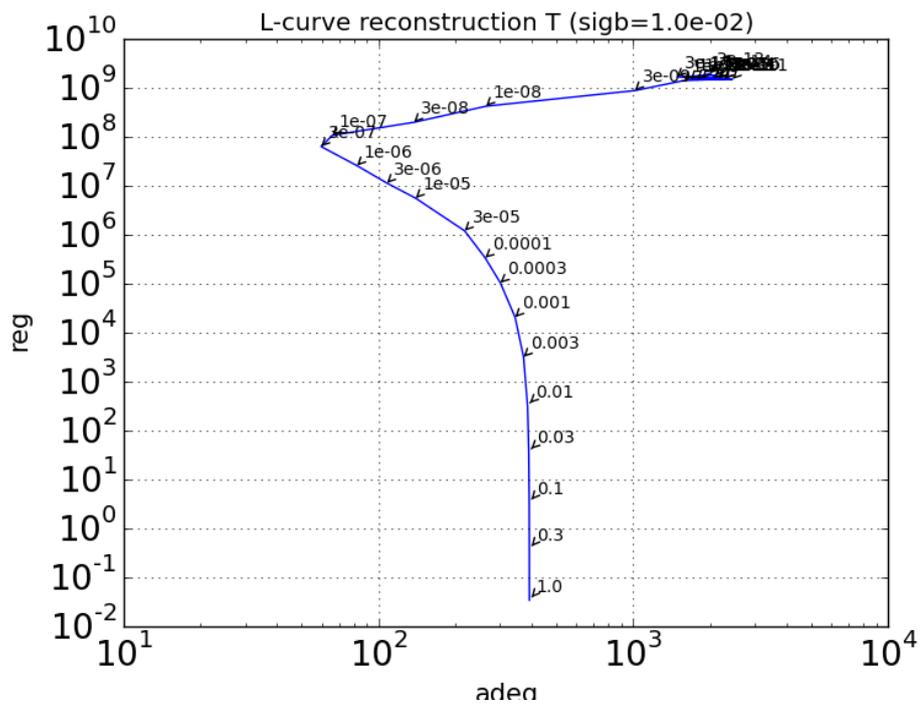


Figure 88 : Représentation de la L-curve de la température à concentration en H₂O fixée

Dans ce cas, la courbe n'a pas le comportement attendu d'une L-curve. En effet, pour les fortes valeurs de λ_T , la courbe évolue de la même manière que pour la concentration avec des résultats de reconstructions tendant vers des images constantes sur toutes leurs surfaces. Ensuite, l'adéquation aux données diminue lorsque le paramètre λ_T diminue. La courbe semble passer par un point particulier pour $\lambda_T = 3,0 \cdot 10^{-7}$ puis l'adéquation aux données augmente de même que la régularisation. Le comportement de la courbe pour les faibles valeurs de λ_T traduisent peut-être la convergence vers un minimum local lorsque la régularisation est faible. Ce comportement ne correspondant pas à celui d'une L-curve linéaire, il n'est pas possible de déterminer un λ_T optimal. Ainsi, ce calcul montre que cette technique n'est pas adaptée pour optimiser une reconstruction tomographique non-linéaire. Il a donc été choisi d'utiliser une autre méthode pour déterminer une approximation d'un λ_T optimal. Pour cela, nous avons choisi de tracer l'erreur de reconstruction de la température e_T en fonction du coefficient de régularisation λ_T , ce qui donne la courbe représentée sur la Figure 89.

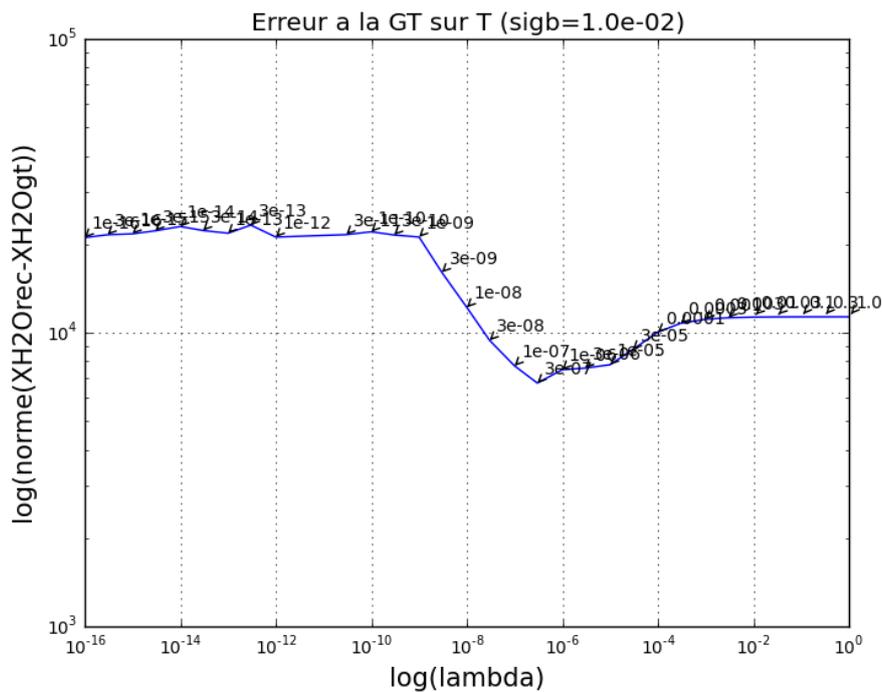


Figure 89 : Représentation de l'erreur de reconstruction e_T en fonction du coefficient de régularisation λ_T

Cette courbe montre que sur cet intervalle de λ_T la norme de cet écart passe par un minimum pour $\lambda_T = 3,0 \cdot 10^{-7}$. On peut constater que ce coefficient λ_T optimal correspond au point de rebroussement particulier de la courbe de la Figure 88. Cependant, pour être certain que ce phénomène est reproductible dans d'autres cas, il faudrait une étude plus approfondie de ce type de courbes dans un cas non-linéaire (ce qui pourrait constituer une perspective à cette étude). Des exemples de reconstructions pour plusieurs valeurs de λ_T sont représentées sur la Figure 90.

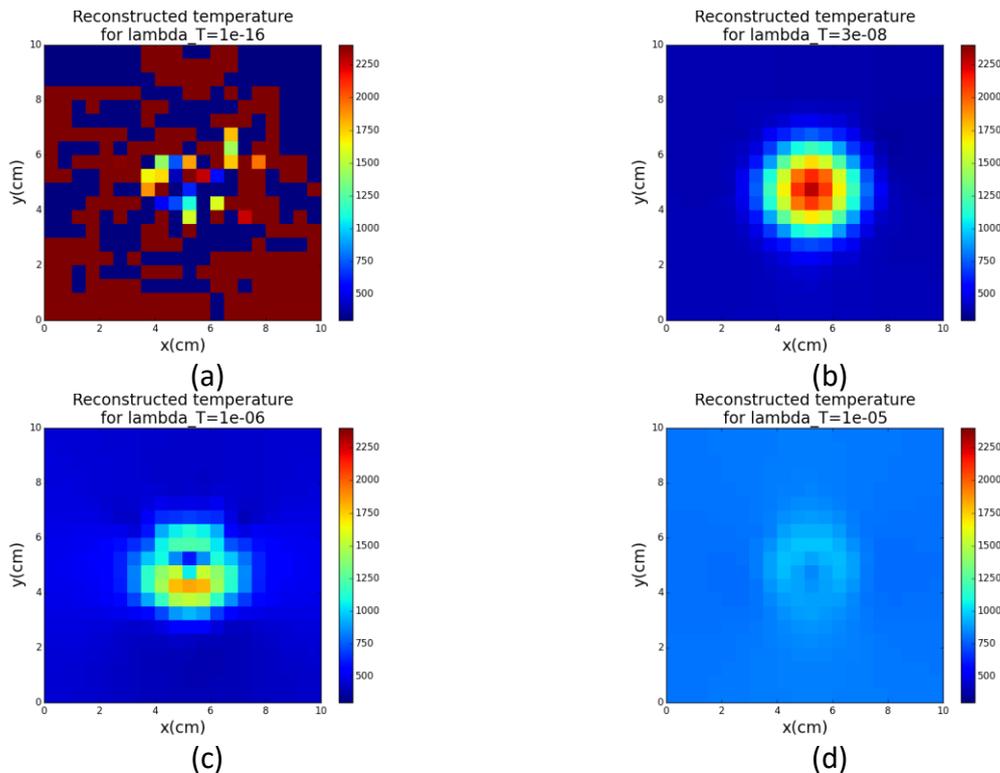


Figure 90 : Différents résultats de reconstructions de la température à concentration en H₂O fixée pour plusieurs valeurs du coefficient de régularisation : (a) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 10^{-16}$ une valeur trop faible, (b) $\lambda_{X_{H_2O}} = 3, 0. 10^{-8}$ la valeur optimale, (c) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 16$ et (d) $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0. 10^{-5}$ des valeurs trop importantes

Une conclusion importante de ces deux études séparées est que les coefficients de régularisation optimaux (au sens de l'erreur de reconstruction d'une variable, l'autre étant fixée à sa valeur vraie) ne sont pas les mêmes pour la concentration en H₂O et la température.

c) Optimisation simultanée des paramètres de régularisation

Dans la pratique, il est impossible de connaître à l'avance l'un des deux profils et la reconstruction tomographique se fait sur les deux profils simultanément. Ainsi, il est important de vérifier si les deux coefficients de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T déterminés pour des reconstructions séparées ont le même effet lorsque les reconstructions sont simultanées et que les deux profils influent sur la reconstruction des spectres.

Si on effectue une reconstruction tomographique avec la paire $(\lambda_{X_{H_2O}}, \lambda_T)$ déterminée séparément avec les courbes d'erreur de reconstructions, on obtient les résultats représentés sur la Figure 91.

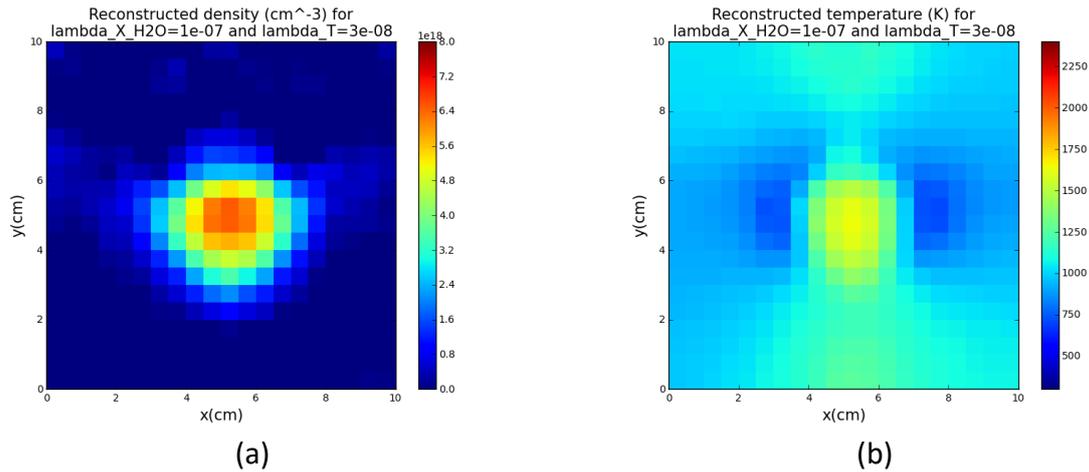


Figure 91 : Résultats de reconstruction tomographique (a) du profil de concentration en H₂O et (b) du profil de température en utilisant la paire de coefficients de régularisation $(\lambda_{X_{H_2O}}, \lambda_T)$ déterminés à partir des courbes d'erreurs

Si la reconstruction obtenue pour la concentration apparaît correcte, celle de la température est beaucoup trop lisse, montrant que le paramètre choisi pour cette variable est trop important. Ce calcul montre qu'un coefficient de régularisation déterminé pour un profil reconstruit seul n'est pas forcément celui qui sera optimal pour une reconstruction de tous les profils simultanément. Ce qui montre que les coefficients $(\lambda_{X_{H_2O}}, \lambda_T)$ doivent être optimisés dans les conditions d'une reconstruction simultanée de la concentration en H₂O et de la température.

Ainsi, pour effectuer cette optimisation, il a été choisi de faire une série reconstructions en faisant varier simultanément les valeurs de la paire de coefficients $(\lambda_{X_{H_2O}}, \lambda_T)$. Pour chaque paire de coefficients utilisée, on calcule l'erreur globale de reconstruction correspondant à la somme des erreurs de reconstructions de la concentration en H₂O et de la température :

$$e_G = \frac{\|X_{H_2O_{sim}} - X_{H_2O_{rec}}\|^2}{\|X_{H_2O_{sim}}\|^2} + \frac{\|T_{sim} - T_{rec}\|^2}{\|T_{sim}\|^2} \quad (98)$$

Ensuite, une cartographie en deux dimensions représentant cette erreur globale est tracée pour l'ensemble des valeurs de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T testées. Cette cartographie est représentée sur la Figure 92.

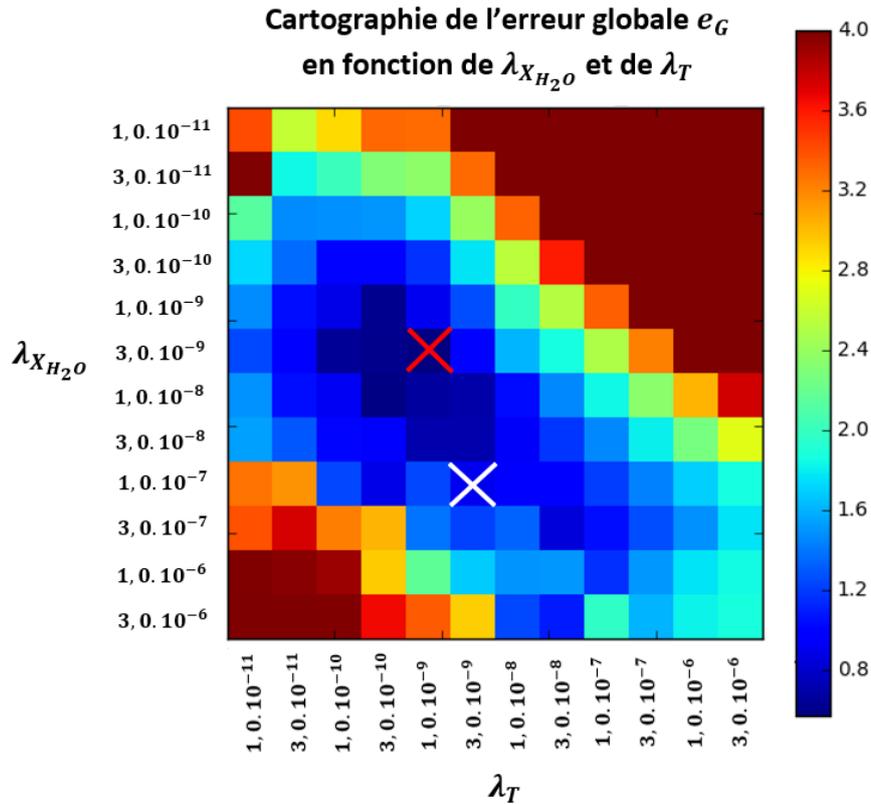


Figure 92 : Erreur globale de reconstruction e_G en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et de λ_T avec la croix blanche représentant le point correspondant aux coefficients déterminés par les courbes d'erreurs séparées et la croix rouge représentant le minimum de la cartographie de l'erreur globale.

Ainsi, le minimum de l'erreur globale e_G donne la paire $(\lambda_{X_{H_2O}}, \lambda_T)$ optimale pour cette reconstruction tomographique. Dans ce cas, les valeurs optimales sont $\lambda_{X_{H_2O}} = 3,0 \cdot 10^{-9}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-9}$. Les résultats de reconstructions simultanées de la concentration en H₂O et de la température avec ces coefficients sont représentés sur la Figure 93.

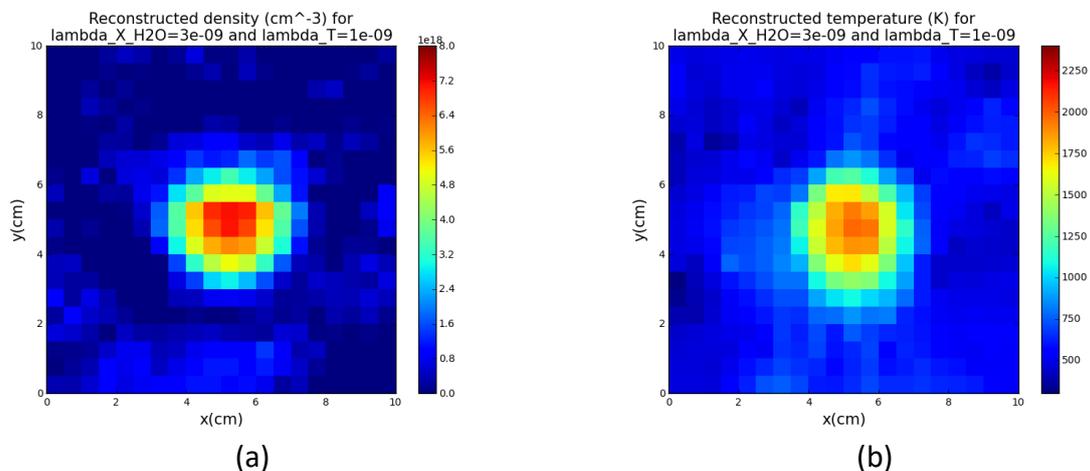


Figure 93 : Résultats de reconstruction tomographique (a) du profil de concentration en H₂O et (b) du profil de température en utilisant la paire de coefficients de régularisation $(\lambda_{X_{H_2O}}, \lambda_T)$ déterminés à partir de la représentation de l'erreur de reconstruction globale e_G

On constate que les coefficients de régularisation optimaux déterminés par une série de reconstructions simultanées amenant des reconstructions de meilleure qualité notamment sur la température sont différents de ceux déterminés par deux séries de reconstructions séparées. Ce qui montre donc que l'optimisation de la régularisation doit tenir compte de la reconstruction des deux profils en même temps.

d) Bilan de l'étude de l'effet de la régularisation

Cette étude sur l'effet de la régularisation a permis d'observer plusieurs phénomènes. Le premier est que pour une reconstruction de plusieurs profils différents pour lesquels les spectres mesurés présentent une sensibilité différente, chaque profil a besoin d'un coefficient de régularisation adapté. Ces coefficients sont optimisés par des réglages simultanés des coefficients de régularisation en tenant compte de leur effet sur la reconstruction de l'ensemble des profils. Une méthode numérique a été mise en œuvre à partir du calcul de l'erreur de reconstruction en fonction des coefficients de régularisation.

Cependant, dans le cas du traitement de spectres expérimentaux, il est impossible de tracer des cartographies d'erreur en fonction des coefficients $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T car le profil de la flamme est a priori inconnu. Or, l'optimisation de la régularisation est primordiale pour aboutir à une reconstruction tomographique correcte. D'autant que cette régularisation permet de compenser des erreurs liées au bruit de mesure. La régularisation doit aussi être adaptée à la configuration expérimentale en fonction du bruit de mesure, du nombre de faisceaux disponible et de l'intervalle spectral utilisé.

Cette adaptation est effectuée en utilisant une méthode d'optimisation paramétrique basée sur les contraintes des données expérimentales. Pour une configuration expérimentale donnée, la méthode consiste dans un premier temps à reproduire numériquement le mode d'acquisition des spectres d'absorption avec les positions et angles des faisceaux, le nombre de positions angulaires de la couronne de balayage, le nombre de points par spectres et niveaux de bruit sur les mesures. Cette configuration de mesure avec les contraintes expérimentales définies est appliquée à des fantômes simulés (a priori de formes proches des objets réels si des informations a priori sur ces objets sont disponibles) et une optimisation de la régularisation par calcul de l'erreur globale comme dans la section précédente est réalisée. La logique de cette approche est que si les conditions expérimentales ont été correctement modélisées, les paramètres de régularisation optimaux déterminés puissent se transposer au traitement des spectres expérimentaux.

Ainsi, afin d'observer comment se comporte l'algorithme en fonction des conditions expérimentales, nous allons réaliser une étude paramétrique constituée de plusieurs séries de reconstructions tomographiques avec optimisation de la régularisation sur un profil de

flamme donné mais en changeant à chaque reconstruction les contraintes appliquées aux données.

III) Evaluation des capacités de reconstruction de l'algorithme

Dans cette partie du chapitre, nous réalisons une étude paramétrique de l'algorithme de reconstruction tomographique. L'objectif est d'observer son comportement et d'évaluer la qualité des reconstructions en tenant compte de contraintes multiples liées aux configurations de mesures, à l'algorithme utilisé et aux conditions expérimentales. Cette étude est constituée de trois parties.

Premièrement, nous allons choisir un objet à reconstruire et fixer une initialisation à l'algorithme. Ensuite, nous allons étudier l'impact sur la reconstruction des paramètres liés aux conditions expérimentales à savoir : le bruit de mesures, le nombre de positions angulaires des faisceaux et le nombre de points par spectres. L'objectif est de déterminer quelles configurations de mesures sont les plus adaptées en fonction du niveau de bruit sur les spectres. Pour chaque reconstruction le résultat retenu sera celui qui est obtenu pour les coefficients de régularisation optimaux au sens de l'erreur de reconstruction par rapport au fantôme. Nous étudierons donc également comment évoluent les coefficients de régularisation optimaux en fonction du bruit et des configurations de mesures.

Dans un second temps, nous allons étudier l'effet de l'initialisation sur la qualité des reconstructions. Pour cela, nous allons fixer une configuration de mesures (nombre de positions des faisceaux et nombre de points par spectres) et nous ferons une série de reconstructions à partir de plusieurs initialisations de l'algorithme. L'objectif est ici d'observer comme évolue la solution en fonction de l'initialisation.

A partir des résultats des deux premières parties de l'étude, nous allons retenir des réglages optimaux de régularisation, une initialisation, un nombre de positions angulaires et un nombre de points par spectres adaptés à l'objet à reconstruire. L'idée est de définir un protocole de réglage des paramètres (régularisation, configurations de mesures) en fonction des informations a priori que nous avons sur l'objet et du niveau de bruit sur les spectres.

Enfin, la dernière partie de l'étude consiste à appliquer ces réglages sur un autre objet afin d'évaluer la validité du protocole de réglage sur des objets inconnus comme ceux qui seront rencontrés dans les problèmes réels.

1) Première partie de l'étude paramétrique : effets du bruit et optimisation de la configuration de mesures

Dans cette partie de l'étude paramétrique, nous allons étudier la qualité de la reconstruction tomographique en fonction de la configuration de mesures pour différents nombres de positions angulaire et différents nombres de points par spectres.

Pour cela, nous étudions le modèle de flamme représenté sur la Figure 94 à savoir la reconstruction d'un profil 2D de concentration en H₂O et de température.

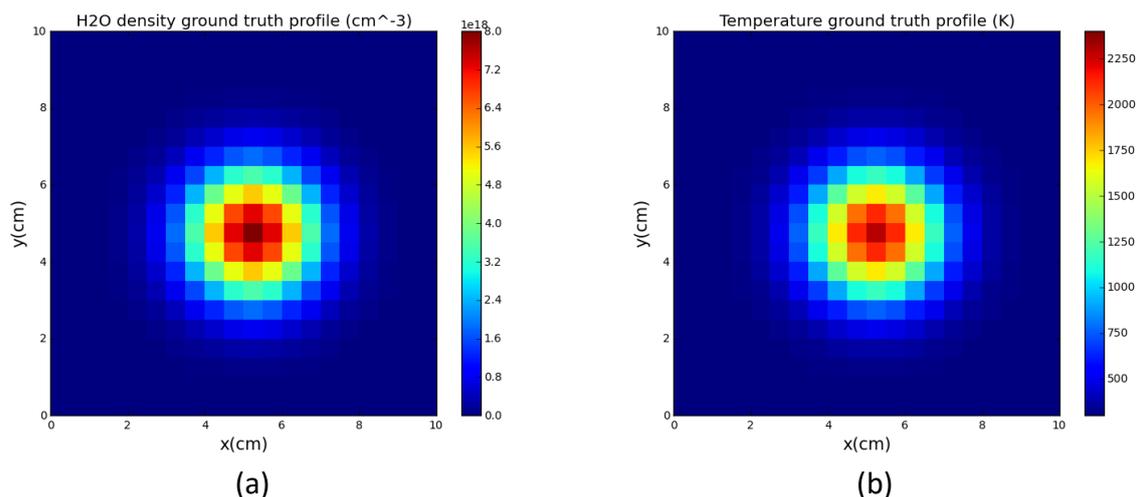


Figure 94 : Profils en deux dimensions de (a) concentration en H₂O et (b) de température utilisés pour l'étude paramétrique

L'intervalle spectral utilisé est fixé et est compris entre $3706,4 \text{ cm}^{-1}$ et $3707,0 \text{ cm}^{-1}$. L'initialisation de l'algorithme se fera avec une fonction Gaussienne en deux dimensions représentée sur la Figure 95.

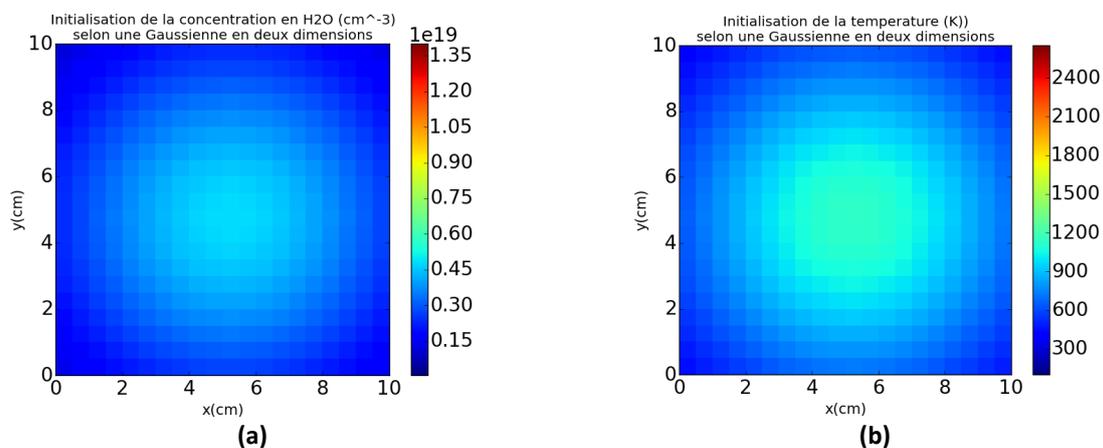


Figure 95 : Initialisation (a) de la concentration en H₂O et (b) de la température

Nous allons étudier trois niveaux de bruits de mesures distincts appliqués sur les spectres d'absorption. Il s'agit d'un bruit blanc qui est ajouté sur des spectres générés numériquement à partir des profils simulés de la Figure 84. Le bruit appliqué est un bruit blanc d'écart type noté ρ_{bruit} . Nous allons étudier trois niveaux de bruit différents. La Figure 96 montre une représentation de ces trois niveaux de bruits sur un spectre acquis au bord de la zone d'étude en dehors de la flamme, c'est-à-dire dans une zone où aucune raie d'absorption n'est visible.

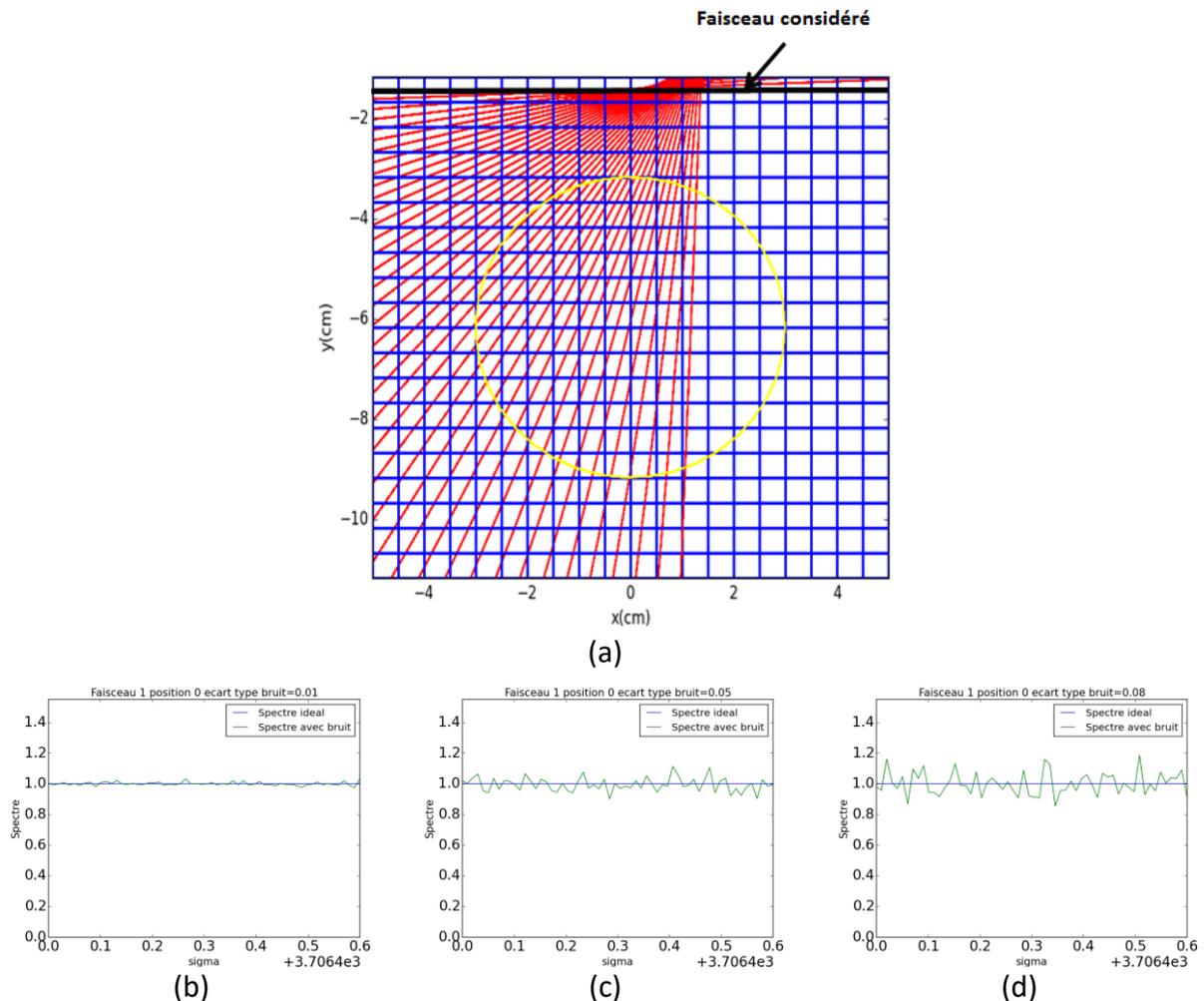


Figure 96 : Trois niveaux de bruits sur les spectres d'absorption simulés pour un même rayon traversant (a) la zone d'étude en dehors de la flamme pour (b) $\rho_{bruit} = 0,01$, (c) $\rho_{bruit} = 0,05$ et (d) $\rho_{bruit} = 0,08$

La Figure 97 montre ces trois niveaux de bruits sur un spectre correspondant à la traversée de la flamme, c'est-à-dire dans une zone où les raies d'absorption sont les plus intenses.

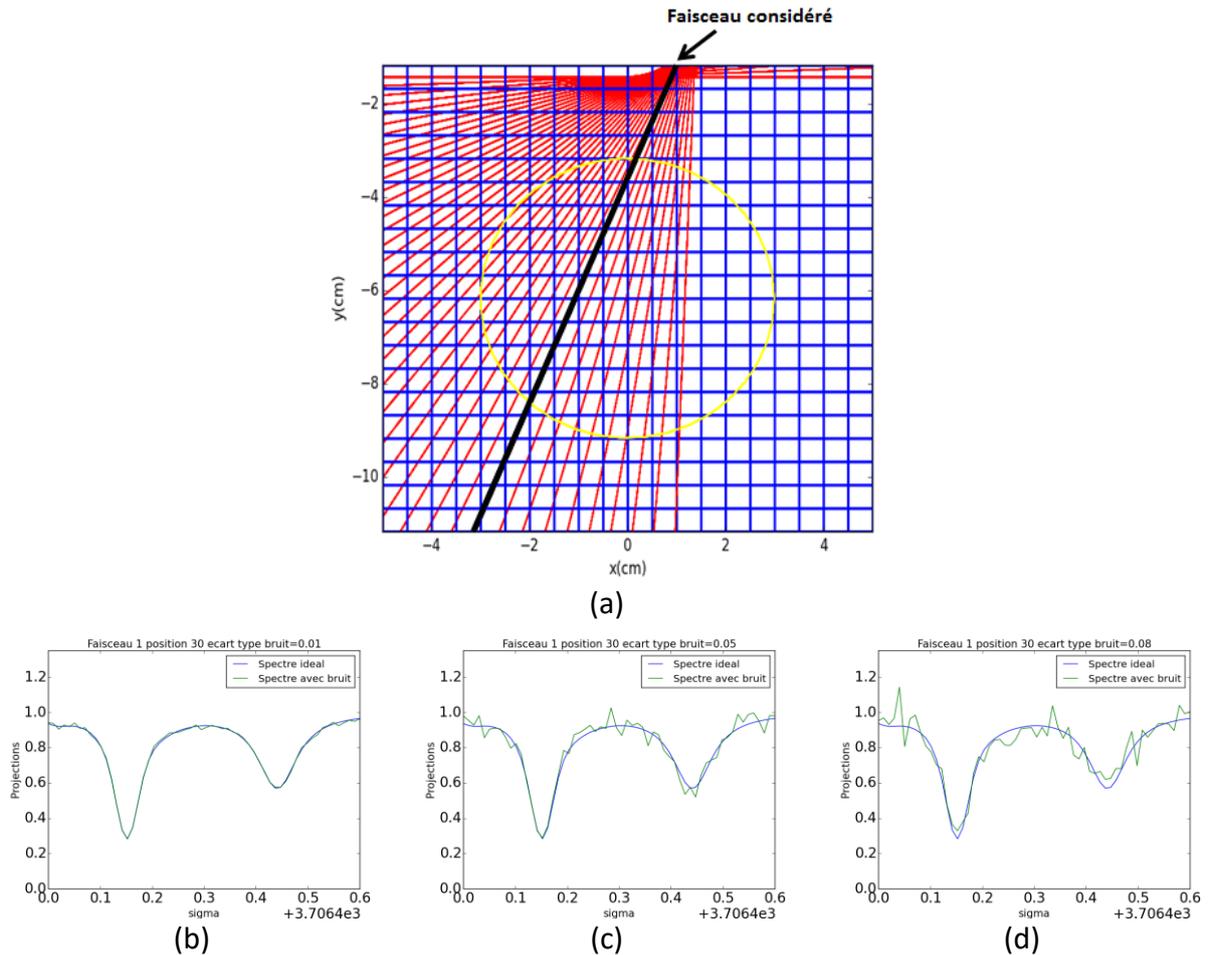


Figure 97 : Représentation de trois niveaux de bruits sur les spectres d'absorption simulés pour un même rayon traversant (a) la flamme pour (b) $\rho_{bruit} = 0,01$, (c) $\rho_{bruit} = 0,05$ et (d) $\rho_{bruit} = 0,08$

Pour chaque niveau de bruit, nous appliquerons l'algorithme sur une série de 40 positions angulaires par rayons et une série de 60 positions angulaires par rayons. L'idée est d'observer si l'augmentation du nombre de positions de mesures au cours de la rotation peut améliorer les résultats en cas de données bruitées (Figure 98).

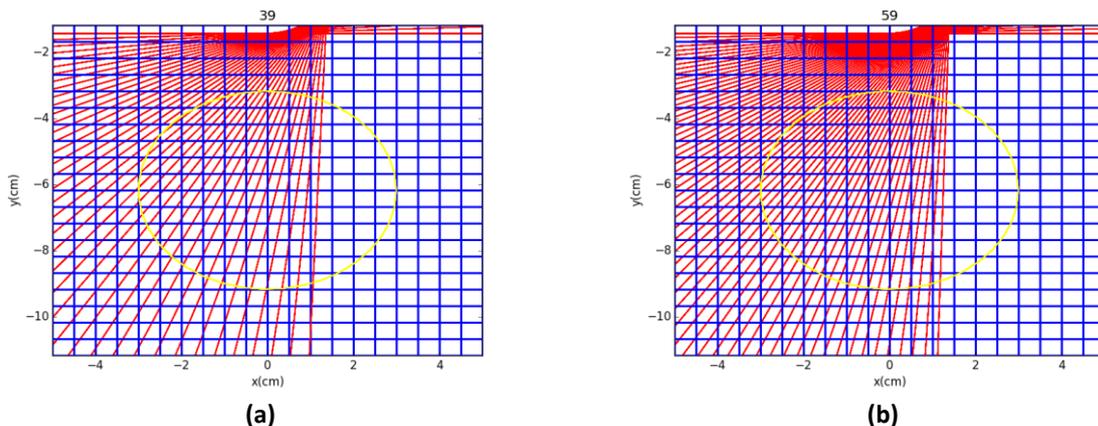


Figure 98 : Représentation de cas où un faisceau de mesures fait l'acquisition de spectres (a) pour 40 positions angulaires au cours d'un scan et (b) pour 60 positions angulaires au cours d'un scan

Pour chaque cas de niveaux de bruit et chaque configuration de rayons nous ferons varier le nombre de points par spectre. Nous étudierons un cas avec 60 points par spectre et un cas avec 120 points par spectre (Figure 99).

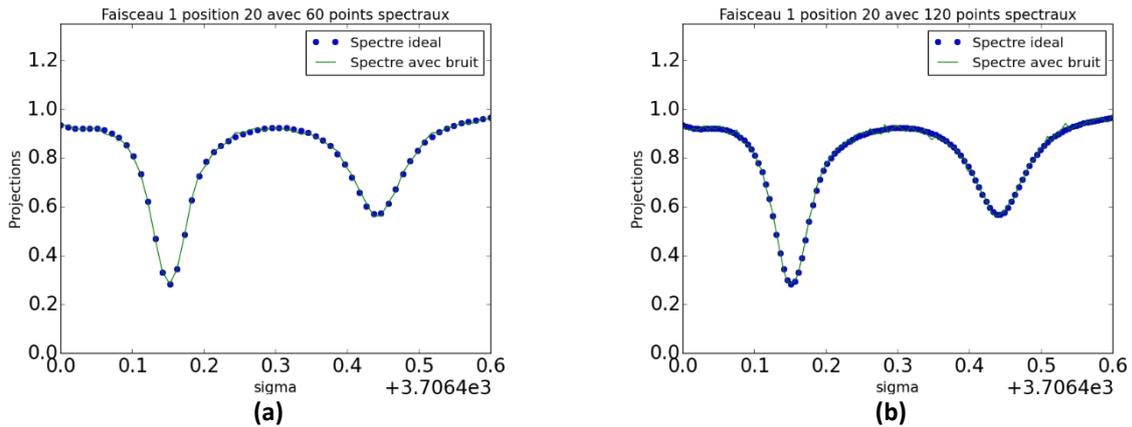


Figure 99 : Spectre simulé constitué de (a) 60 points spectraux et (b) 120 points spectraux

Afin de traiter tous les cas de figures possibles, un total de 12 séries de reconstructions ont été effectuées. Dans chaque cas, nous avons fait évoluer les coefficients de régularisation et retenu le résultat pour les coefficients de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T optimaux (ceux qui donnent l'erreur de reconstruction globale la plus faible).

Une première analyse est faite sur la Figure 100 qui représente l'erreur globale sur les mesures en fonction de l'écart type du bruit appliqué sur les spectres.

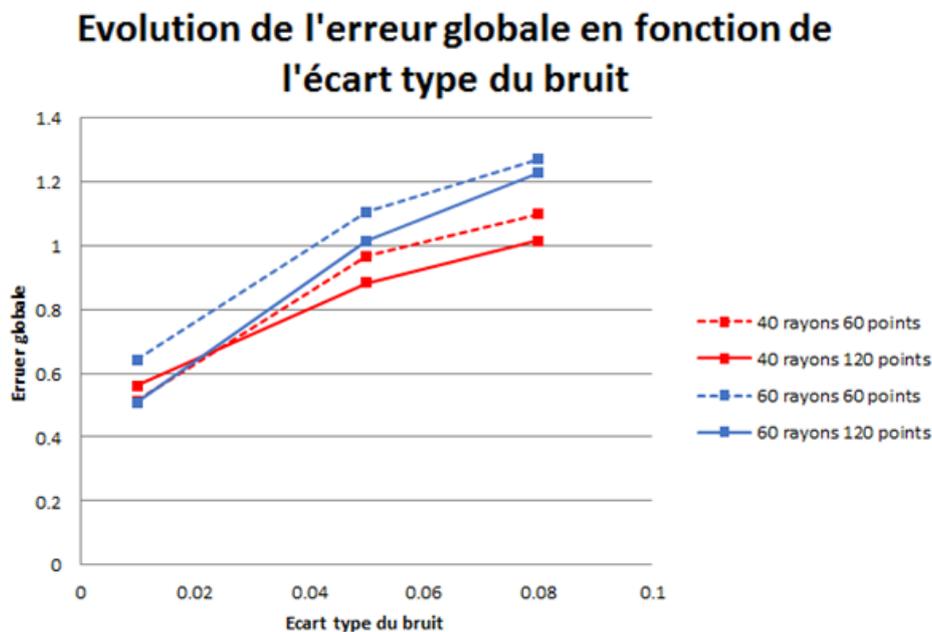


Figure 100 : Evolution l'erreur globale de reconstruction en fonction de l'écart type du bruit appliqué sur les spectres pour plusieurs nombres de rayons utilisés et pour plusieurs nombres de points par spectres

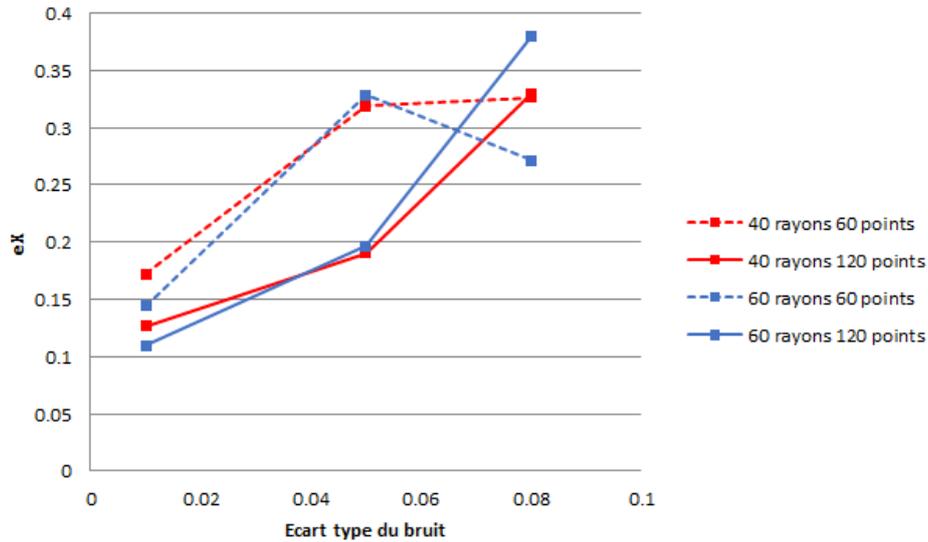
Comme on peut le voir sur cette figure, pour chaque configuration de mesures, l'erreur globale augmente lorsque l'écart type du bruit augmente. Ce résultat était relativement prévisible car cela signifie que le résultat se détériore lorsque les données sont de plus en plus bruitées.

En revanche, le choix de la meilleure configuration de mesure est moins évident. En effet, on peut constater qu'en fonction du niveau de bruit appliqué sur les spectres, certaines configurations de mesure donnent de meilleurs résultats que d'autres. Pour un bruit d'écart type de 0,01 la configuration qui donne le meilleur résultat est celle avec 60 positions de faisceau et 120 points par spectre. La configuration de 40 positions par faisceau avec 60 points par spectre donne un résultat quasi-identique. En revanche, lorsque le niveau de bruit augmente pour un écart type de 0,05 ou de 0,08 la configuration donnant le meilleur résultat est celle avec 40 positions de faisceaux avec 120 points par spectre. On note aussi que pour un même nombre de rayons, un plus grand nombre de points par spectre donne un meilleur résultat.

Ce calcul montre que pour un niveau de bruit faible, l'augmentation du nombre de positions de mesures au cours du scan associée à une augmentation du nombre de points par spectres permet d'améliorer le résultat de reconstruction, ce qui semble logique puisque de cette manière, le nombre de points de mesure augmente. En revanche, c'est la configuration avec moins de faisceau qui fonctionne le mieux lorsque le bruit augmente. Ce qui peut s'expliquer par le fait que l'ajout de points de mesures dégradés avec le bruit augmente l'incertitude sur les données, ce qui dégrade plus la reconstruction. On peut supposer que, l'objet de notre étude étant confiné dans une partie seulement de la zone mesurée, l'ajout de faisceaux augmente le nombre de mesures hors de l'objet qui sont dominées par le bruit, ce qui dégrade la reconstruction. Dans ce cas, il semble préférable d'utiliser moins de faisceaux bien placés dans les zones d'informations utiles comprenant chacun un grand nombre de points spectraux.

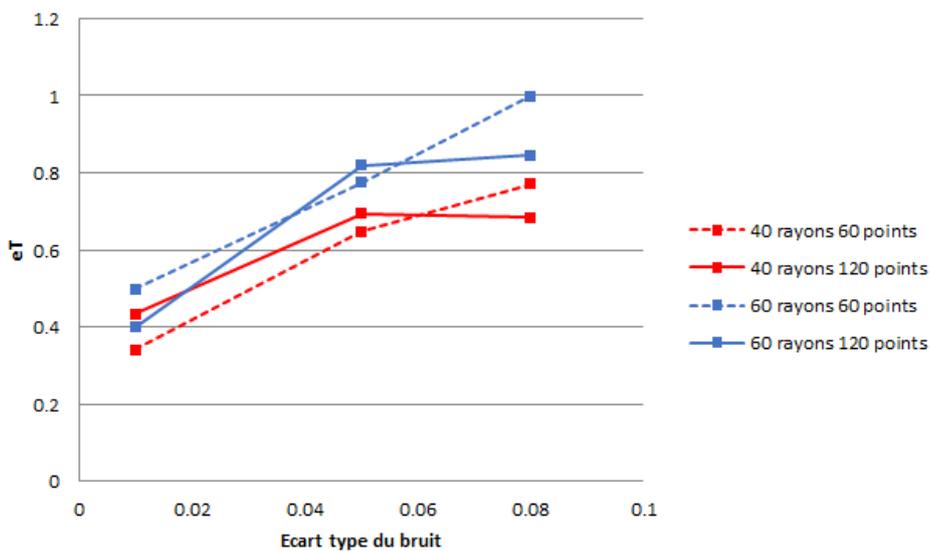
De plus, si on représente l'erreur de reconstruction sur la concentration en H_2O et sur la température séparément en fonction du bruit et des configurations de mesures (Figure 101), les phénomènes observés sont différents.

Erreur sur la concentration en H₂O en fonction du niveau de bruit



(a)

Erreur sur la température en fonction du niveau de bruit



(b)

Figure 101 : Evolution l'erreur de reconstruction (a) sur la concentration en H₂O et (b) sur la température en fonction de l'écart type du bruit appliqué sur les spectres pour plusieurs nombres de rayons utilisés et pour plusieurs nombres de points par spectres

La première observation est que l'erreur sur la concentration et sur la température n'évolue pas toujours de la même manière en fonction du niveau de bruit et des coefficients de régularisation. Ces deux grandeurs n'ont pas la même sensibilité sur les spectres d'absorption, ce qui peut expliquer que le bruit de mesure n'a pas le même effet sur leurs reconstructions. On peut également noter que dans l'ensemble, l'erreur globale augmente avec le bruit de mesures entre les écarts types de 0,01 et 0,05 tandis que dans certains cas

l'erreur est plus faible malgré un niveau de bruit supérieur d'écart type de 0,08. On peut noter aussi que le bruit dégrade plus la température que la concentration, ce qui peut être vérifié en observant les cartographies reconstruites (Figure 102 à Figure 105).

Il est tout de même important de préciser que cette étude ne s'est fait que sur trois niveaux de bruits différents et seulement quatre configurations de mesures. Il serait donc important de tester plus de niveaux de bruits et de configurations pour confirmer ces tendances sur l'évolution de l'erreur de reconstruction.

Ces résultats sont obtenus avec les coefficients de régularisation optimaux déterminés par la méthode de la cartographie de l'erreur globale de la Figure 92. Les cartographies 2D de l'erreur globale de reconstruction pour chaque cas en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et de λ_T avec les résultats de reconstructions pour la paire de lambda optimales sont représentées de la Figure 102 à la Figure 105.

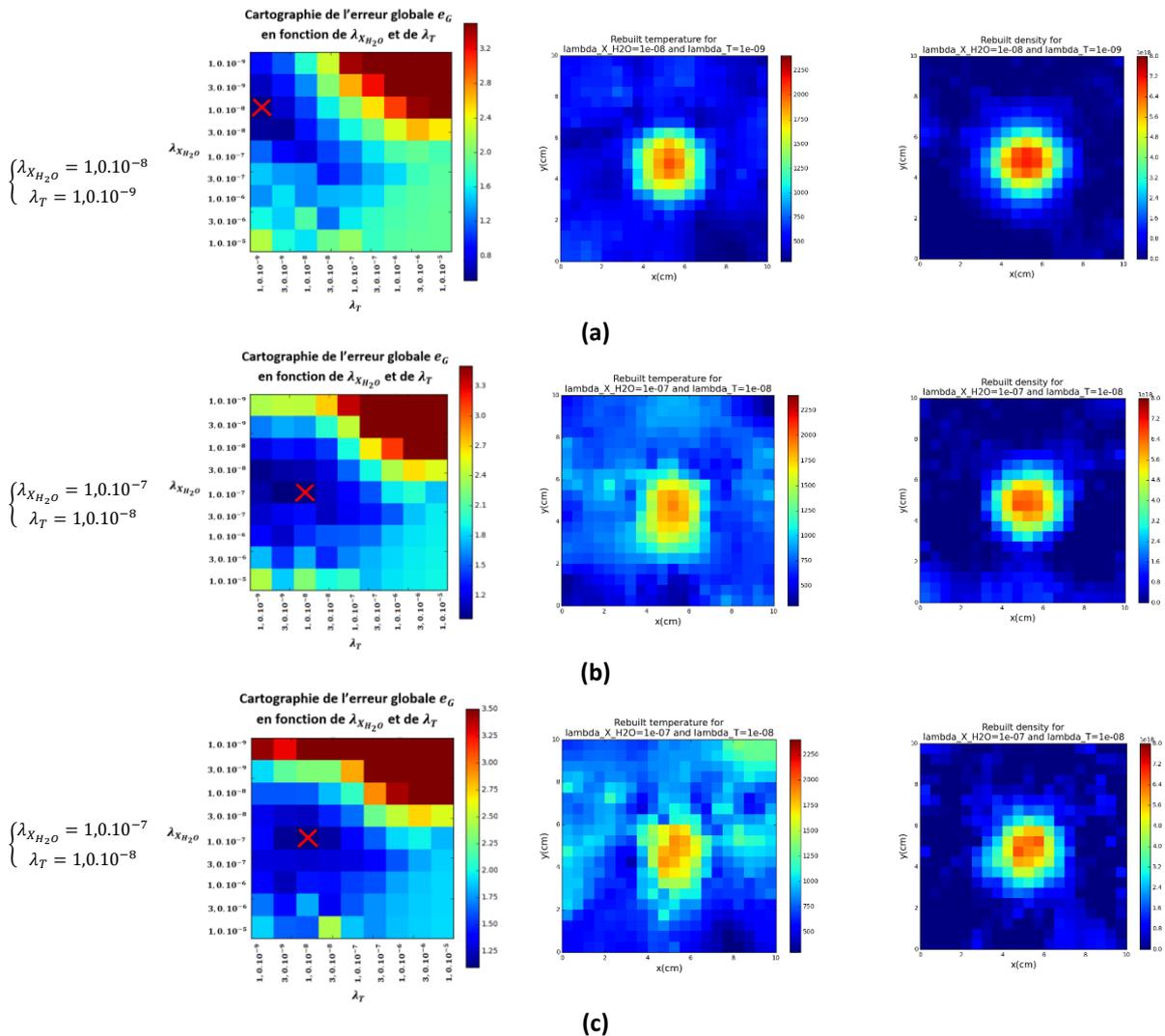


Figure 102 : Cartographie d'erreur globale en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et de λ_T et résultats de reconstructions pour la configuration de 40 positions de faisceaux avec 60 points par spectres pour un écart type de bruit (a) de 0,01, (b) de 0,05 et (c) de 0,08

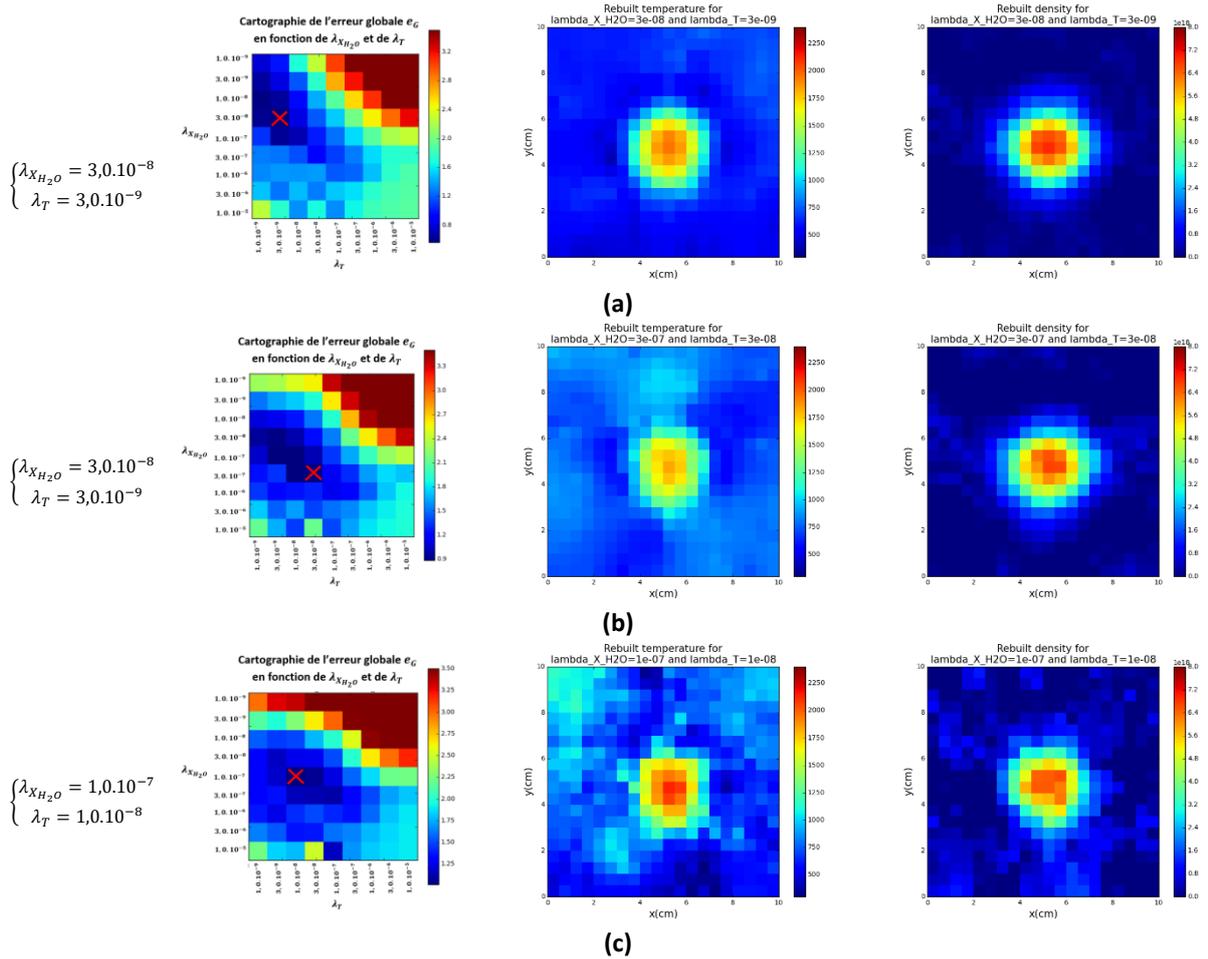


Figure 103 : Cartographie d'erreur globale en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et de λ_T et résultats de reconstructions pour la configuration de 40 positions de faisceaux avec 120 points par spectres pour un écart type de bruit (a) de 0,01, (b) de 0,05 et (c) de 0,08

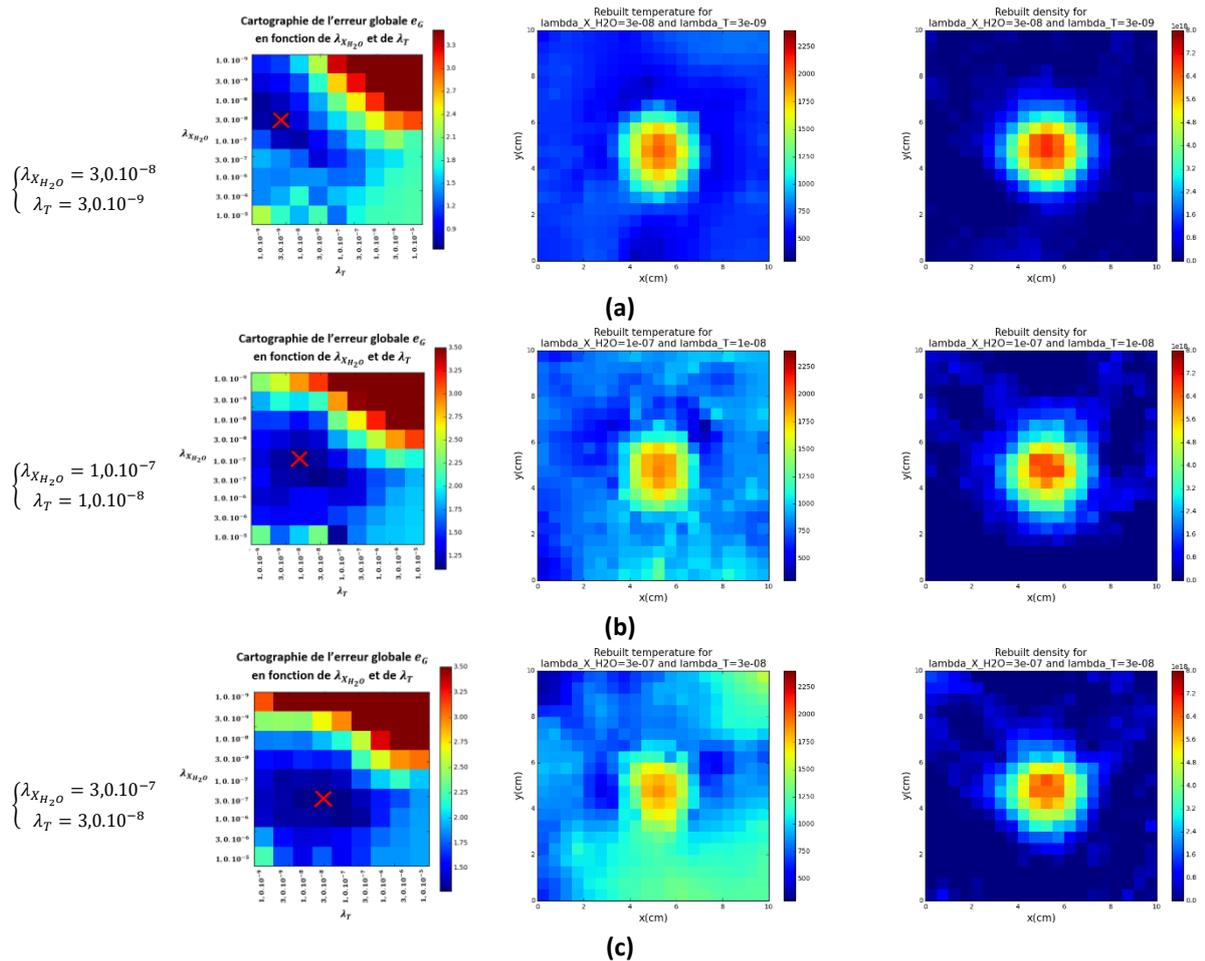


Figure 104 : Cartographie d'erreur globale en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et de λ_T et résultats de reconstructions pour la configuration de 60 positions de faisceaux avec 60 points par spectres pour un écart type de bruit (a) de 0,01, (b) de 0,05 et (c) de 0,08

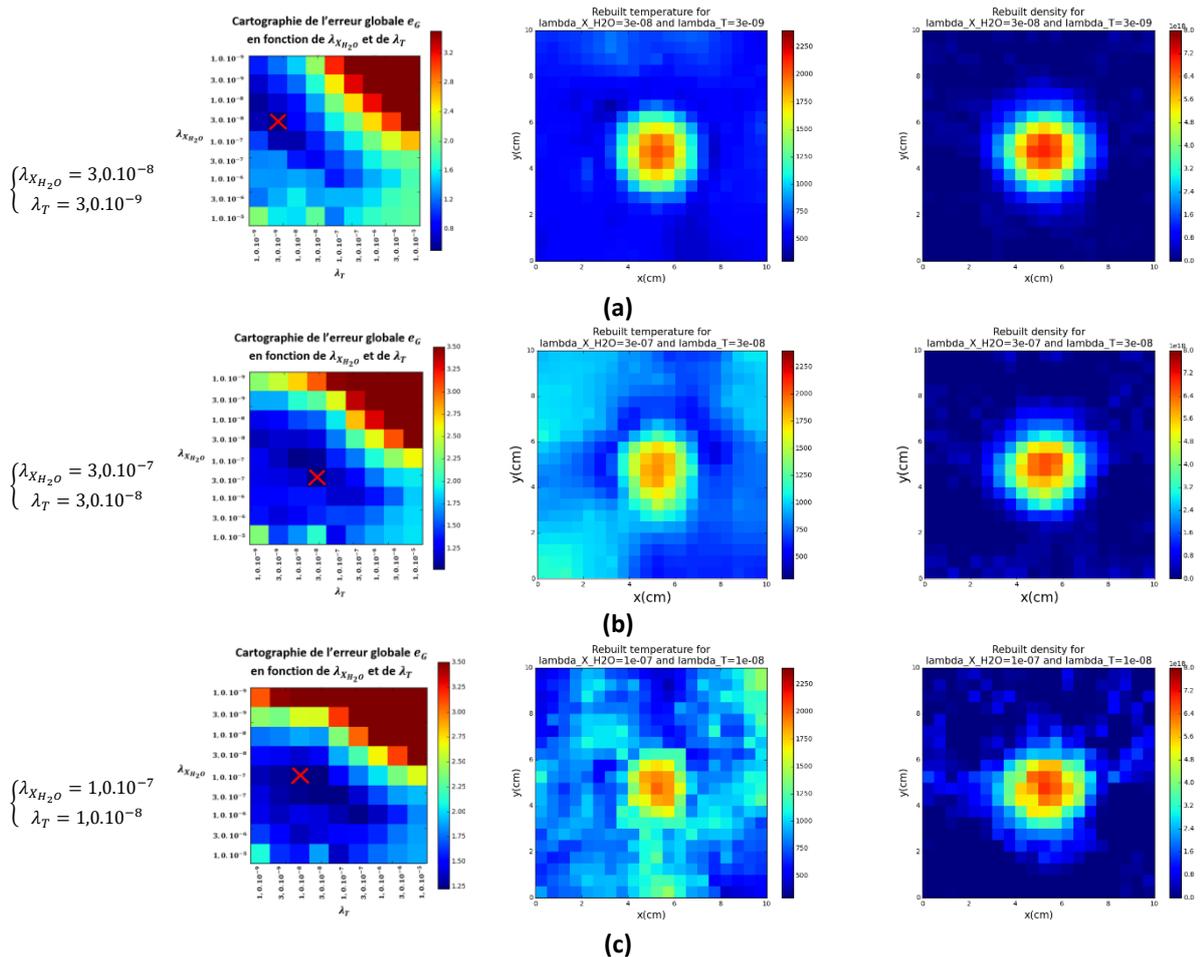
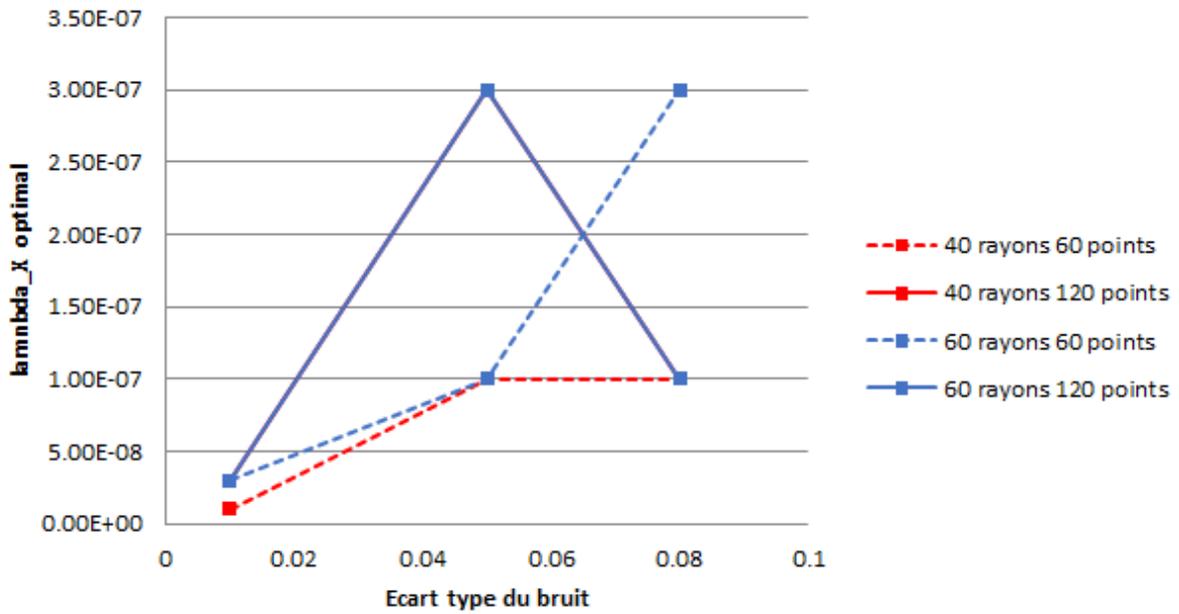


Figure 105 : Cartographie d’erreur globale en fonction de $\lambda_{X_{H_2O}}$ et de λ_T et résultats de reconstructions pour la configuration de 60 positions de faisceaux avec 120 points par spectres pour un écart type de bruit (a) de 0,01, (b) de 0,05 et (c) de 0,08

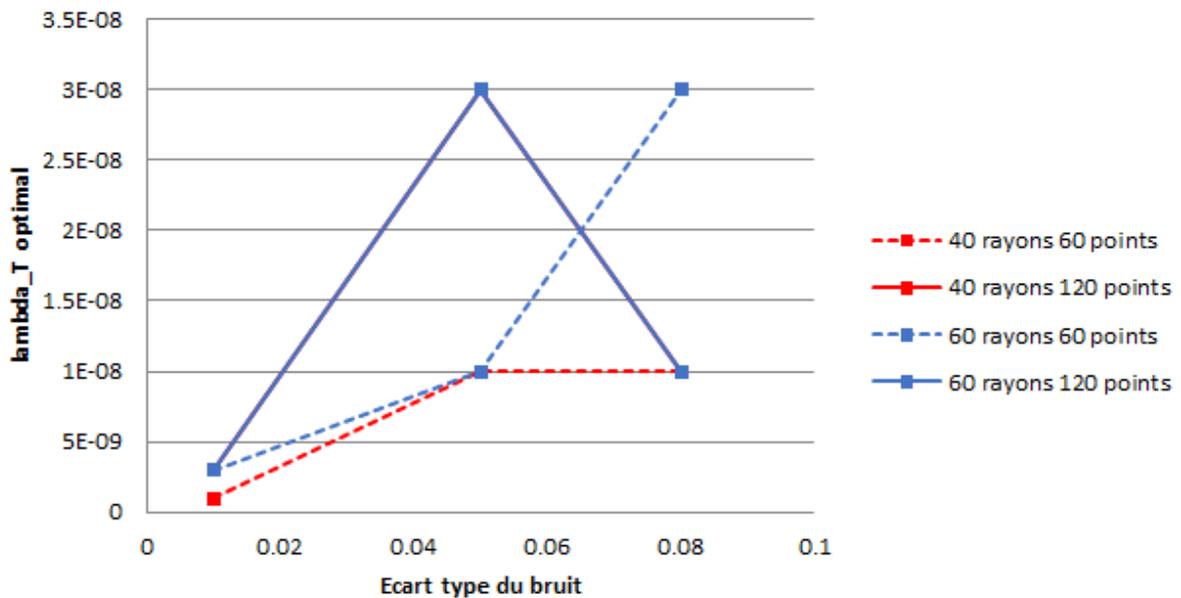
Dans chaque cas, les coefficients de régularisation optimaux évoluent en fonction du bruit de mesure ainsi qu’en fonction de la configuration de mesure. Il est possible de représenter l’évolution des $\lambda_{X_{H_2O}}$ et des λ_T optimaux en fonction du niveau de bruit pour les quatre configurations de mesures. Ces courbes sont représentées sur la Figure 106.

Evolution du lambda_X optimal en fonction du niveau de bruit



(a)

Evolution du lambda_T optimal en fonction du niveau de bruit



(b)

Figure 106 : Evolution des coefficients optimaux (a) $\lambda_{X_{H_2O}}$ et (b) λ_T en fonction du niveau de bruit pour les différentes configurations de rayons (dans les deux cas les deux courbes pour la configuration avec 120 points par spectres sont superposées)

Comme on peut le voir sur la Figure 106, les coefficients de régularisation optimaux ne sont pas identiques et on remarque que celui de concentration en H_2O est toujours supérieur à celui de la température : cela peut indiquer que notre normalisation entre les deux variables est approximative. De plus, pour chaque configuration de mesure les deux coefficients évoluent de la même manière en fonction du niveau de bruit. On remarque également que ces coefficients optimaux sont identiques pour les configurations de 40 et 60 positions de faisceaux avec 120 points par spectre. Une autre remarque est que pour chaque configuration les coefficients de régularisation augmentent lorsque l'écart type du bruit passe de 0,01 à 0,05 alors que lorsqu'il passe de 0,05 à 0,08, les coefficients augmentent pour certaines configurations tandis qu'ils diminuent ou restent identiques pour d'autres.

En bilan de cette première étude, nous pouvons observer qu'il n'est pas possible de prédire précisément la régularisation optimale en fonction du niveau de bruit ou de la configuration de mesures d'après ces courbes. Nous pouvons néanmoins observer une tendance générale qui est une augmentation des coefficients de régularisation pour des niveaux de bruit compris entre 0,01 et 0,05. Par ailleurs, nous avons vu que lorsque le niveau de bruit augmente, il est préférable de privilégier un plus faible nombre de faisceaux placés dans des zones utiles de mesures avec beaucoup de points spectraux. Ce qui confirme l'intérêt de l'information spectrale dans les reconstructions par TDLAT. Cependant, une étude sur plus de cas de niveaux de bruits serait utile.

Nous pouvons aussi noter qu'en fonction du bruit et des configurations de mesures, l'erreur globale reste faible (entre 0,5 et 1,5 environ) tandis que cette erreur globale peut atteindre la valeur de 20,0 pour une mauvaise régularisation (cette information vient des cartographies d'erreur globale de la Figure 102 à la Figure 105). Ainsi, on peut constater que la régularisation de Tikhonov a beaucoup plus d'impact sur la qualité de la reconstruction que les configurations de mesures que nous avons testées. Notons cependant que les paramètres liés à la configuration de mesures n'ont été variés que sur deux valeurs, alors que dans le cas de la régularisation les variations de paramètres étudiées sont beaucoup plus importantes. Il faudrait sans doute compléter l'étude par des cas plus nombreux sur les paramètres de configuration géométrique et de bruit.

Le dernier point qu'il nous paraît important de mettre en avant est que le bruit détériore la qualité des reconstructions de manière plus importante sur la température que sur la concentration. La concentration est essentiellement dépendante de l'intensité des raies d'absorption tandis que la température est dépendante de la forme des raies. Or, le bruit de mesures a plus d'impact sur la forme que sur l'intensité des raies et donc sur la qualité de la reconstruction de la température. Ceci souligne à nouveau l'importance d'optimiser séparément les coefficients de régularisation de la concentration et de la température.

2) Deuxième partie de l'étude paramétrique : effets de l'initialisation de l'algorithme

Dans cette partie, nous allons étudier la convergence de l'algorithme et l'évolution des paramètres de régularisation optimaux en fonction de l'initialisation. Nous allons tester deux initialisations supplémentaires et les comparer avec les résultats obtenus à partir des initialisations montrées sur la Figure 95 (page 144). La première initialisation est une image uniforme de la concentration en H_2O et de la température. La concentration en H_2O est nulle sur toute la surface de l'image et la température est égale à $300 K$ également sur toute l'image. Cette initialisation correspond à un cas où nous n'avons aucune information a priori sur l'objet à reconstruire et donc un cas où aucune forme initiale n'est indiquée à l'algorithme. La seconde correspond à un disque uniforme dont le diamètre est une approximation de celui du fantôme. Le niveau de chaque disque est estimé comme une approximation de la valeur moyenne dans la flamme réelle. Ces deux initialisations supplémentaires sont représentées sur la Figure 107.

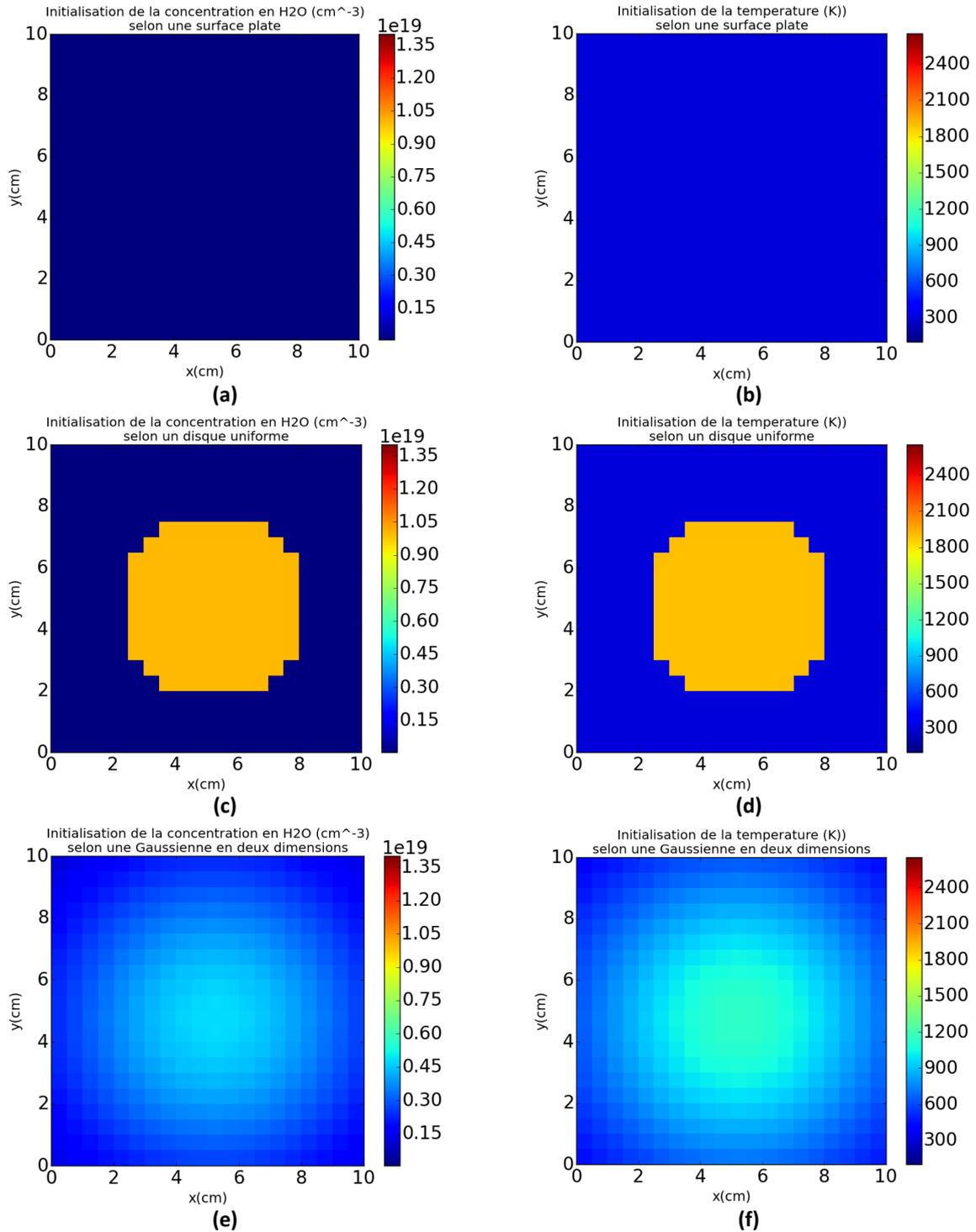


Figure 107 : (a) Initialisation uniforme à 0 cm⁻³ de la concentration en H₂O, (b) initialisation uniforme à 300 K de la température, (c) initialisation selon un disque uniforme de la concentration en H₂O, (d) initialisation selon un disque uniforme de la température, (e) initialisation selon une forme de Gaussienne en deux dimensions de la concentration en H₂O et (f) initialisation selon une forme de Gaussienne en deux dimensions de la température

L'initialisation avec ces trois types d'images fournit à chaque fois un résultat avec une erreur globale différente. Les erreurs globales de reconstruction en fonction des niveaux de bruit et des initialisations sont représentées sur la Figure 108.

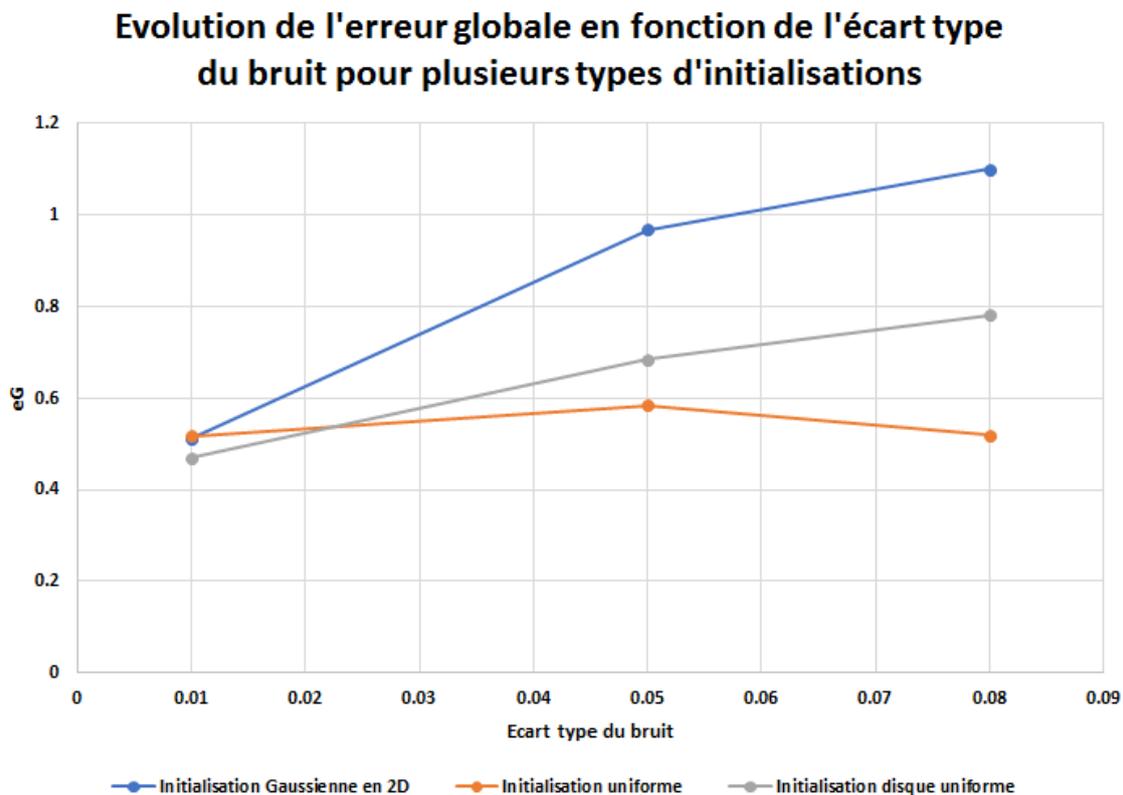


Figure 108 : Evolution l'erreur globale de reconstruction en fonction du type d'initialisation

Comme il est possible de le voir sur la Figure 108, l'initialisation des objets à reconstruire a une influence sur l'erreur globale de reconstruction. Pour un bruit faible d'écart type 0,01 les trois initialisations donnent des résultats relativement proches, même si l'initialisation sous forme de disque donne l'erreur la plus faible. Pour ce qui est du bruit d'écart type 0,05 les erreurs de reconstructions sont plus importantes mais c'est l'initialisation plate qui donne le meilleur résultat. On observe le même phénomène pour le bruit d'écart type 0,08 où l'initialisation plate donne le meilleur résultat. Les résultats obtenus pour chaque niveau de bruit et chaque initialisation sont représentés de la Figure 109 à la Figure 111. L'observation des résultats donne également une information supplémentaire sur l'influence de l'initialisation. Dans ce cas également, l'erreur de reconstruction provenant d'une mauvaise initialisation est beaucoup moins importante que l'erreur globale provenant d'un mauvais réglage de la régularisation.

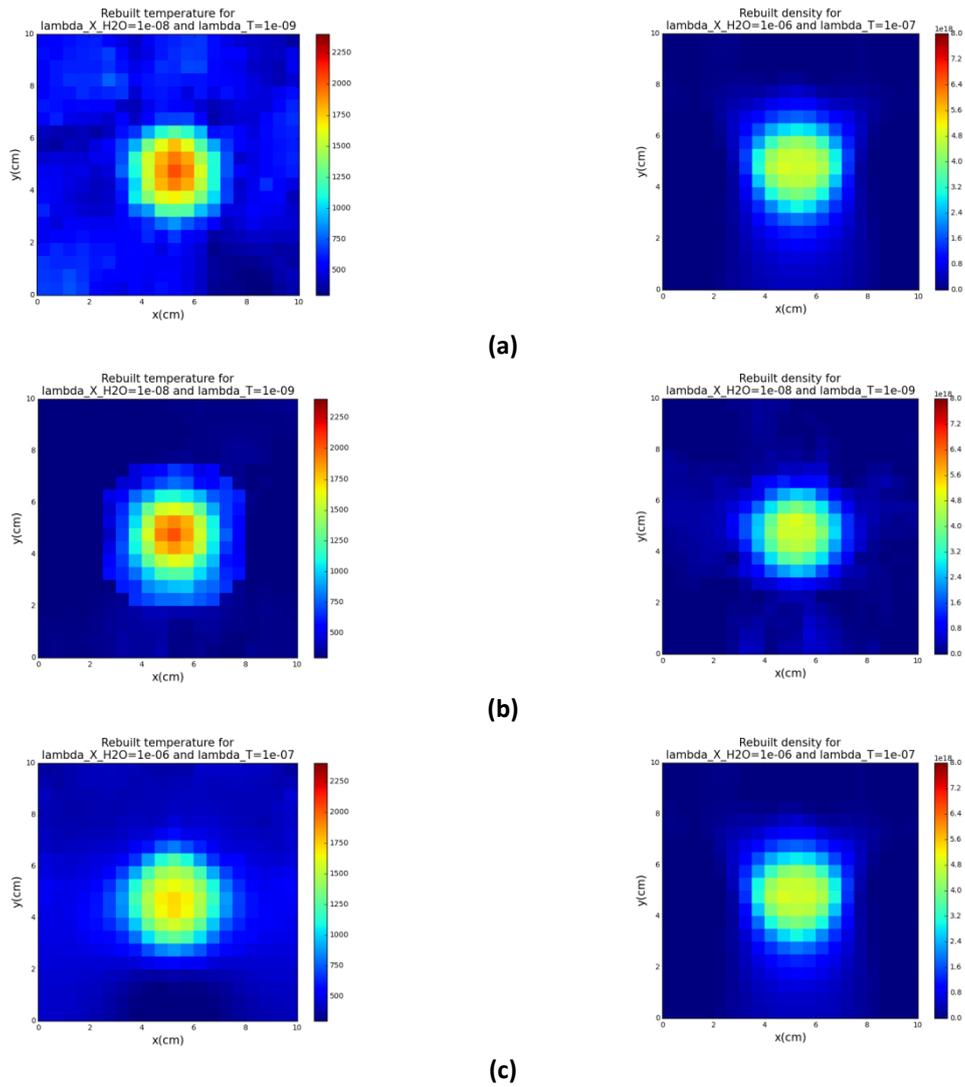


Figure 109 : Représentation des résultats de reconstruction pour la régularisation optimale, pour un bruit sur les spectres d'écart type 0,01 avec l'initialisation (a) Gaussienne, (b) en forme de disque uniforme et (c) plate

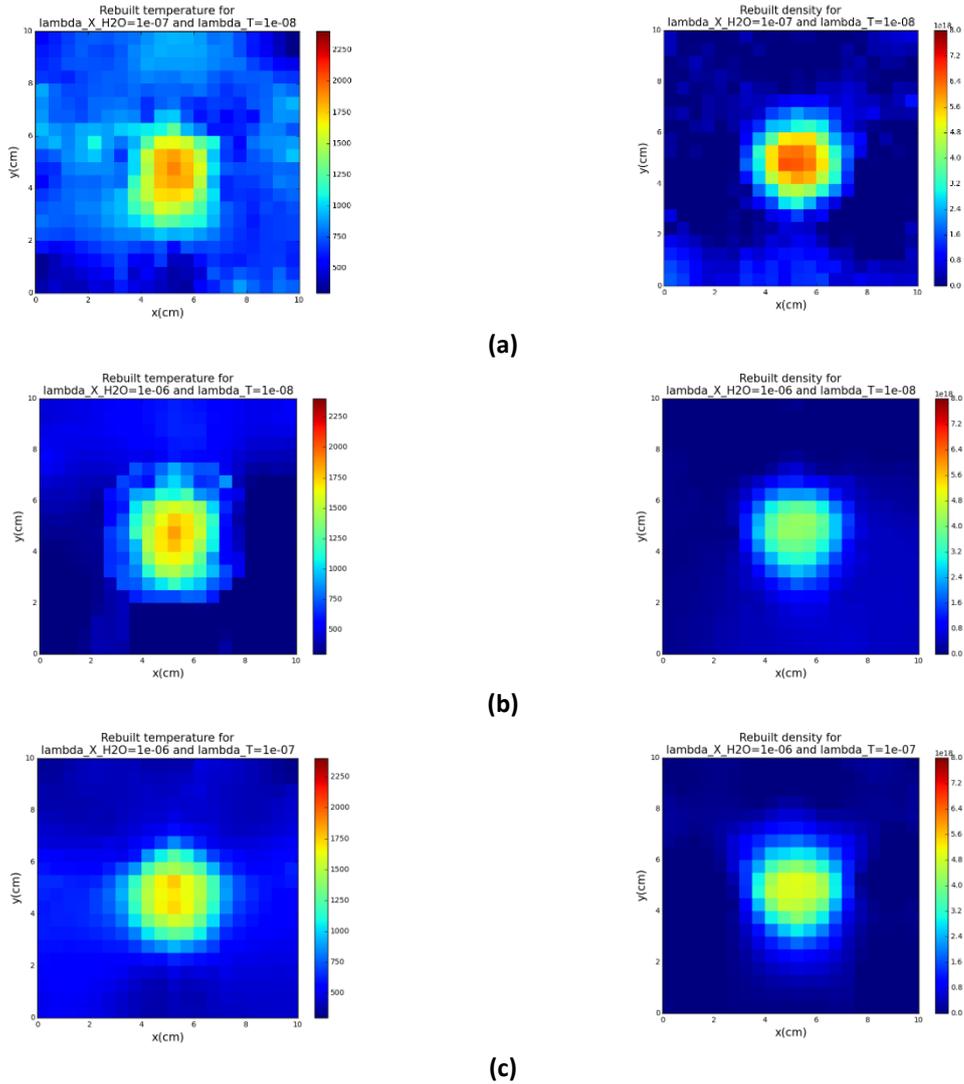


Figure 110 : Représentation des résultats de reconstruction pour la régularisation optimale, pour un bruit sur les spectres d'écart type 0,05 avec l'initialisation (a) Gaussienne, (b) en forme de disque uniforme et (c) plate

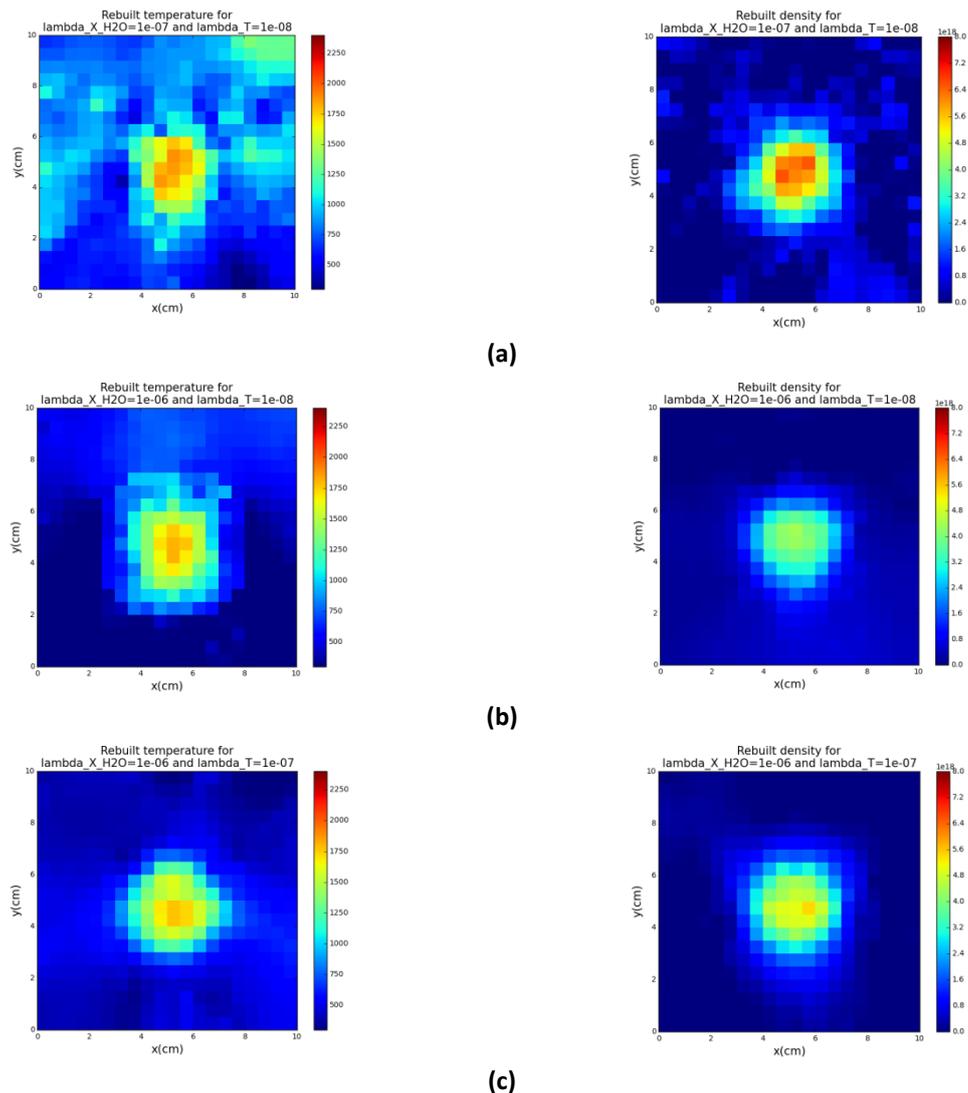


Figure 111 : Représentation des résultats de reconstruction pour la régularisation optimale, pour un bruit sur les spectres d'écart type 0,08 avec l'initialisation (a) Gaussienne, (b) en forme de disque uniforme et (c) plate

En bilan de cette partie de l'étude, d'après les résultats de reconstructions, il est possible de constater que certains aspects de la forme de l'initialisation sont conservés sur le résultat final, ce qui est le plus visible dans le cas de l'initialisation avec un disque uniforme (Figure 109 b, Figure 110 b et Figure 111 b). Ce phénomène traduit le fait que l'algorithme de Gauss-Newton est seulement un algorithme de descente de critère. Ainsi, il part de la forme qui lui est donnée initialement puis l'ajuste pour optimiser le critère. Ainsi, si l'initialisation sous forme de disque ou de Gaussienne initialise l'algorithme près d'un minimum local du critère, l'algorithme ne fera que descendre dans ce minimum. Ce principe explique donc que certaines formes de l'initialisation de l'objet soient encore apparentes sur le résultat final. On constate également que l'initialisation a plus d'impact sur la température que sur la concentration. On peut supposer que la sensibilité des spectres à la température étant non-linéaire, le phénomène des minimum locaux dans la minimisation du critère affecte la

température plus que la concentration. Il y aurait donc plus de minima locaux pour la température que pour la concentration. Pour finir, cette étude a montré que l'initialisation à privilégier dans le cas de cette configuration de rayons est l'initialisation uniforme de l'objet sans forme préalablement définie (sauf en cas de bruit très faible où l'initialisation avec disque uniforme est meilleure). Dans ce cas également, d'autres formes pourraient être testées pour vérifier cette hypothèse.

3) Proposition de protocole de réglage de l'algorithme

Ces deux premières parties de l'étude paramétrique ont permis une première observation de l'influence de la configuration de mesure, du niveau de bruit, de l'initialisation et de la régularisation de Tikhonov sur le résultat de reconstruction tomographique. Cependant, elle mériterait un approfondissement à savoir une étude sur plus de niveaux de bruit et plus de configurations de mesures différentes pour récolter plus de résultats qui pourraient aider à prédire les réglages des paramètres de l'algorithme.

Etant donné que pour l'instant aucun moyen précis de prédire la régularisation et la configuration de mesures optimale n'a été trouvé. Nous allons donc proposer un protocole de réglage des paramètres de l'algorithme exploitant les résultats de cette étude paramétrique.

Considérons les fantômes de concentration en H_2O et de température que l'on a utilisés pour cette étude paramétrique (Figure 94 page 144). Les résultats des reconstructions de ces fantômes ont permis de déduire la configuration de mesure optimale pour chaque niveau de bruit ainsi que la régularisation et l'initialisation qui ont donné le meilleur résultat pour la reconstruction de ces fantômes. Notre hypothèse est que pour un même niveau de bruit sur des spectres expérimentaux et un objet inconnu a priori de forme proche de celle des fantômes, la configuration de mesures, les paramètres de régularisation et l'initialisation qui donne le meilleur résultat en simulations sont ceux les plus adaptés pour la reconstruction expérimentale.

Ainsi, le protocole serait le suivant :

- Etape 1 : réaliser la mesure des spectres d'absorption.
- Etape 2 : évaluer l'écart type du bruit sur l'ensemble des spectres.
- Etape 3 : en fonction du niveau de bruit et de ce qui est a priori connu de l'objet, choisir le nombre de spectres, le nombre de points par spectre et l'initialisation qui donnent les meilleurs résultats de reconstructions en simulations pour ce niveau de bruit.

- Etape 4 : choisir, pour la configuration retenue, les coefficients de régularisation optimaux qui donnent en simulation les meilleurs résultats dans cette configuration de mesures avec cette initialisation.
- Etape 5 : réaliser la reconstruction tomographique.

Comme nous avons pu le voir dans les deux premières parties de l'étude, la régularisation a plus d'impact sur le résultat final que l'initialisation, le nombre de faisceaux ou le nombre de points spectraux. Dans les conditions expérimentales restreintes que nous avons fixées par notre choix de configuration de rayons (scan par rotation), l'étape 4 du protocole est donc la plus importante des réglages de l'algorithme.

L'étape suivante de notre étude paramétrique consiste à vérifier, pour une configuration de mesures donnée, une initialisation donnée et une régularisation de Tikhonov donnée, dans quelle mesure une estimation des réglages de l'algorithme faite sur un fantôme simple donne des résultats corrects pour un autre fantôme. L'étude va principalement porter sur les réglages de la régularisation de Tikhonov qui est le paramètre dont le réglage a le plus d'influence sur l'erreur globale de reconstruction.

4) Troisième partie de l'étude paramétrique : évaluation de la robustesse de la reconstruction

Dans cette dernière partie de l'étude paramétrique, nous allons évaluer la robustesse de l'algorithme et du protocole expérimental déterminé. Pour cela, nous allons choisir une configuration de mesures, un niveau de bruit et une initialisation et appliquer ces réglages de l'algorithme à deux fantômes différents du fantôme simple de la Figure 94.

Le niveau de bruit sur les spectres sera fixé à un écart type de 0,05 qui est un niveau de bruit assez représentatif de ce qui peut être observé sur les mesures en TDLAS. Nous avons choisi la configuration de mesures avec 40 positions angulaires par faisceau et 60 points par spectres ainsi qu'une initialisation de l'objet plate. En ce qui concerne la régularisation nous réaliserons toujours la méthode de l'optimisation par cartographie de l'erreur globale afin de vérifier si les coefficients de régularisation optimaux sont beaucoup modifiés lorsque l'objet change même si les conditions de mesures sont les mêmes.

Pour ce qui est des objets à reconstruire, nous utilisons des fantômes plus complexes présentant toujours la forme d'une flamme mais avec plusieurs singularités de formes. L'objectif est de vérifier si une configuration optimale de l'étude paramétrique déterminée sur un objet simple comme celui de la Figure 94 est répétable sur un fantôme différent. De plus, ce test permettra de vérifier si l'algorithme est capable de repérer des singularités dans les distributions de concentration en H₂O et de température. Des fantômes avec des

singularités « douces » sont représentés sur la Figure 112. Ces singularités ont également la forme de Gaussiennes en deux dimensions plus petites qui sont additionnées ou soustraites à la flamme de la Figure 94.

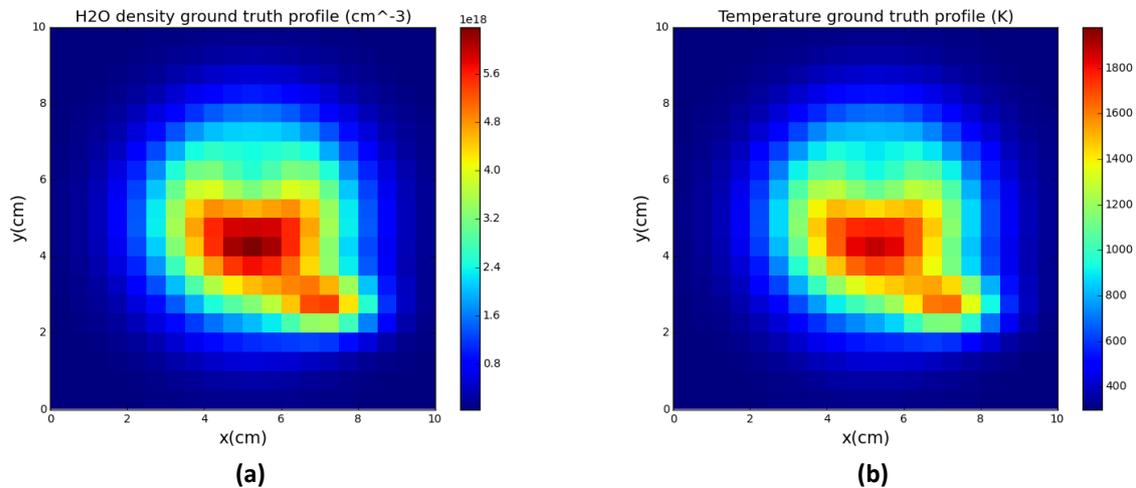


Figure 112 : Distribution avec singularités de formes douces de (a) concentration en H₂O et (b) de température

La reconstruction de ces fantômes est faite en appliquant la méthode d'optimisation de la régularisation par cartographie de l'erreur globale. Cette cartographie a été tracée sur une zone plus petite autour du point de régularisation optimal déterminé avec la reconstruction du fantôme simple. De plus, les résultats ont été obtenus avec 100 itérations de l'algorithme. Nous avons repéré la paire de coefficients de régularisation donnant l'erreur la plus faible et l'avons comparé avec celle qui a donné le meilleur résultat avec le fantôme simple. Comme nous pouvons le voir sur la Figure 113, les résultats donnant l'erreur la plus faible sont obtenus pour les coefficients de régularisation $\lambda_X = 3,0 \cdot 10^{-7}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-7}$. En revanche, on constate que ce résultat optimal n'est pas obtenu pour les mêmes coefficients de régularisation que ceux avec le fantôme simple qui étaient $\lambda_X = 1,0 \cdot 10^{-6}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-7}$.

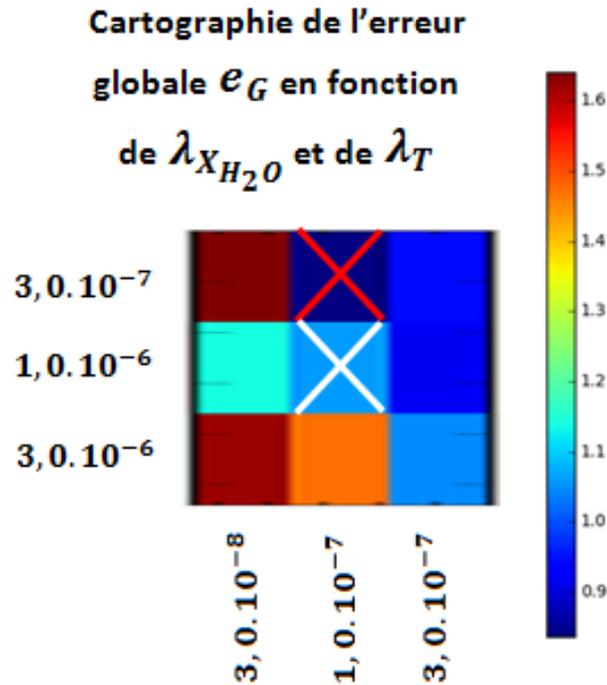


Figure 113 : Cartographie de l'erreur globale pour la reconstruction des fantômes avec singularités douces en fonction des coefficients de régularisations avec la croix rouge représentant la reconstruction optimale et la croix blanche représentant le point optimal de la reconstruction du fantôme simple

Ce résultat montre que la paire de coefficient prédite par la reconstruction sur le fantôme simple n'est pas exactement la paire optimale pour cet objet avec des singularités de forme. En revanche, on peut constater que les valeurs prédites et celles qui donnent la meilleure reconstruction sont tout de même très proches. Ce phénomène peut s'expliquer par le fait que la régularisation dépend de la forme de l'objet à reconstruire et qu'une modification de ce dernier a une influence sur la valeur des coefficients optimaux. Ainsi, dans un cas de reconstruction expérimentale, il faudrait faire plusieurs reconstructions avec des coefficients de régularisation variant autour d'un intervalle proche de ceux qui ont été prédits par les simulations. La meilleure solution devrait alors être définie par l'utilisateur en fonction de ses informations a priori sur l'objet à reconstruire.

Les résultats de reconstructions ayant donné l'erreur globale minimale et ceux obtenus avec les coefficients prédits avec le fantôme simple sont représentés sur la Figure 114.

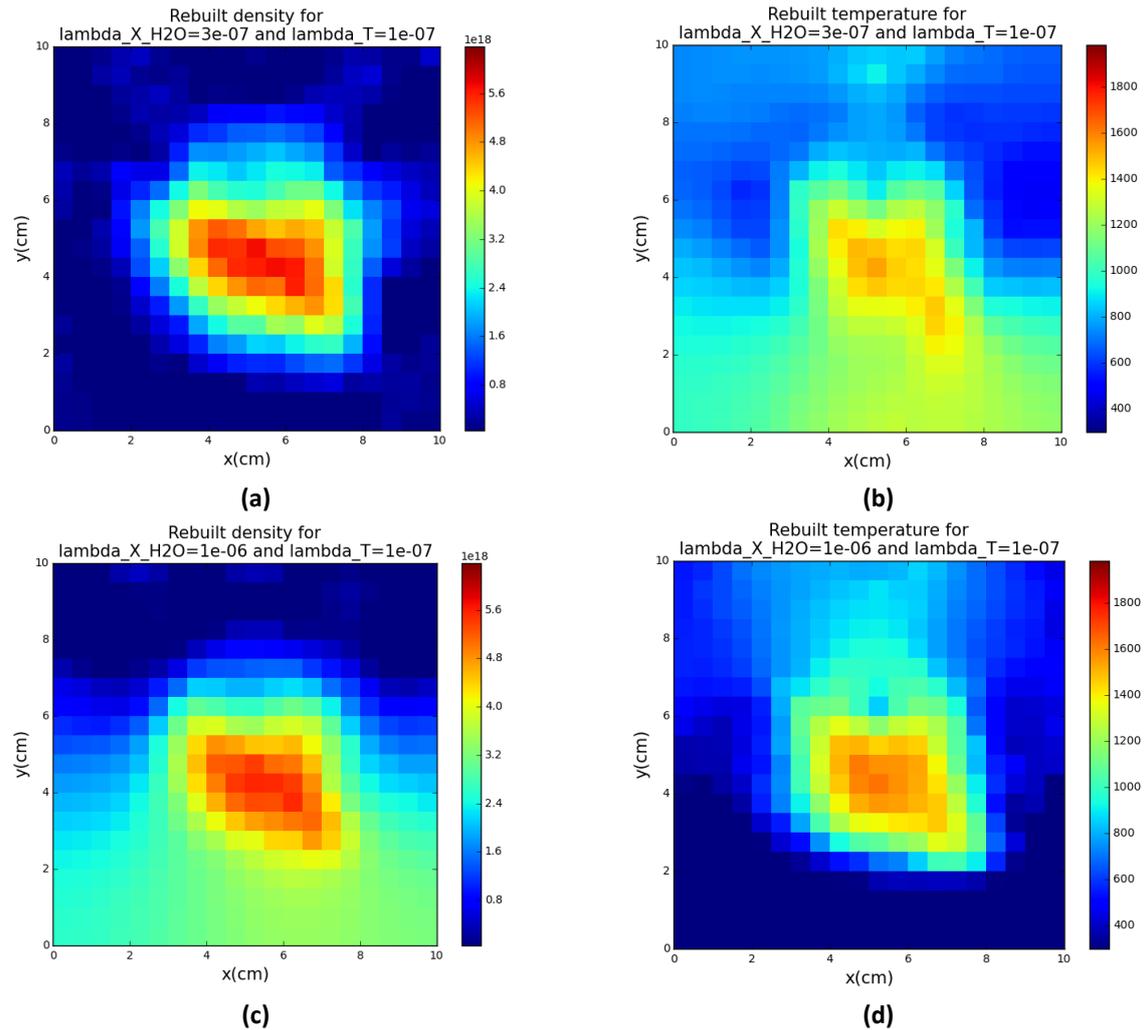


Figure 114 : Reconstructions de (a) concentration en H_2O et (b) de température pour les coefficients de régularisation déterminés avec le fantôme avec singularités « douces ». Reconstructions de (c) concentration en H_2O et (d) de température pour les coefficients de régularisation déterminés avec le fantôme simple

Le premier constat est que, pour tous les paramétrages, l'algorithme a réussi en partant d'une initialisation plate à reproduire la forme du fantôme avec singularités en respectant leurs formes et leurs positions. On note aussi que les écarts de forme entre le résultat avec les coefficients optimaux et ceux obtenus avec les coefficients prédits sont relativement faibles. On peut constater que dans le premier cas, la concentration est mieux reconstruite que la température et que c'est l'inverse dans le second cas. De plus, on remarque qu'une augmentation du coefficient de régularisation de la concentration entre les deux cas a eu pour effet d'augmenter le lissage de l'image de concentration, comme attendu. Cependant pour la température, le lissage est modifié dans les deux cas de reconstruction alors que le coefficient de régularisation de la température reste le même. Ce qui met en évidence un phénomène de couplage de la concentration et de la température qui nécessiterait une étude plus approfondie.

Nous avons également réalisé une reconstruction avec un objet présentant des singularités plus fortes ajoutées ou soustraites à la flamme de la Figure 94 : les champs de concentration et de température correspondant à cet objet sont représentés sur la Figure 115.

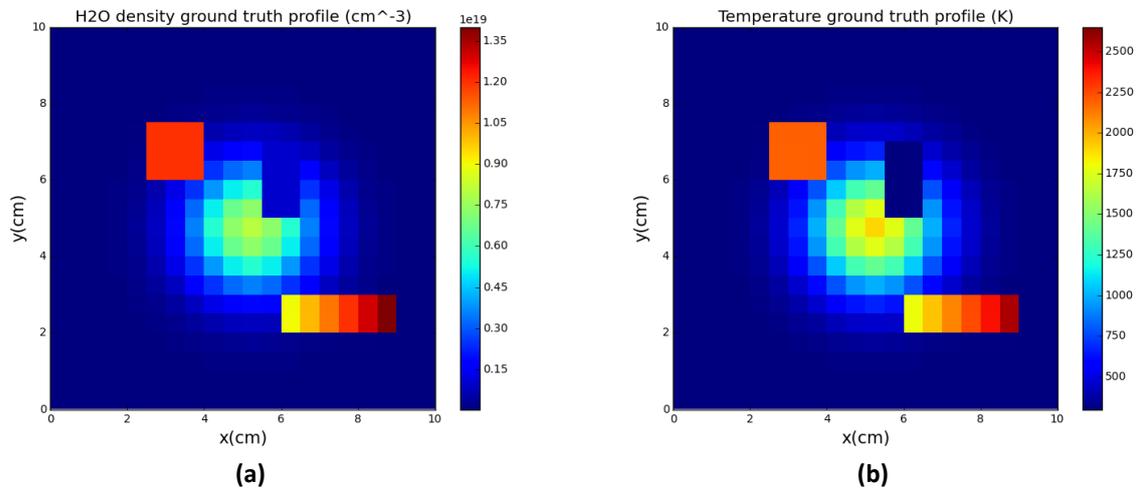


Figure 115 : Distribution avec singularités de formes fortes de (a) concentration en H₂O et (b) de température

Dans ce cas, les coefficients de régularisation qui ont donné la meilleure reconstruction sont les mêmes que ceux qui ont donné les meilleurs résultats avec le fantôme simple qui sont $\lambda_X = 1,0 \cdot 10^{-6}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-7}$. Les résultats obtenus avec ces deux coefficients particuliers sont représentés sur la Figure 116.

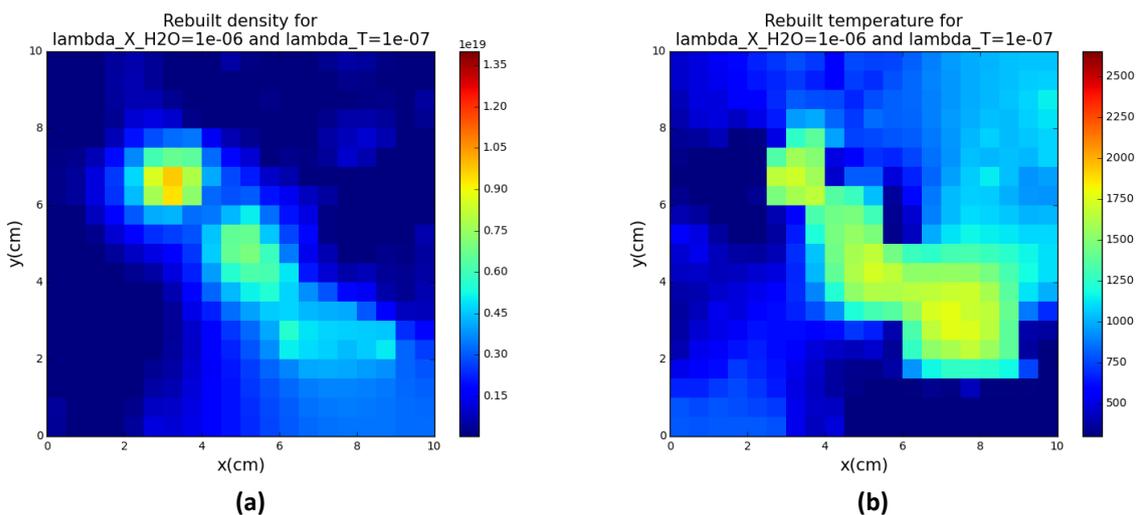


Figure 116 : Reconstructions pour les paramètres de régularisation optimaux du fantôme avec singularités fortes de (a) concentration en H₂O et (b) de température

Les résultats de ces reconstructions ont montré que la méthode de prédiction des coefficients de régularisation permettait d'obtenir une bonne approximation des coefficients de régularisation. Parfois la prédiction donne les coefficients optimaux et parfois les coefficients estimés ne sont pas exactement les meilleurs. Ce qui peut s'expliquer par le fait

que la forme de l'objet (sa complexité, la présence ou non de symétries, la présence de singularités douces ou fortes) a une influence sur les coefficients de régularisation optimaux à appliquer pour réaliser la meilleure reconstruction possible. Dans le cas d'une reconstruction expérimentale, il sera donc nécessaire d'utiliser au maximum les informations a priori et autres données sur la forme de l'objet pour optimiser la régularisation en simulations pour s'approcher au maximum des conditions expérimentales. Il sera également nécessaire de réaliser la reconstruction expérimentale avec plusieurs coefficients de régularisations dans un intervalle proche de ceux prédits par les simulations.

IV) Bilan du développement de l'algorithme de TDLAT et de l'étude paramétrique

Le travail présenté dans ce chapitre nous a permis de développer un algorithme de TDLAT fonctionnel capable de reconstruire des profils de pression, température et concentrations d'une ou plusieurs espèces chimiques.

L'utilisation de cet algorithme pose de nombreuses contraintes liées à la non-linéarité du problème, aux minima locaux du critère non-quadratique et à la régularisation multi-paramètres. Pour caractériser ses performances et pour l'optimiser afin qu'il effectue les meilleures reconstructions possibles, une étude paramétrique a été réalisée.

Cette étude a permis d'observer l'effet de contraintes expérimentales telles que le bruit et la configuration de mesures, ainsi que l'effet des réglages de l'algorithme tels que l'initialisation et la régularisation. A partir des résultats de cette étude, nous avons pu définir un protocole expérimental afin de régler les paramètres de l'algorithme.

Ce protocole consiste à évaluer les contraintes expérimentales lors des mesures, à récolter des informations a priori sur l'objet à reconstruire puis à réaliser plusieurs séries de reconstructions sur des fantômes numériques dans les mêmes conditions. A partir des résultats de l'étude de simulation, il est possible de déterminer des réglages permettant d'obtenir la meilleure reconstruction possible pour cette expérience.

Cependant, nous avons pu montrer que lorsque les conditions expérimentales ne sont pas parfaitement reproduites ou que les informations a priori sur l'objet à reconstruire sont éloignés de la réalité, le réglage de l'algorithme issu de la simulation peut devenir approximatif.

Dans les perspectives de ce travail, il serait nécessaire d'approfondir cette étude paramétrique en testant plus de cas de configurations de rayons, d'initialisation et de niveaux de bruits afin d'obtenir des informations supplémentaires permettant de prédire plus précisément les réglages de l'algorithme. Il serait également nécessaire de développer

une technique d'optimisation de la régularisation de Tikhonov lorsque plusieurs grandeurs sont à reconstruire à partir des mêmes données expérimentales.

Chapitre 5 : Mise en œuvre expérimentale de la TDLAT

Cette partie de la thèse est consacrée à la mise en œuvre expérimentale de la tomographie par scan rotationnel et de l'algorithme de TDLAT. L'objectif de ce chapitre est de reconstruire des champs 2D de concentration chimique et de température à partir de spectres d'absorption expérimentaux acquis dans un brûleur de laboratoire. Cette mise en œuvre permettra également de déterminer si le protocole de réglage de l'algorithme est applicable sur de vraies données expérimentales. Pour cela, nous décrivons dans un premier temps la flamme étudiée qui est celle produite par un brûleur MacKenna. Nous détaillons dans quelles conditions les mesures ont été faites et quelle configuration de mesure a été choisie. Nous présentons la méthode d'étalonnage des spectres ainsi que la technique d'initialisation de l'algorithme et le choix des paramètres de régularisation. Enfin, les reconstructions obtenues sont présentées avec une analyse des résultats et des propositions d'améliorations possibles pour l'algorithme et pour le système expérimental.

I) Système expérimental

La flamme étudiée est celle produite par un brûleur MacKenna. Nous avons déjà étudié ce brûleur en TDLAS classique dans le chapitre 2 IV)1)a) page 65. Le brûleur a été réglé avec des débits de méthane et d'air offrant une richesse $\Phi = 1$, les produits de combustion étant pour rappel principalement du H_2O et du CO_2 . A cette richesse, la flamme est stable dans le temps et présente une symétrie cylindrique. Ainsi, les distributions à reconstruire sont a priori des profils variant uniquement selon le rayon de la flamme. Plusieurs études de la littérature ([65] et [66]) présentent des estimations de profils radiaux de la concentration chimiques des produits de combustion et de la température.

Hauteur des
faisceaux de
mesures

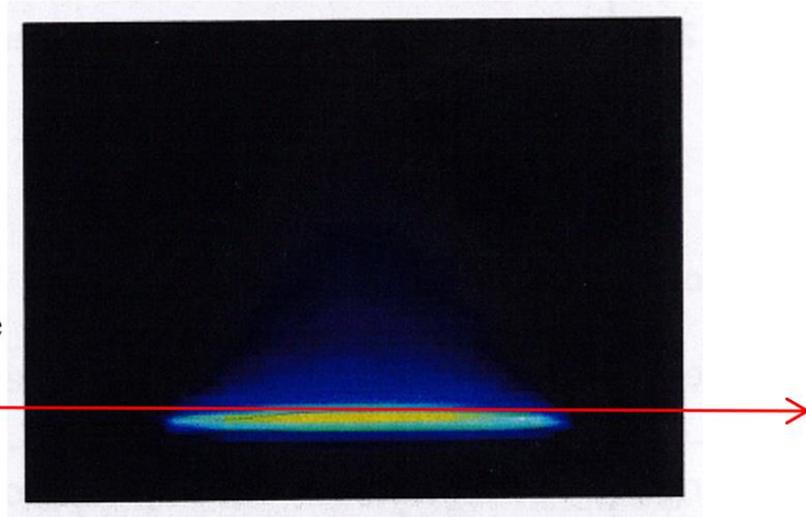


Figure 117 : Forme de la flamme à symétrie cylindrique du brûleur MacKenna pour une richesse $\Phi = 1$ obtenue avec un débit d'air de $20 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ et un débit de méthane de $2 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$.

Ainsi, nous allons faire une reconstruction tomographique sur un objet dont la distribution 2D est connue. Les mesures sont effectuées à une hauteur de 3 mm au-dessus du poreux d'où est produite la flamme (Figure 117). Le système de tomographie est celui du scan par rotation utilisé sur la flamme de propergol dans le chapitre 3 (I)3) page 86) et dans le chapitre 4 sur l'étude paramétrique (II)1)a) page 123). Avec une telle flamme il serait possible d'exploiter la symétrie circulaire pour simplifier la reconstruction tomographique à la manière d'une transformée d'Abel. Cependant, l'idée est de vérifier si notre système de scan permet de reproduire fidèlement une distribution 2D dans un quadrillage de pixels. Dans ce cas présent nous connaissons la forme de l'objet mais à terme, l'objectif est de reconstruire des objets inconnus. Nous avons donc choisi de ne pas tenir compte des symétries et de reconstruire l'objet comme un objet de forme quelconque. La forme et la symétrie a priori de l'objet seront seulement utilisés pour dans l'initialisation de l'algorithme et pour vérification des résultats.

Les distributions 2D à reconstruire sont la concentration en H_2O et la température. Pour cela, nous allons utiliser le spectromètre émettant sur un intervalle de nombre d'ondes compris entre $3706,4 \text{ cm}^{-1}$ et $3707,0 \text{ cm}^{-1}$ sur lequel des raies de H_2O et de CO_2 sont visibles. Il s'agit du spectromètre décrit dans le chapitre 2 (III)5) page 63) et dont l'intervalle spectral a été utilisé pour faire l'étude paramétrique dans le chapitre 4 (II)1)a) page 123).

La zone d'étude est constituée d'un quadrillage de 10 cm de côté constitué de 20 par 20 pixels. La flamme MacKenna est centrée au milieu de ce quadrillage et son diamètre est de 6 cm (Figure 118).

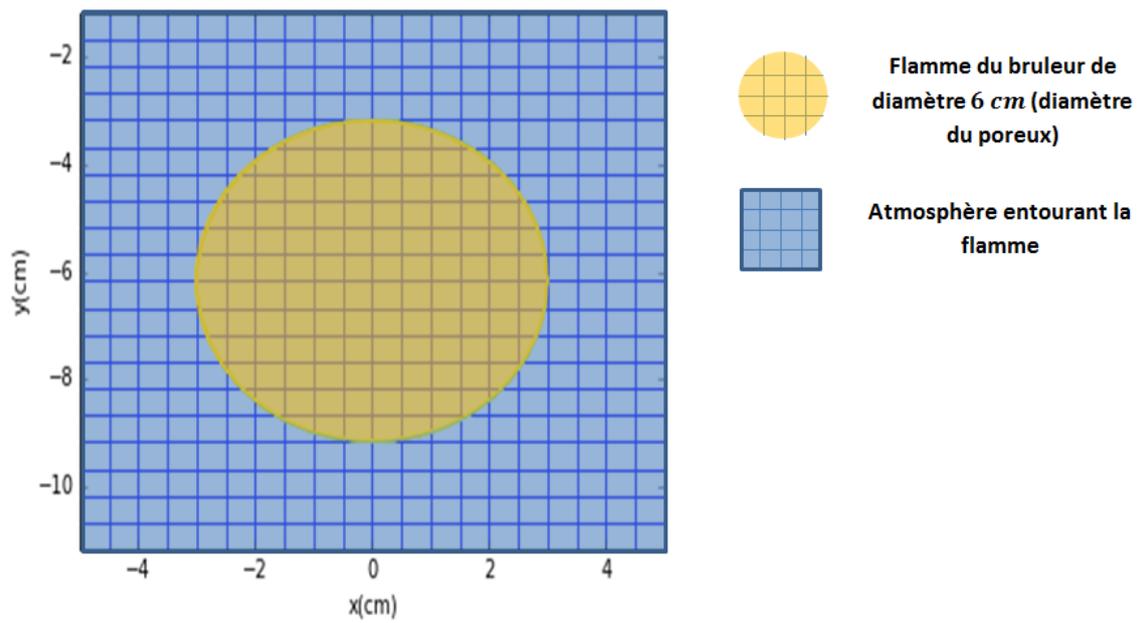


Figure 118 : Quadrillage étudié et forme de la flamme du bruleur MacKenna.

Le trajet des faisceaux par le système de scan est représenté sur la Figure 119.

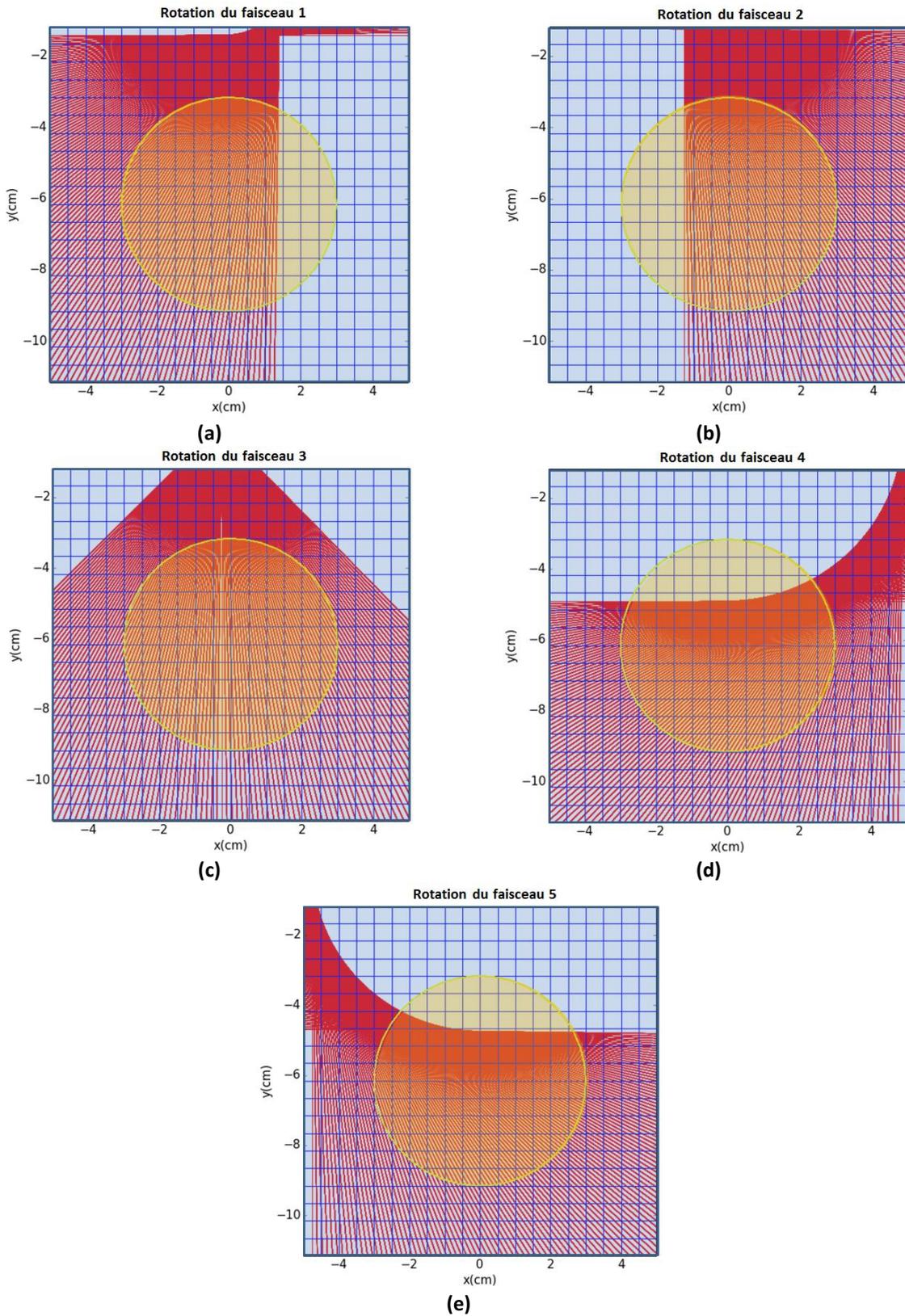


Figure 119 : Trajet des faisceaux de mesures à travers le modèle de flamme MacKenna : rotation (a) du faisceau 1, (b) du faisceau 2, (c) du faisceau 3, (d) du faisceau 4 et (e) du faisceau 5

II) Acquisition et étalonnage des données expérimentales

L'acquisition est faite au cours de la rotation de la couronne autour de la flamme. La couronne fait une rotation de 90° en 2,15 s. La cadence d'acquisition des spectres d'absorption est de 1kHz , ce qui fait un total de 2150 spectres acquis sur une rotation de 90° pour les 5 faisceaux, soit un total de 10750 spectres acquis. Ce nombre de spectres est très important et nous n'en utiliserons qu'une partie pour la reconstruction tomographique. Ce choix résulte des contraintes sur la mémoire et le temps de calcul pour traiter la totalité des données et de la redondance des mesures étant données les dimensions en pixels de la zone reconstruite. Nous allons décrire notre démarche pour extraire de ces 10750 spectres les données nécessaires à la reconstruction tomographique.

Premièrement, comme pour toute mesure de spectroscopie par TDLAS ainsi que nous l'avons vu au chapitre 2 (II)2) page 53), il est nécessaire d'étalonner ces spectres en nombre d'onde et de réaliser une suppression d'enveloppe. En ce qui concerne l'étalonnage spectral, nous utilisons la même méthode que celle présentée au chapitre 2 (II)2) page 53), pour les acquisitions par TDLAS à partir de deux signaux acquis dans une cavité de Fabry-Pérot et dans une cuve de référence. En ce qui concerne la suppression de l'enveloppe, nous avons procédé à un calcul particulier. En effet, le faisceau laser traverse une couche d'atmosphère entre le collimateur d'émission et la flamme et entre la flamme et le collimateur de réception. Or, dans cette zone le H_2O et le CO_2 qui fournissent des raies d'absorption sur le spectre sont également présentes. Il est donc nécessaire de quantifier la contribution de ces raies en dehors de la flamme pour que les spectres à traiter ne contiennent que les contributions dans la flamme. Nous avons donc choisi pour les 5 faisceaux utilisés d'acquérir un spectre avec la flamme éteinte permettant de quantifier la contribution des espèces atmosphériques. D'après la Figure 120, on observe trois raies principales sur un spectre acquis dans la flamme et une raie sur un spectre acquis avec la flamme éteinte.

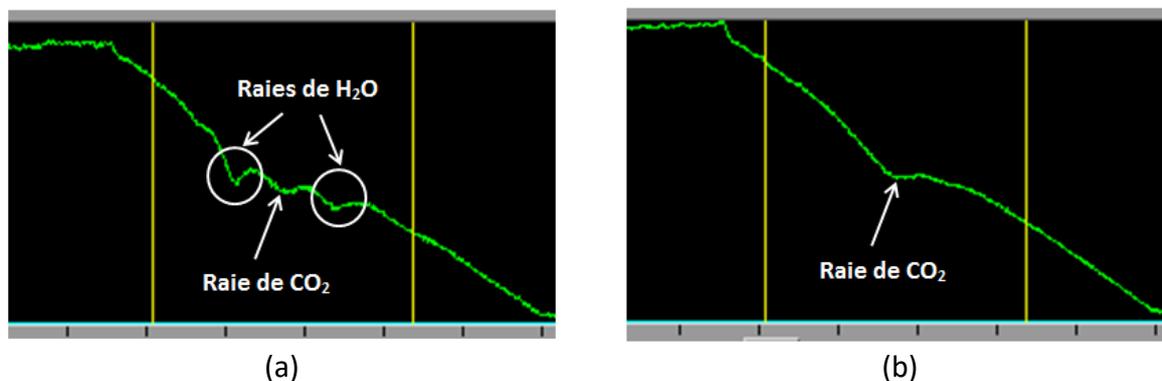


Figure 120 : Spectre d'absorption acquis (a) au centre de la flamme et (b) avec la flamme éteinte.

Sur le spectre acquis dans la flamme, trois raies principales sont visibles, d'après la base de données HITRAN, la raie centrale est une raie de CO_2 et elle est entourée de deux raies de H_2O . Sur le spectre acquis avec la flamme éteinte seule la raie de CO_2 est visible. Ce qui semble signifier que la contribution de l'atmosphère se fait principalement sur la raie de CO_2 . Nous utilisons ensuite le spectre acquis sans flamme pour quantifier la contribution des espèces atmosphérique et celle-ci est supprimée du spectre acquis dans la flamme avec la suppression de l'enveloppe. Le résultat est représenté sur la Figure 121.

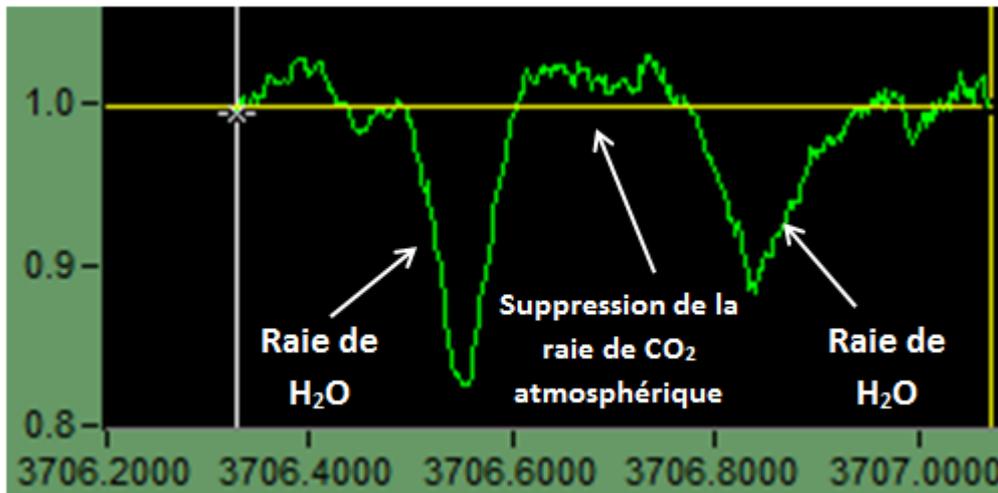


Figure 121 : Spectre étalonné après suppression de l'enveloppe et des contributions des raies atmosphériques.

Ainsi, après suppression de l'enveloppe spectrale et des contributions de l'atmosphère, le spectre obtenu ne contient que les deux raies principales de H_2O . La raie de CO_2 qu'il était possible de distinguer à 300 K n'est pas suffisamment absorbante à la température de la flamme. Ainsi, le traitement des spectres ne tiendra compte que de l'espèce H_2O . Par ailleurs, la flamme MacKenna brûle à la pression atmosphérique. Nous avons donc considéré que la pression dans toute la zone d'étude était constante et égale à la pression atmosphérique. De cette manière, nous avons deux distributions en deux dimensions à reconstruire : une distribution de concentration en H_2O et une distribution de température. Ce qui est une mesure semblable aux simulations qui ont été faite dans le cadre de l'étude paramétrique du chapitre 4 III) page 143. Les résultats de ces simulations vont être utilisés pour régler l'algorithme de tomographie. De plus, le fait d'avoir supprimé les contributions atmosphériques simplifie la zone d'étude. En effet, connaissant le diamètre de la flamme, il est possible de prédire à quel endroit se trouveront les valeurs les plus élevées de concentration en H_2O et de température. Nous pouvons dire que la concentration sera nulle en dehors de la flamme et la température sera égale à la température atmosphérique en dehors de la flamme. Cette information sera utilisée pour initialiser l'algorithme.

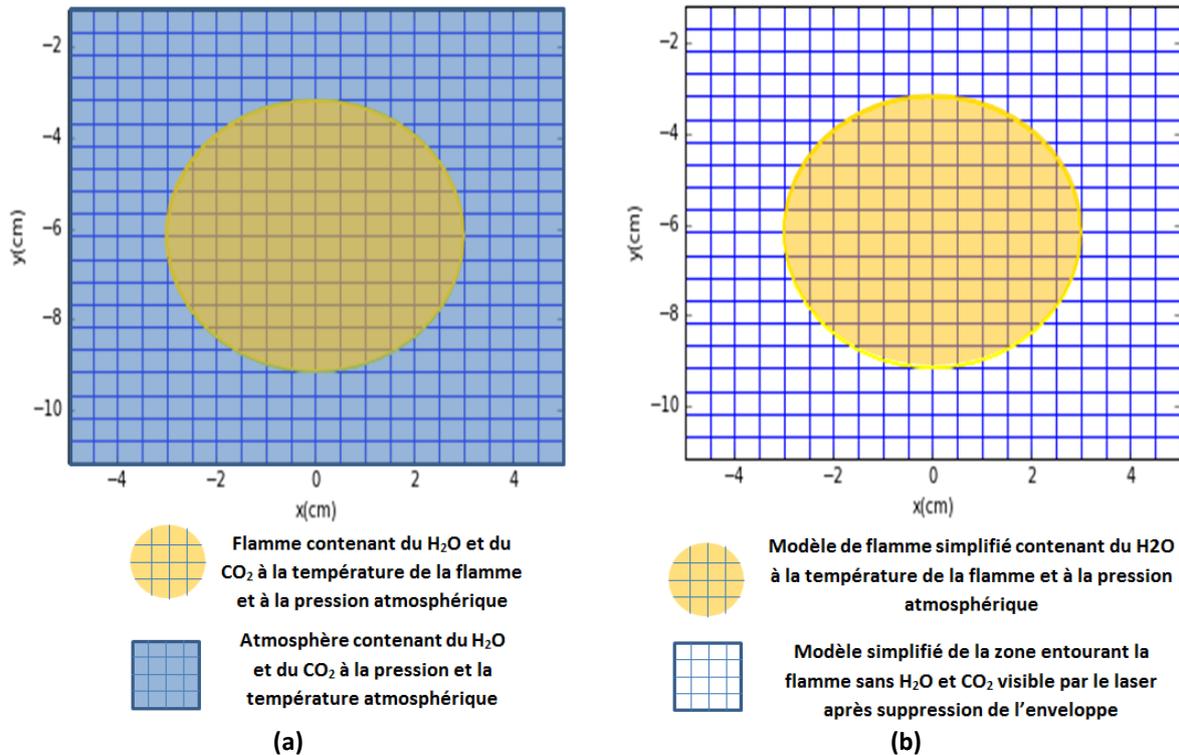
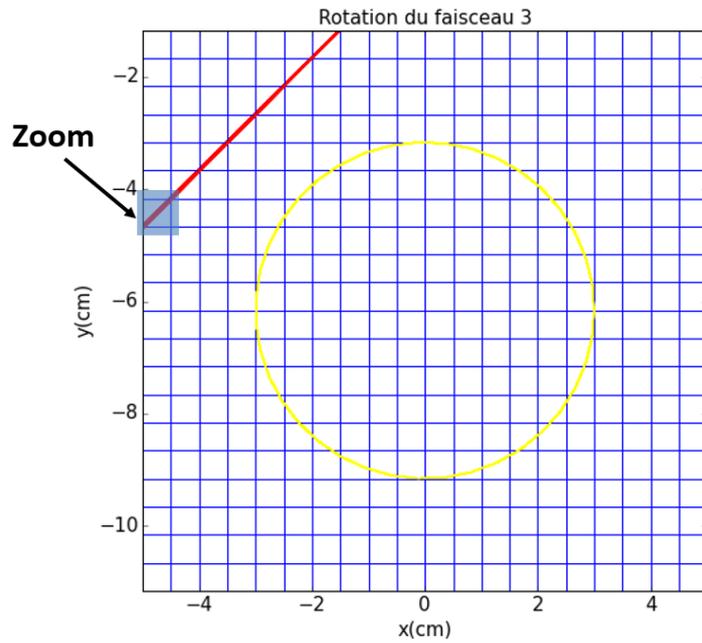


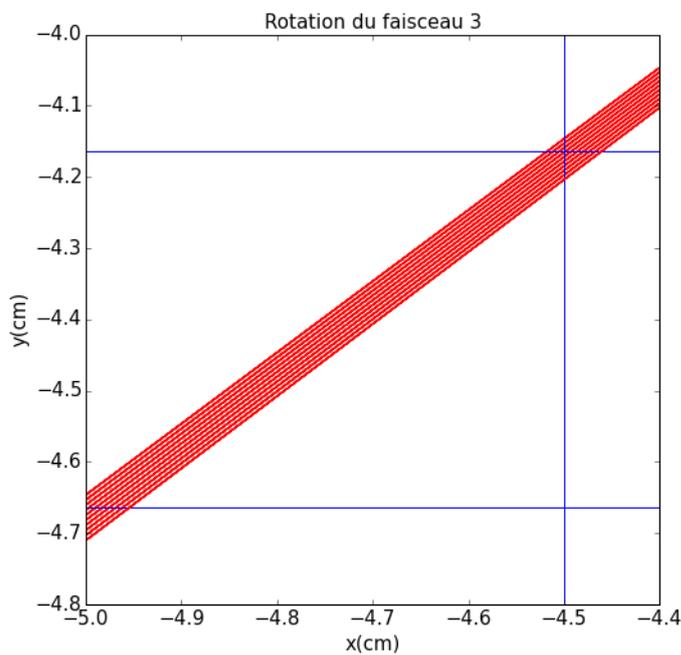
Figure 122 : (a) modèle de la flamme et de la zone qui l'entoure et (b) modèle simplifié de flamme vu par le laser après la suppression de l'enveloppe spectrale.

Ainsi, d'après la Figure 122, l'objet étudié est donc un cercle de 6 cm de diamètre dans lequel sont présentes de fortes valeurs de concentration en H₂O et de température. En dehors de ce spectre la concentration en H₂O est nulle et la température est de 300 K.

De plus, afin de limiter l'impact du bruit sur les mesures, nous moyennons les signaux sur 10 spectres au cours de l'étalonnage spectral. Ceci réalise une intégration spatiale car le signal d'une seule position angulaire est constitué de la moyenne des 10 faisceaux adjacents. Cependant, la cadence d'acquisition étant très élevée, cette intégration spatiale est considérée comme négligeable. Sur la Figure 123, nous représentons la réalisation de cette moyenne sur une image de la rotation du faisceau 3. Comme il est possible de le constater, le balayage angulaire pour 10 positions successives est très faible en comparaison à la taille d'un pixel et l'intégration spatiale réalisée peut être considérée comme négligeable.



(a)



(b)

Figure 123 : Représentation (a) de 10 positions angulaires de faisceaux successives utilisées pour faire la moyenne et (b) zoom sur un pixel de ces 10 positions angulaires

Après l'étape d'étalonnage et de suppression de de l'enveloppe spectrale, il reste un total de 215 spectres d'absorption par faisceau à traiter soit un total de 1075 pour les 5 faisceaux. Nous avons choisi ensuite de reproduire l'une des configurations étudiées dans l'étude paramétrique pour laquelle nous avons des informations sur sa précision et sur le réglage

des coefficients de régularisation. Exploitant les résultats du chapitre 4 (III) page 143) nous avons traité 40 spectres sur les 215 étalonnés et utilisé 60 points par spectre. Nous disposons donc au total de 5 séries de 40 spectres d'absorption étalonnés comprenant 60 points. Les spectres mesurés après étalonnage et prêts à être utilisés pour la reconstruction tomographiques sont représentés sur la Figure 124 et sur la Figure 125.

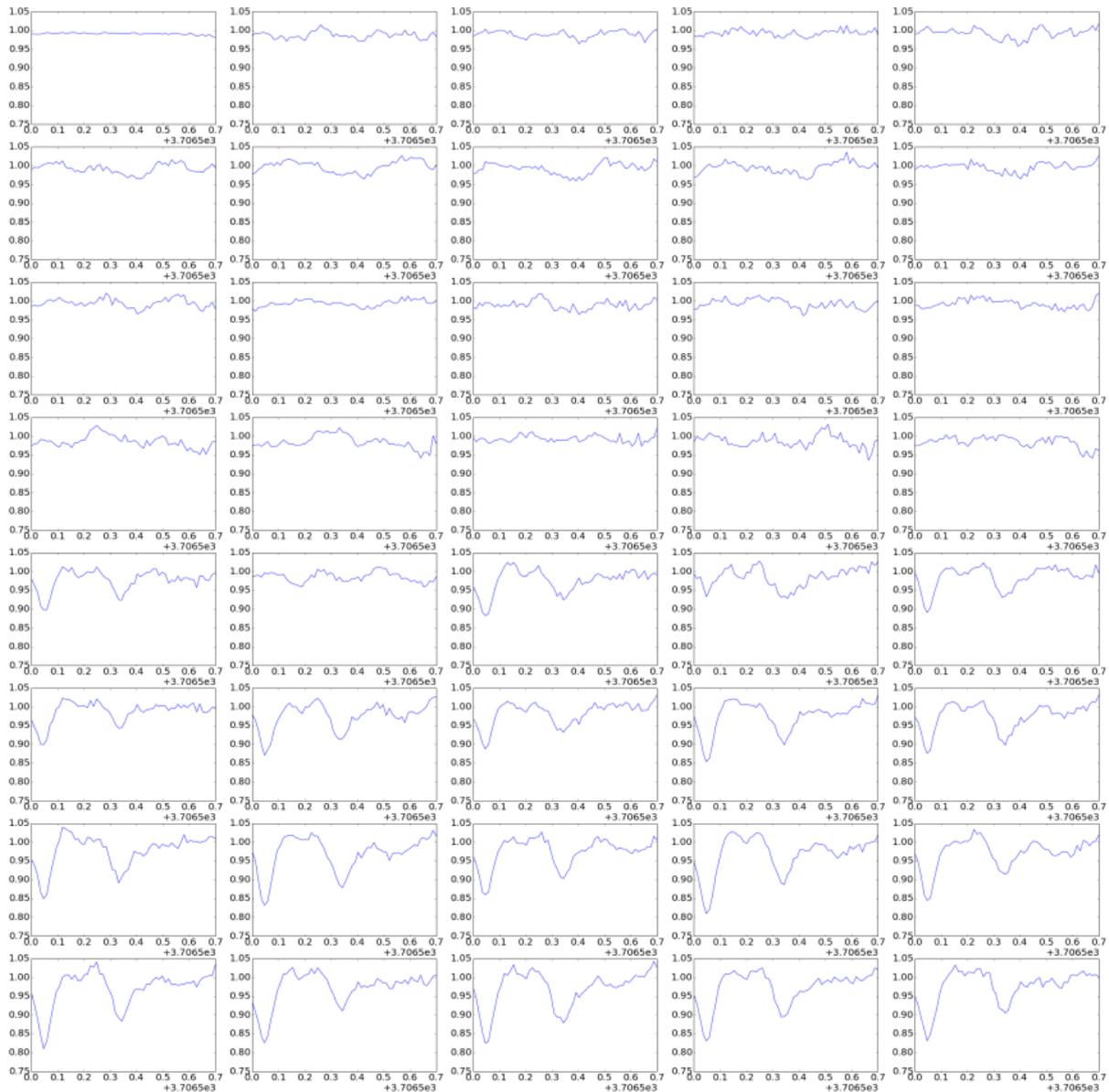


Figure 124 : 40 spectres acquis et étalonnés au cours de la rotation du faisceau 1

En observant la Figure 124 et connaissant le trajet du faisceau 1, on peut interpréter un peu grossièrement les spectres acquis : le faisceau est initialement au bord de la zone d'étude. Il traverse uniquement la tranche d'atmosphère au début de la rotation, ce qui se traduit par une absence totale de raie sur les premiers spectres (quatre première lignes de la Figure 124). Ensuite, le faisceau entre dans la flamme et on peut observer sur les spectres l'apparition de raies qui sont relativement faibles lorsque le faisceau est au bord de la

flamme puis qui augmentent lorsque le faisceau se rapproche du centre (quatre dernières lignes de la Figure 124).

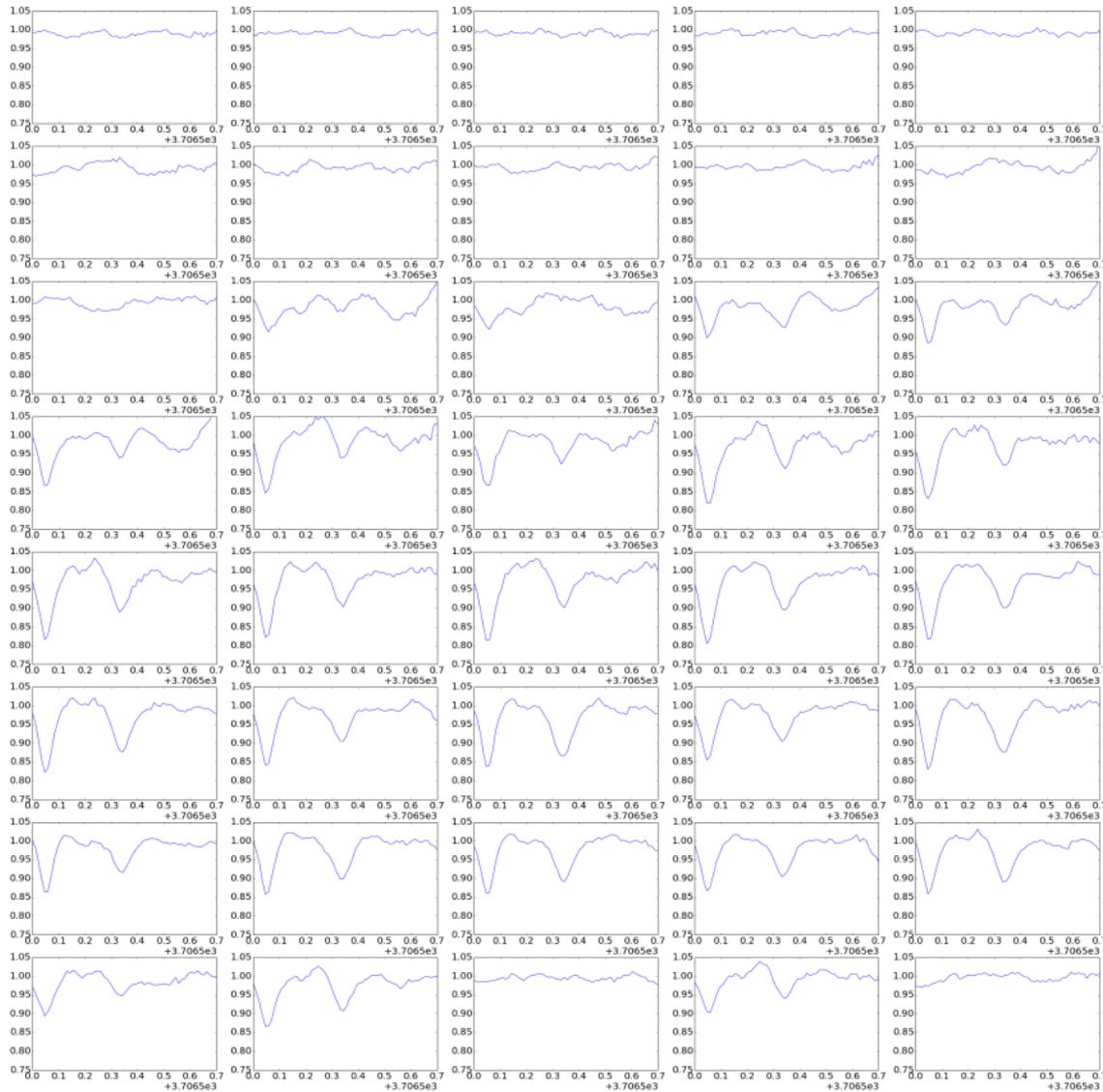


Figure 125 : 40 spectres acquis et étalonnés au cours de la rotation du faisceau 3

Au cours de la rotation du faisceau 3, on peut également observer l'évolution des raies sur les spectres. Au début de la rotation, le faisceau traverse l'atmosphère, donc aucune raie n'est observée (trois premières ligne de la Figure 125) puis il entre dans la flamme, ce qui est mis en évidence par l'apparition des raies dont l'intensité augmente lorsque le faisceau se rapproche du centre (de la troisième ligne de la Figure 125 à la dernière ligne de la Figure 125), puis les raies disparaissent lorsque le faisceau sort de la flamme pour traverser à nouveau la tranche d'atmosphère (dernière ligne de la Figure 125).

D'après ces figures, tous les spectres sont bruités, nous avons évalué le bruit à partir de spectres sans raies acquis en dehors de la flamme et avons mesuré un écart-type de 0,01. En revanche, il est possible d'observer que le bruit de mesure n'est pas exactement un bruit blanc. En effet, des fluctuations basses fréquences sont visibles principalement sur les spectres sans raies mais aussi sur les spectres avec raies. Notre hypothèse expliquant ces fluctuations est que des turbulences locales dans la flamme perturbent la traversée du faisceau par des variations d'indice optique et l'intensité reçue par le détecteur varie. Ces fluctuations ne faisant pas partie de l'enveloppe spectrale elles persistent après sa suppression et sont présentes sur les spectres étalonnés.

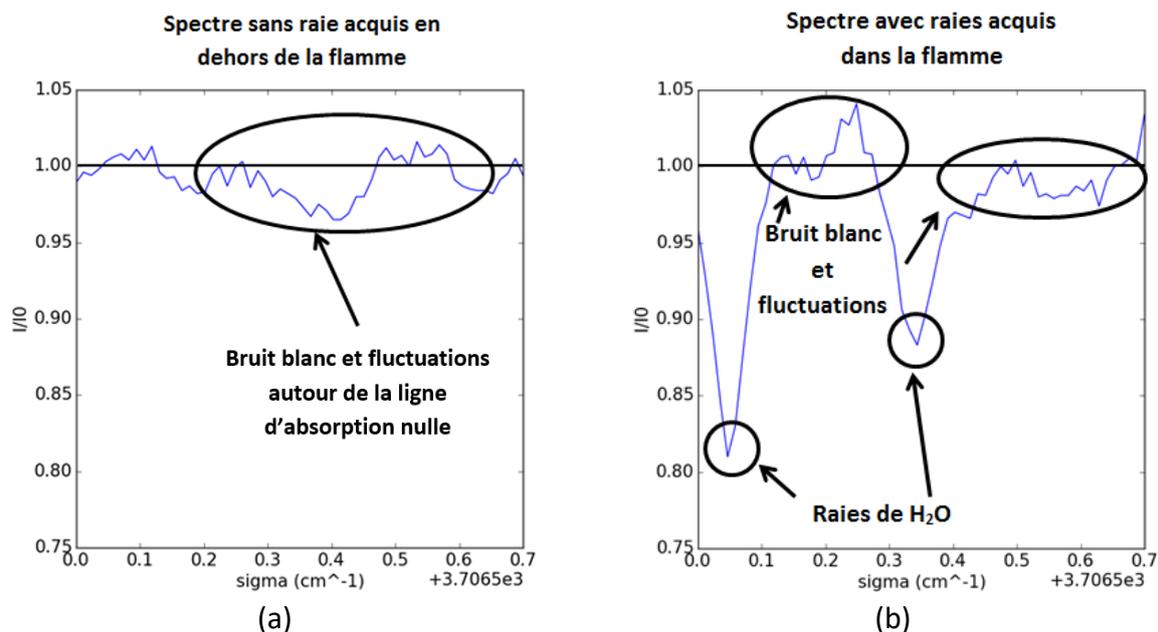


Figure 126 : Représentation d'un spectre acquis (a) à l'extérieur de la flamme et (b) au centre de la flamme

Ce phénomène n'est pas pris en compte dans l'étude paramétrique du chapitre 4, il est donc à prévoir des ajustements de la valeur de ces paramètres pour cette reconstruction expérimentale. Ces fluctuations à basses fréquences peuvent être interprétées par l'algorithme comme la présence de raies d'absorption, ce qui peut perturber la convergence vers la bonne solution. Ainsi, nous avons reconsidéré la phase d'initialisation de l'algorithme pour améliorer sa convergence.

III) Reconstructions tomographiques expérimentales

1) Choix des paramètres de régularisation

Comme nous avons pu le voir au cours de l'étude paramétrique, la régularisation est le paramètre de réglage de l'algorithme qui a le plus d'influence sur la qualité de la

reconstruction. L'étude paramétrique pour la configuration de mesure choisie (40 positions par rayon et 60 points par spectres) a donné les meilleurs résultats avec les coefficients de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-8}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-9}$. Ainsi, étant donné que le niveau de bruit évalué sur les spectres mesurés semble équivalent à ceux avec lesquels ont été déterminés ces coefficients, ils devraient être les mieux adaptés pour cette mesure. Cependant, nous avons également vu dans l'étude paramétrique que lorsque l'objet à reconstruire n'est pas exactement celui avec lequel ces coefficients ont été déterminés, les coefficients optimaux ne sont donc pas nécessairement les mêmes. Nous avons donc choisi de traiter les spectres mesurés avec un ensemble de coefficients de régularisation balayant un intervalle autour des valeurs issues de l'étude paramétrique.

2) Reconstruction avec initialisation plate

L'initialisation de l'algorithme est une étape primordiale pour une convergence vers une solution correcte. Nous avons testé deux types d'initialisation.

Nous avons tout d'abord testé une initialisation avec des images uniformes non-informative de concentration en H_2O et de température. La concentration initialisée à 0 cm^{-3} et la température à 300 K. L'idée sera de comparer les résultats obtenus avec cette initialisation uniforme avec ceux obtenus par la suite avec une initialisation plus informative (disque uniforme). L'information spectrale acquise à travers cet objet ne contient aucune raie initiale. Chaque spectre prédit initialement est donc une ligne de base à 1 sans raies. Le résultat de reconstruction sera donné au bout de 10 itérations.

La reconstruction tomographique a été effectuée pour plusieurs paires de coefficients de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T . Nous avons tout d'abord fait varier les coefficients entre $1,0 \cdot 10^{-9}$ et $1,0 \cdot 10^{-5}$. A partir de ces paires de coefficients de régularisation, nous avons tracé la cartographie de l'adéquation aux données qui est une indication quantitative : bien que ce critère ne caractérise pas complètement la qualité d'une reconstruction puisque nous avons affaire à un problème inverse, c'est néanmoins une mesure intéressante et qui peut être comparée entre deux reconstructions utilisant des paramètres de régularisation différents. Nous avons ensuite utilisé cette cartographie pour nous aider à définir une bonne reconstruction. Trois points de fonctionnement principaux ont été repérés sur cette carte.

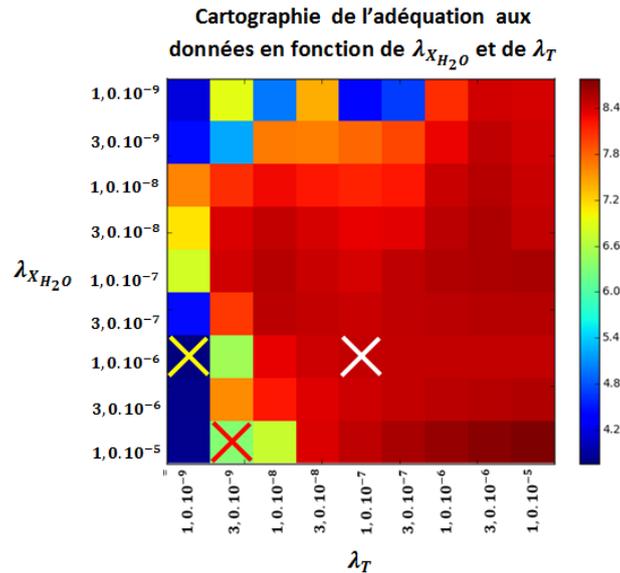


Figure 127 : Cartographie de l'adéquation aux données en fonction des coefficients de régularisation de la concentration et de la température pour des reconstructions avec l'initialisation uniforme : la croix blanche représentant le point optimal prédit par les simulations, la croix jaune le point donnant la meilleure adéquation aux données et la croix rouge le point donnant le résultat a priori le plus proche de la forme de flamme attendue

Le premier résultat correspond à la paire de coefficients de régularisation qui a été prédit comme optimal par l'étude paramétrique à savoir $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0.10^{-6}$ et $\lambda_T = 1,0.10^{-7}$. Ce point particulier est représenté par une croix jaune sur la cartographie d'erreur de la Figure 127. Les résultats de reconstructions sont représentés sur la Figure 128 (a) et (b). Comme on peut le voir sur cette figure, la forme du profil de concentration est cohérente car elle représente bien une tâche de forte intensité un peu décentrée dans l'image ce qui correspond à la position de la flamme, comme nous le verrons dans la section suivante en recherchant un objet paramétrique initial. En revanche, la circularité de la flamme n'est pas parfaitement reproduite, l'image est très bruitée et des zones de fortes concentrations sont présentes en dehors de la flamme à des endroits où elles devraient être théoriquement nulles. En ce qui concerne la température, on observe clairement une régularisation trop importante car l'image obtenue est beaucoup trop lisse, en fait quasiment uniforme à un niveau de température beaucoup trop bas par rapport à la température attendu dans un MacKenna (approximativement 2000 K). Ces coefficients ne donnent donc pas un résultat correct et il faut trouver une autre paire de coefficients donnant un meilleur résultat.

Dans un second temps, nous avons observé le résultat donné par la paire de coefficients de régularisation donnant la meilleure adéquation aux données. Cette paire est $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0.10^{-6}$ et $\lambda_T = 1,0.10^{-9}$. Dans ce cas, le profil de flamme MacKenna n'est également pas bien reproduit (Figure 128 (c) et (d)). On observe bien une tache de forte concentration et de forte température au centre de l'image. En revanche, l'image reconstruite est très bruitée et on observe diverses tâches et traits de forte concentration et température en dehors de la flamme.

Nous avons donc choisi de récupérer un résultat fournissant une adéquation aux données moins bonne mais dont la forme a priori de la reconstruction était la plus proche du résultat attendu ($\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-5}$ et $\lambda_T = 3,0 \cdot 10^{-9}$). Le résultat est également représenté sur la Figure 128 (e) et (f). Ce résultat respecte mieux la forme de l'objet que les deux autres. Il présente néanmoins des zones de fortes concentrations et températures en dehors de la flamme.

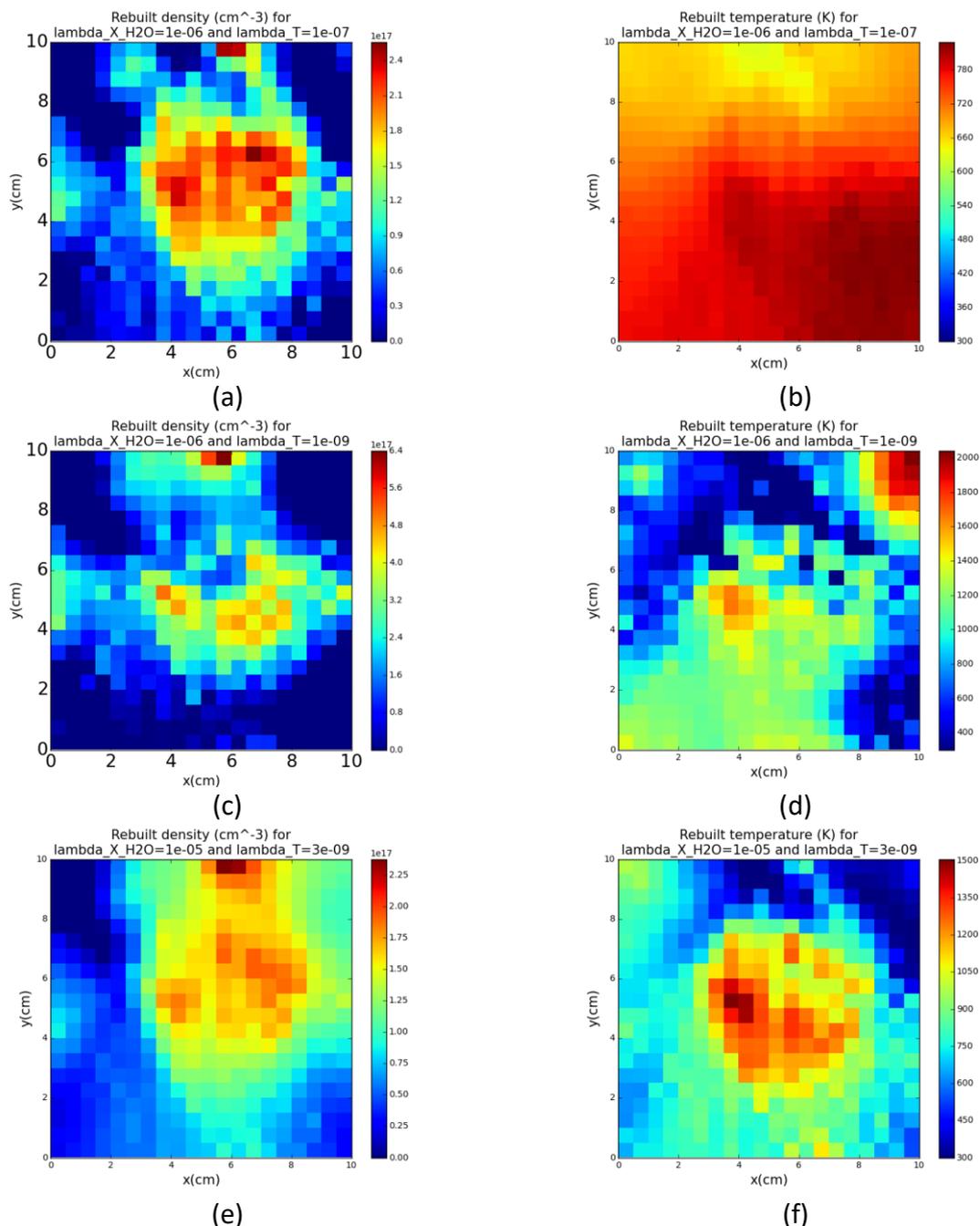


Figure 128 : Résultats de reconstruction avec initialisation uniforme de concentration en H₂O et de température : (a) et (b) pour les coefficients de régularisations prédits comme optimaux par l'étude paramétrique, (c) et (d) résultats donnant la meilleure adéquation aux données, (e) et (f) résultats donnant la meilleure forme de flamme reconstruite

Il est possible d'observer dans quelle mesure l'adéquation aux données est respectée dans les différents cas de reconstructions. Nous allons tracer, pour le faisceau 3, des exemples de spectres mesurés superposés à ceux obtenus à travers les distributions qui ont donné la meilleure adéquation (Figure 128 (c) et (d)) ainsi qu'à travers celles qui donnent la forme de flamme la plus plausible (Figure 128 (e) et (f)).

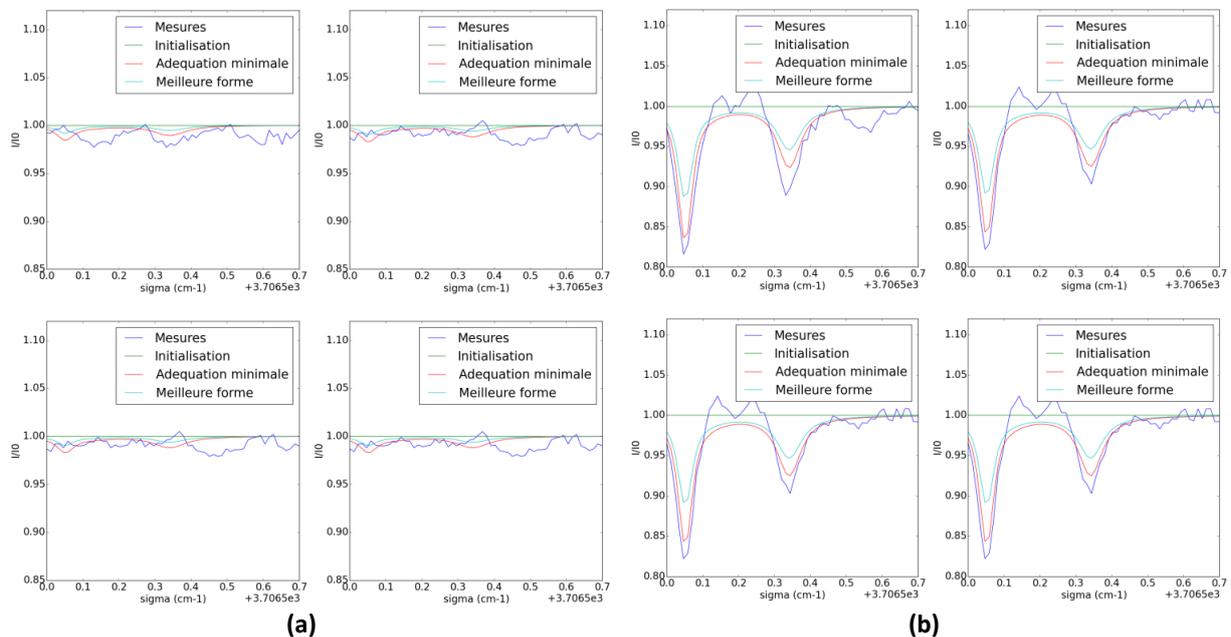


Figure 129 : Représentation de 8 spectres acquis au cours de la rotation du faisceau 3 (bleu), superposés aux spectres simulés à travers les distributions initiales (vert) et aux spectres simulés à travers les distributions reconstruites par l'algorithme (rouge pour la solution avec $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0 \cdot 10^{-6}$ et $\lambda_T = 1, 0 \cdot 10^{-9}$ et bleu ciel pour la solution avec $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0 \cdot 10^{-5}$ et $\lambda_T = 3, 0 \cdot 10^{-9}$)

Lorsque l'on observe les spectres d'absorption reconstruits (Figure 129) et qu'on les compare avec les spectres mesurés dans le cas de la meilleure adéquation aux données on peut constater que sur les spectres acquis dans la flamme, les raies les plus intenses de ces spectres sont bien reconstruites, mieux que dans la solution plus régularisée. Cependant en regardant ce qui se passe en dehors de la flamme, on voit que la solution qui donne la meilleure adéquation suit plus les fluctuations de spectre que la solution de la solution donnant la meilleure forme de flamme. Or on sait que ces fluctuations sont des artefacts de la méthode de traitement des données et ne correspondent pas à une absorption réelle dans cette zone. On retrouve, au niveau des spectres, l'explication des différences d'apparence des solutions observée en Figure 128 avec une solution peu régularisée qui a tendance à faire apparaître des valeurs de températures élevées. De fortes concentrations et températures sont retrouvées à l'extérieur de la flamme alors qu'elles devraient être nulles ou égales la température atmosphérique.

Pour tenter d'obtenir des résultats de meilleure qualité, et notamment d'éviter de répartir les variations de concentration et de température en dehors de la flamme, nous avons choisi d'utiliser une initialisation de l'algorithme plus proche de ce qui est attendu comme profil de la flamme MacKenna. Pour cela, nous avons utilisé l'initialisation avec le disque uniforme. L'idée est de déterminer si on initialise l'objet avec une forte concentration et une forte température sur une zone particulière de l'image (dans ce cas, le centre de la flamme), l'algorithme conserve cette forme générale en faisant un ajustement pour mieux correspondre aux données.

3) Reconstruction avec initialisation sous forme de disque uniforme

Afin de choisir l'initialisation la plus adéquate possible pour l'algorithme, nous ajustons une forme paramétrique simple de flamme sur les spectres mesurés. Il s'agit de deux disques uniformes de concentration en H_2O et de températures semblables à ceux utilisés dans l'étude paramétrique mais dont nous ajustons la valeur ainsi que la position horizontale et verticale. Le choix de ce type d'initialisation se justifie par le fait que la contribution du H_2O atmosphérique sur les spectres a été supprimée (ce qui est équivalent à une absence totale de H_2O dans l'atmosphère détectée par le spectromètre) et par le fait que la température à l'extérieure de la flamme est égale à la température atmosphérique. De plus, le diamètre de la flamme est connu et égal au diamètre du poreux par lequel sont envoyé les gaz qui réagissent à savoir 6 *cm*.

Ainsi, nous avons ajusté les spectres calculés à partir de ces distributions calibrées en modifiant les valeurs de concentration en H_2O et de température ainsi que la position de l'objet dans la zone d'étude. Le critère d'ajustement est le critère d'adéquation aux données (équation (78) chapitre 4 I)3) page 110) et l'optimisation est réalisée par balayage sur une grille dans l'espace des paramètres, d'abord sur la position de l'objet, puis sur les niveaux de concentration et de température, le résultat est donné sur la Figure 130.

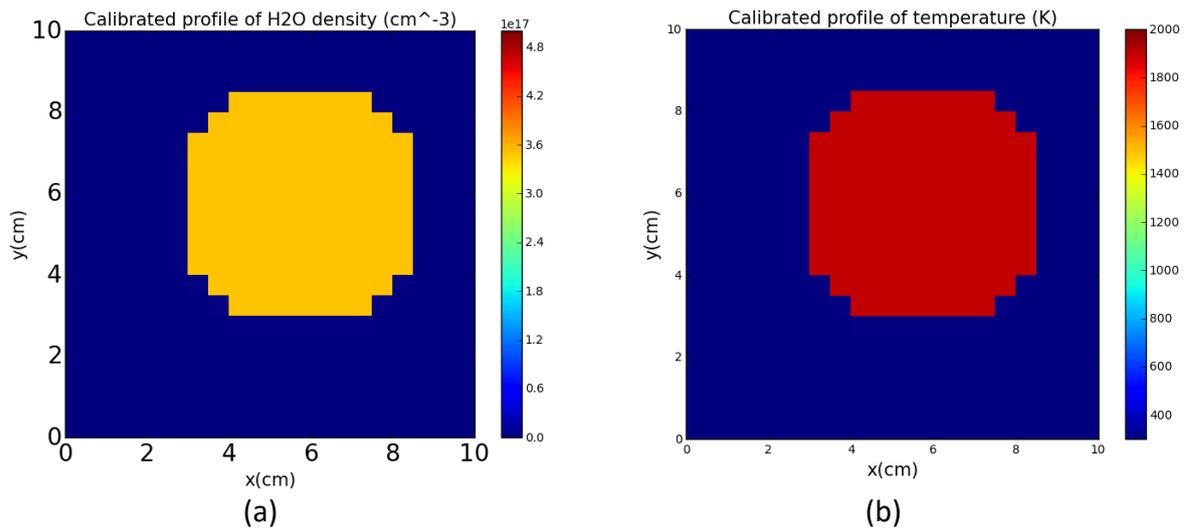


Figure 130 : Distributions initialisées de (a) concentration en H₂O et (b) température donnant la meilleure adéquation aux données

Les spectres obtenus par propagation à travers ces deux distributions initiales sont représentés sur la Figure 131 superposées aux spectres mesurés aux mêmes positions autour de la vraie flamme. On peut remarquer sur cette figure que le positionnement et les valeurs contenues dans ces disques permettent déjà de reproduire correctement les spectres d'absorption acquis à travers le brûleur MacKenna. Dans le cas de l'adéquation aux données, la valeur avec l'initialisation plate est de 20,0 tandis qu'elle est de 4,22 avec l'initialisation avec les disques uniformes. Nous avons alors fait l'hypothèse qu'un objet donnant initialement une adéquation plus faible que celui avec l'initialisation plate tout en ayant une forme proche de l'objet à reconstruire permettrait une convergence vers une solution plus proche du véritable objet.

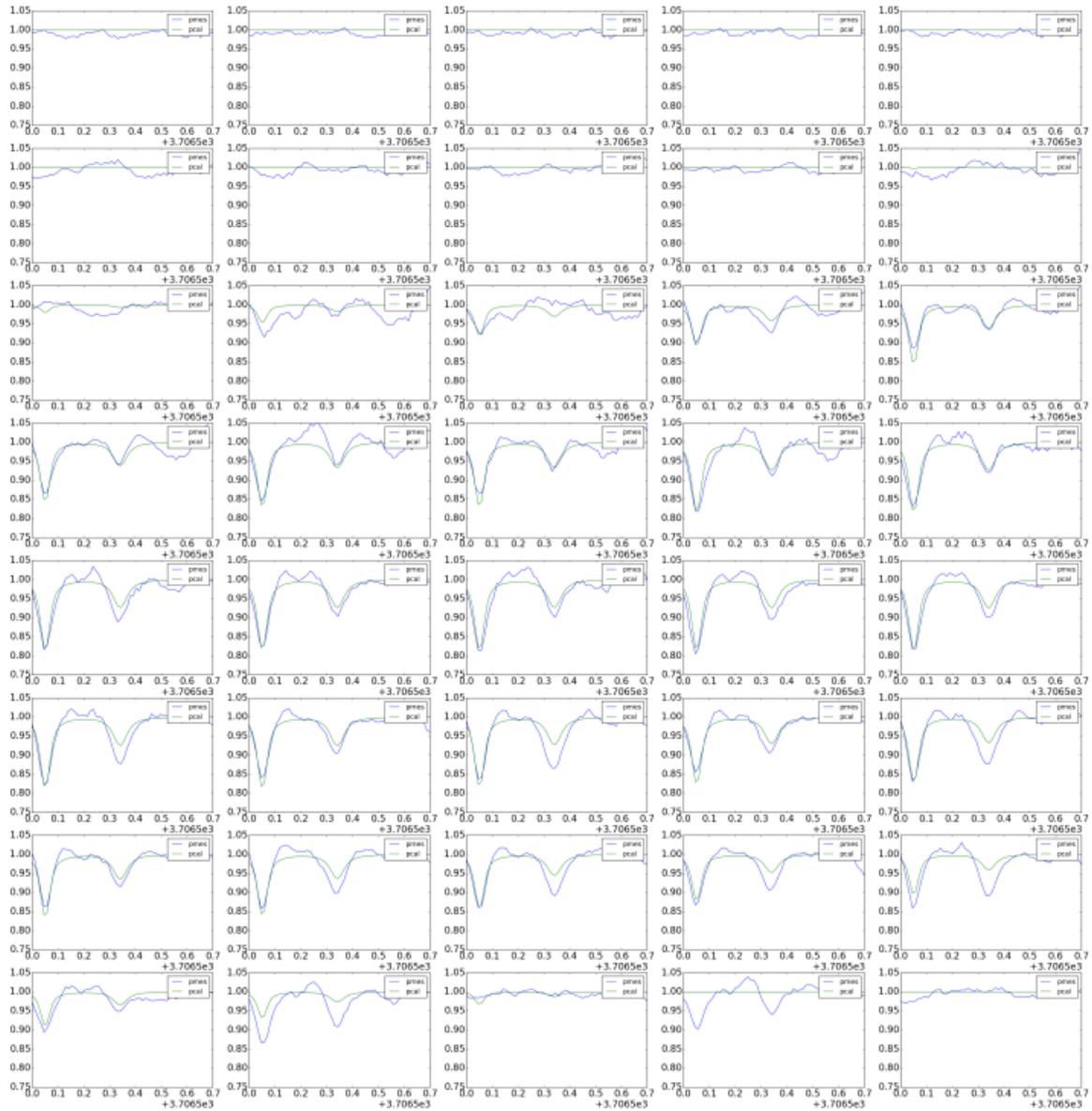


Figure 131 : Spectres mesurés par le faisceau 3 au cours de la rotation de la couronne (en bleu) et spectres obtenus à travers les profils initialisés (en vert) aux mêmes positions autour de la flamme

Pour la reconstruction tomographique partant de cette initialisation, nous avons également testé plusieurs paires de coefficients de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}}$ et λ_T chacun variant entre $1,0 \cdot 10^{-9}$ et $1,0 \cdot 10^{-5}$. Tout comme pour la Figure 127, nous avons repéré les mêmes trois points particuliers : celui prédit comme optimal par les simulations, celui donnant la meilleure adéquation aux données et celui donnant la meilleure reproduction a priori de la flamme à reconstruire (Figure 132).

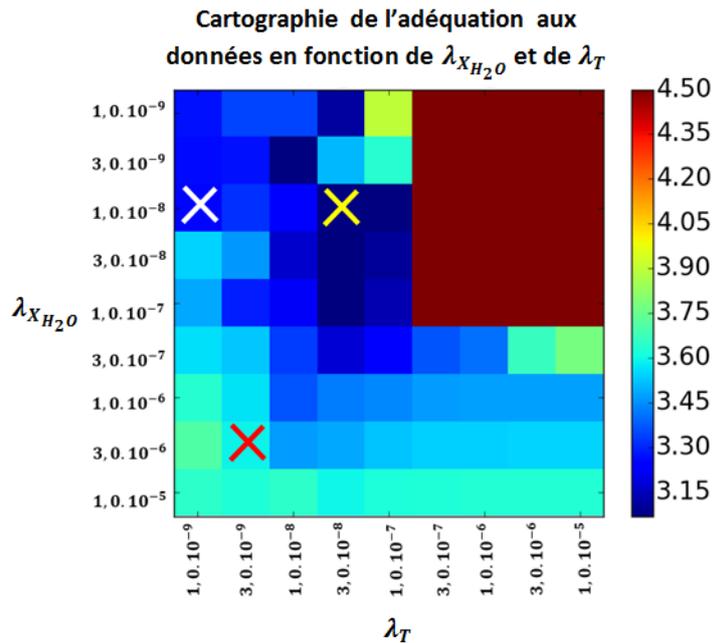


Figure 132 : Cartographie de l'adéquation aux données en fonction des coefficients de régularisation de la concentration et de la température pour des reconstructions avec l'initialisation avec un disque : la croix blanche représentant le point optimal prédit par les simulations, la croix jaune le point donnant la meilleure adéquation aux données et la croix rouge le point donnant le résultat a priori le plus proche de la forme de flamme attendue

Dans ce cas également, les coefficients prédits par les simulations ($\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0.10^{-8}$ et $\lambda_T = 1,0.10^{-9}$) ne donnent pas des résultats satisfaisants (Figure 133 (a) et (b)). Ce qui est également le cas pour la paire de coefficients ($\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0.10^{-8}$ et $\lambda_T = 3,0.10^{-8}$) donnant la meilleure adéquation aux données (Figure 133 (c) et (d)). En effet, dans les deux cas, la concentration reconstruite est très faible et la distribution géométrique de la flamme n'est pas bien reproduite. En ce qui concerne la température, la distribution géométrique est assez bien reproduite mais les valeurs de la température entre 400 K et 1200 K sont trop faibles pour un brûleur MacKenna dans lequel la température de flamme est d'environ 1800 K.

En revanche, de la même manière que l'initialisation plate, sans tenir compte de l'adéquation aux données, il est possible de récupérer un résultat reproduisant bien un profil attendu pour une flamme MacKenna. Ces résultats sont obtenus pour la paire de coefficients $\lambda_{X_{H_2O}} = 3,0.10^{-6}$ et $\lambda_T = 3,0.10^{-9}$ et ils sont représentés sur la Figure 133 (e) et (f). En ce qui concerne les valeurs obtenues, elles sont assez proches de ce qui est attendu pour la température. En effet, les valeurs atteignent 1600 K dans la flamme et descendent à 800 K sur ses bords. On remarque cependant la présence de zones de fortes concentrations et de fortes températures en dehors de la flamme.

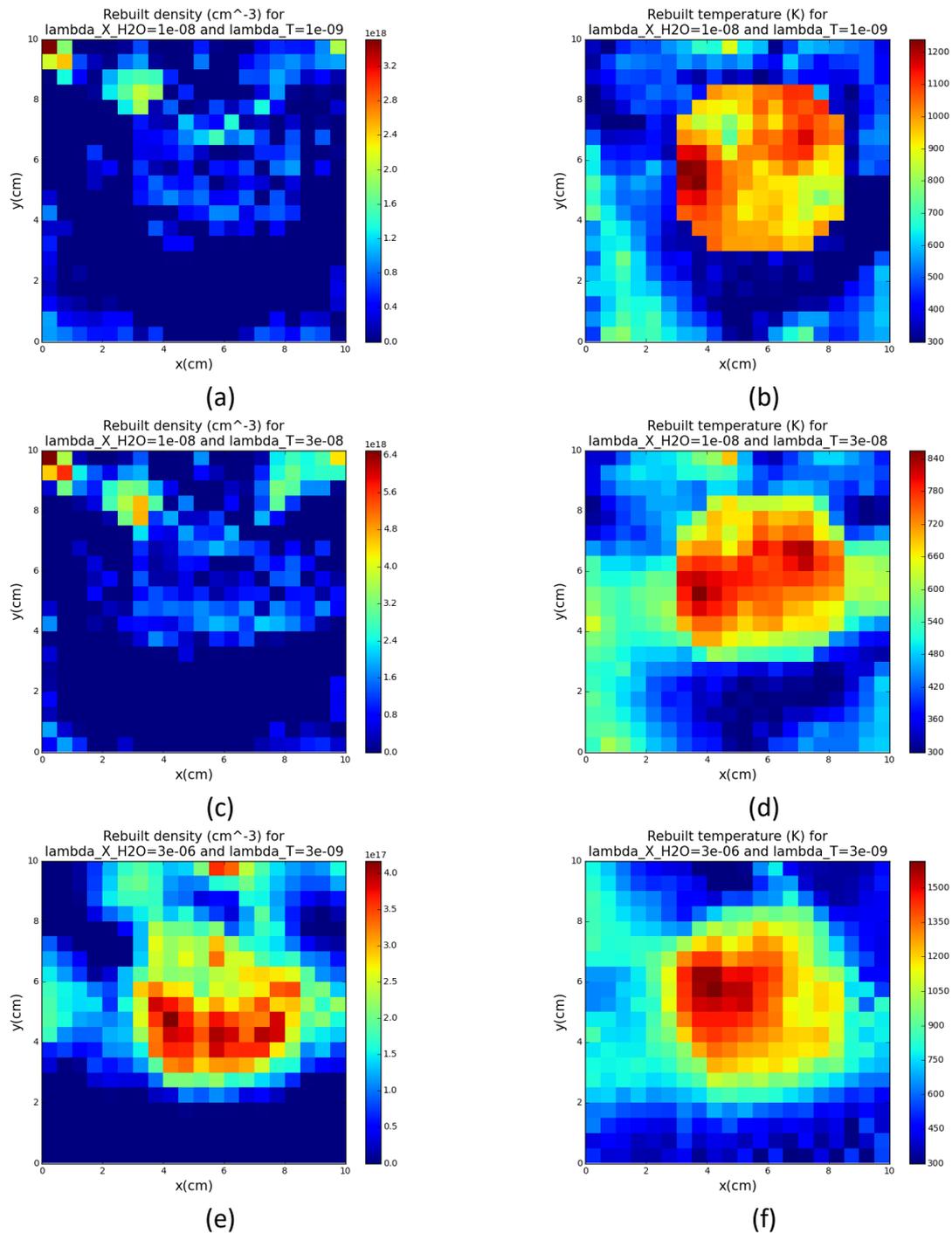


Figure 133 : Résultats de reconstruction avec initialisation en forme de disque de concentration en H_2O et de température : (a) et (b) pour les coefficients de régularisations prédits comme optimaux par l'étude paramétrique, (c) et (d) résultats donnant la meilleure adéquation aux données, (e) et (f) résultats donnant la meilleure forme de flamme reconstruite

Dans ce cas également nous avons choisi d'observer les spectres d'absorption mesurés et reconstruits pour le résultat donnant la meilleure adéquation et celui donnant la forme de flamme la plus plausible (Figure 134).

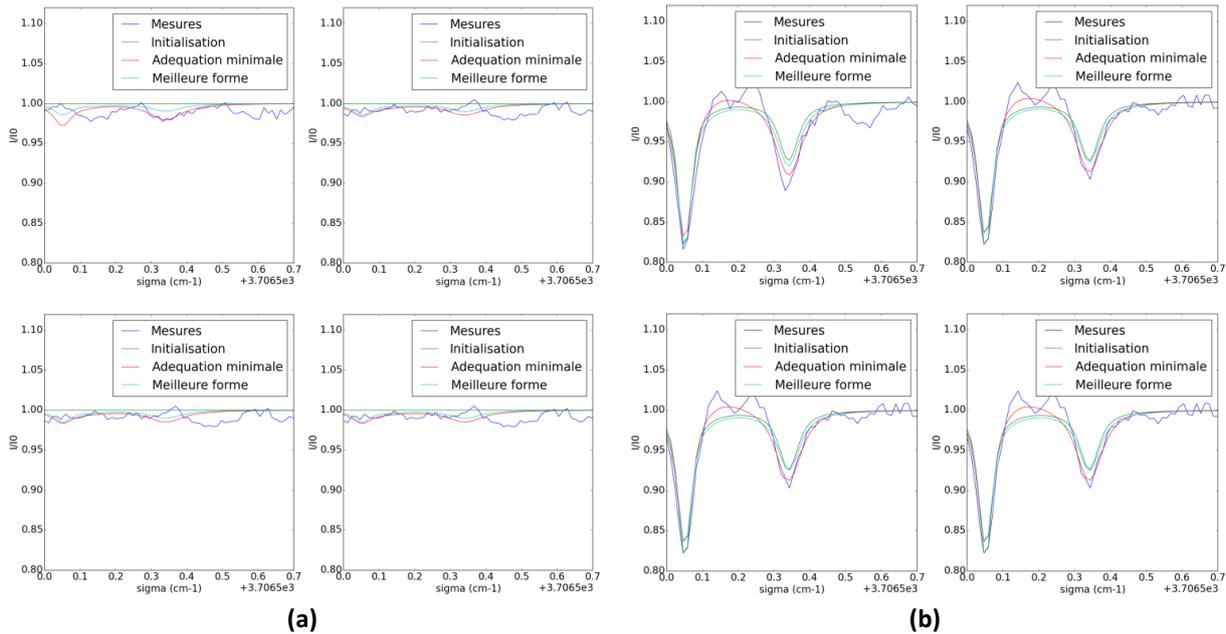


Figure 134 : Représentation de 8 spectres acquis au cours de la rotation du faisceau 3 (bleu), superposés aux spectres simulés à travers les distributions initiales (vert) et aux spectres reconstruits par l’algorithme (rouge pour la solution avec $\lambda_{X_{H_2O}} = 1, 0.10^{-8}$ et $\lambda_T = 2, 0.10^{-8}$ et bleu ciel pour la solution avec $\lambda_{X_{H_2O}} = 3, 0.10^{-6}$ et $\lambda_T = 3, 0.10^{-9}$)

Dans les deux cas de reconstructions, on remarque que les raies d’absorption ont été relativement bien reconstruites dans les spectres passant dans la flamme. L’initialisation avec le disque a permis à l’algorithme de démarrer les itérations avec des valeurs proches des mesures puis de faire des ajustements pour que l’adéquation aux données soit meilleure. Dans le cas des coefficients de régularisation $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0.10^{-8}$ et $\lambda_T = 3,0.10^{-8}$ (résultats de la Figure 133 (c) et (d)), l’adéquation aux données est la meilleure tandis que dans le cas des coefficients $\lambda_{X_{H_2O}} = 3,0.10^{-6}$ et $\lambda_T = 3,0.10^{-9}$, la régularisation est plus importante au détriment de l’adéquation mais le résultat est plus proche de la forme a priori d’une flamme MacKenna (résultats de la Figure 133 (e) et (f)). On observe également que les spectres reconstruits sont très proches dans le cas où l’adéquation est la meilleure et dans le cas où la forme de la flamme est a priori la meilleure.

On peut noter que malgré l’initialisation choisie, en dehors de la flamme l’algorithme continue de trouver des raies pour suivre les fluctuations des spectres mesurés, cependant ces phénomènes apparaissent quand même atténués par rapport au cas de l’initialisation plate.

Ces résultats de reconstructions expérimentales ont montré qu’il est possible de reconstruire des distributions en deux dimensions de concentration en H_2O et de température à partir de spectres expérimentaux. Nous avons étudié plusieurs cas de reconstructions pour plusieurs conditions de régularisation différentes et sélectionné en se basant en partie sur l’adéquation aux données, plusieurs solutions possibles pour

déterminer, de manière ad-hoc une reconstruction restant fidèle aux données tout en correspondant mieux à la forme attendue de la flamme. Il apparaît donc toujours utile de réfléchir à une méthode permettant d'optimiser le choix des paramètres de régularisation à partir des données expérimentales.

IV) Analyse des résultats expérimentaux

1) Comparaison avec les prédictions de l'étude paramétrique

La première observation qui peut être faite à partir des cartographies reconstruites expérimentalement est que les réglages de l'algorithme prédits par l'étude paramétrique ne sont pas exactement ceux qui ont donnés les meilleurs résultats.

Nous avons utilisé la configuration de mesures avec 40 positions angulaires pour les 5 faisceaux et avec 60 points par spectres. L'écart type du bruit de mesures sur les spectres expérimentaux a été évalué à 0,01. La flamme du brûleur MacKenna est un objet à reconstruire de forme simple similaire à celui utilisé dans l'étude paramétrique (Figure 94 page 144). Nous avons donc fait l'hypothèse que les réglages de cette configuration déterminée dans l'étude paramétrique seraient optimaux pour cette reconstruction expérimentale.

Tout d'abord, pour un écart-type de 0,01 les simulations numériques montraient que l'initialisation avec un disque uniforme était mieux adaptée pour reconstruire ce type d'objet mais que peu de différence sur l'erreur de reconstruction était constatée avec les autres initialisations. Nous avons pu vérifier le même phénomène sur les données expérimentales à savoir que l'initialisation avec un disque uniforme a permis d'obtenir une meilleure reconstruction qu'avec l'initialisation uniforme.

En ce qui concerne la régularisation de Tikhonov, les paramètres trouvés pour le cas expérimental ne correspondent pas à ceux prédits par l'étude paramétrique. En effet, d'après les simulations, pour ce niveau de bruit et pour cette configuration de mesures avec une initialisation uniforme, les coefficients de régularisation optimaux sont $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-6}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-7}$ tandis que ce qui ont donné la meilleure adéquation sont $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-6}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-9}$ et ceux qui ont donné les résultats les plus proche de la forme attendue de flamme sont $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-5}$ et $\lambda_T = 3,0 \cdot 10^{-9}$.

Dans le cas de l'initialisation avec le disque, les simulations ont donné le meilleur résultat pour $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-8}$ et $\lambda_T = 1,0 \cdot 10^{-9}$ tandis que expérimentalement, la meilleure adéquation est obtenu pour $\lambda_{X_{H_2O}} = 1,0 \cdot 10^{-8}$ et $\lambda_T = 3,0 \cdot 10^{-8}$ et la reconstruction qui

visuellement est la plus proche d'une flamme MacKenna est obtenue pour $\lambda_{x_{H_2O}} = 3,0 \cdot 10^{-6}$ et $\lambda_T = 3,0 \cdot 10^{-9}$.

Dans les deux cas d'initialisation, les coefficients prédits n'étaient pas exactement ceux qui ont donné le meilleur résultat. Ce phénomène peut s'expliquer par le fait que les conditions expérimentales n'ont pas été entièrement modélisées dans l'étude paramétrique. En effet, nous n'avons pas tenu compte des effets provenant du fait de moyenner les spectres ni des déformations d'enveloppes provenant des turbulences dans la flamme. Par ailleurs, le bruit utilisé pour les simulations est un bruit blanc qui n'est pas très représentatif du type de bruit observé sur les spectres expérimentaux (notamment les fluctuations visibles en dehors de la flamme).

Ainsi, il est nécessaire d'améliorer la méthode de détermination des coefficients de régularisation optimaux. Pour cela, il faudrait modéliser plus précisément les effets de détérioration des spectres lors de l'acquisition et de l'étalonnage spectral sur les données simulées et éventuellement modéliser les déformations de l'enveloppe dues aux turbulences dans la flamme. Ce qui permettrait de faire à nouveau des optimisations de coefficients de régularisation par cartographie de l'erreur globale avec des données plus réalistes. Dans ce cas, les coefficients déterminés seraient plus proches de ceux nécessaires sur des données expérimentales.

Par ailleurs, il serait utile de développer une méthode permettant d'optimiser ces coefficients à partir de données expérimentales. Couramment, la méthode de la L-curve est utilisée en tomographie linéaire, mais nous avons vu qu'elle n'est applicable dans un cas linéaire avec une seule grandeur à reconstruire. Il existe d'autres méthodes dans la littérature qui pourraient être utilisées dans le cas de la TDLAT telles que la méthode CRESO [67] ou la U-curve [68], qui permettrait une optimisation de plusieurs coefficients de régularisation simultanément [69].

Enfin, nous pourrions essayer de tracer une surface représentant l'adéquation aux données en fonction de la régularisation sur la concentration et de la régularisation sur la température. Ce type de graphique permettrait d'optimiser la régularisation en tenant compte de l'adéquation aux données et des effets de la régularisation à la fois sur la concentration et la température à la manière d'une L-curve mais en deux dimensions. Cette méthode permettrait également d'optimiser la régularisation en utilisant uniquement les données expérimentales sans utiliser de simulations au préalable.

2) Sensibilité de la reconstruction

Une source possible des difficultés à trouver une solution correcte est la sensibilité des spectres par rapport aux distributions en deux dimensions que l'on cherche à reconstruire. En effet, d'après les résultats de reconstructions, certains donnent une adéquation aux données meilleures que d'autres mais en observant les spectres d'absorption (Figure 129 et Figure 134), on peut constater que les différences entre les spectres reconstruits sont faibles malgré le fait que les résultats des trois reconstructions soient très différents. Ce comportement est classique pour un problème inverse ou sous-déterminé. Cependant, si la sensibilité des données à un paramètre devient trop faible on peut penser que la reconstruction d'un profil correct sera impossible.

Il est possible de donner une potentielle explication physique à la limitation de la sensibilité observée en TDLAT. En effet, en TDLAS classique, les spectres d'absorption permettent de reconstruire des valeurs intégrées sur une certaine longueur d'absorption qui sont souvent de l'ordre de plusieurs centimètres. Or, dans le cas de la TDLAT, on cherche à retrouver la valeur contenue dans un pixel de dimension dans le cas présent de l'ordre de $0,5\text{ cm}$. Ce qui fait une longueur d'absorption relativement faible en comparaison des longueurs habituellement caractérisées en TDLAS. Ainsi, nous émettons l'hypothèse qu'à partir d'une certaine taille de pixels et d'un certain nombre de pixels à reconstruire, l'impact d'un pixel sur le spectre d'absorption est très faible et n'est pas observable. Ce problème d'observabilité est en plus à mettre en regard du niveau de bruit sur les données : dans le cas où les spectres sont très bruités, des variations relativement faibles sur les spectres peuvent être totalement masquées par le bruit.

Dans le cas du spectromètre que l'on utilise pour cette reconstruction tomographique, l'intervalle spectral est compris entre $3706,4\text{ cm}^{-1}$ et $3707,0\text{ cm}^{-1}$. Sur cet intervalle deux raies d'absorption du H_2O sont présentes. En TDLAS, il est possible de prédire une sensibilité à la température sur les spectres d'absorption [70] en mesurant le rapport de ces deux raies en fonction de la température (Figure 135).

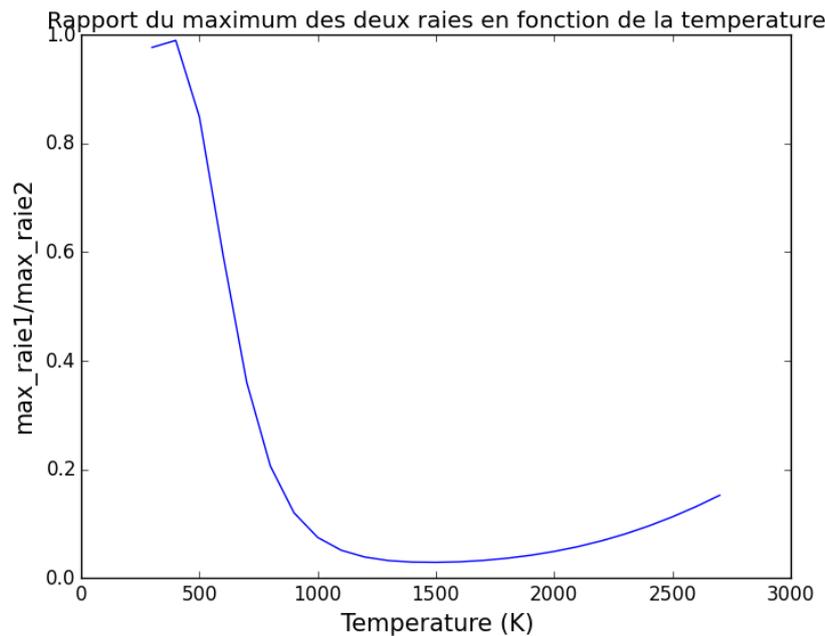


Figure 135 : Rapport des deux raies d'absorption du H₂O en fonction de la température.

Comme on peut le voir sur la Figure 135, le rapport des deux raies évolue beaucoup en fonction de la température entre 500 K et 1000 K. En revanche, entre 1000 K et 2000 K, cette variation est beaucoup moins importante, ce qui signifie que pour des hautes valeurs de température la sensibilité des spectres est moins importante. Cette première courbe montre donc que l'intervalle spectral n'est pas sensible à de grandes variations de températures entre 1000 K et 2000 K. Le tracé de cette courbe est fait sur une longueur d'intégration de 6 cm. Or, la dimension des pixels que nous cherchons à reconstruire est de 0,5 cm.

Nous avons donc tracé la même courbe en considérant toujours une longueur d'intégration de 6 cm soit 12 pixels de 0,5 cm mais cette fois-ci en faisant évoluer la température entre 300 K et 2700 K uniquement sur un pixel. Les autres étant fixé à une température de 1800 K. Le résultat est représenté sur la Figure 136.

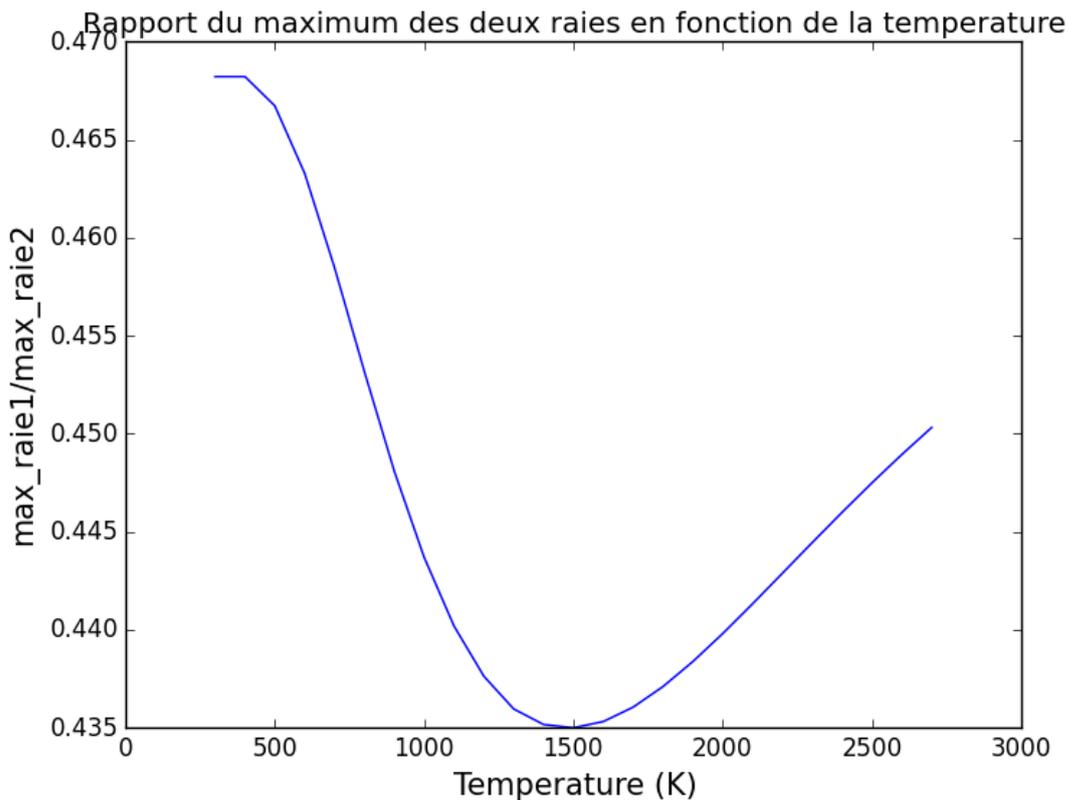


Figure 136 : Représentation du rapport des deux raies d'absorption du H₂O en fonction de la température contenue dans un seul pixel

Comme on peut le voir sur la Figure 136, la courbe a la même forme que celle de la Figure 135, mais le rapport des raies est très faible variant de 0,435 à 0,470 tandis qu'il varie entre 0 et 1 lorsque la température évolue sur la longueur d'intégration complète.

Ceci montre donc que la sensibilité à des variations de températures est très faible sur cet intervalle spectral et cette sensibilité est encore plus faible lorsque la longueur d'intégration est limitée à un seul pixel. Une autre manière d'illustrer cette sensibilité faible est de tracer tous les spectres qui ont permis d'obtenir cette courbe comme cela est présenté sur la Figure 137.

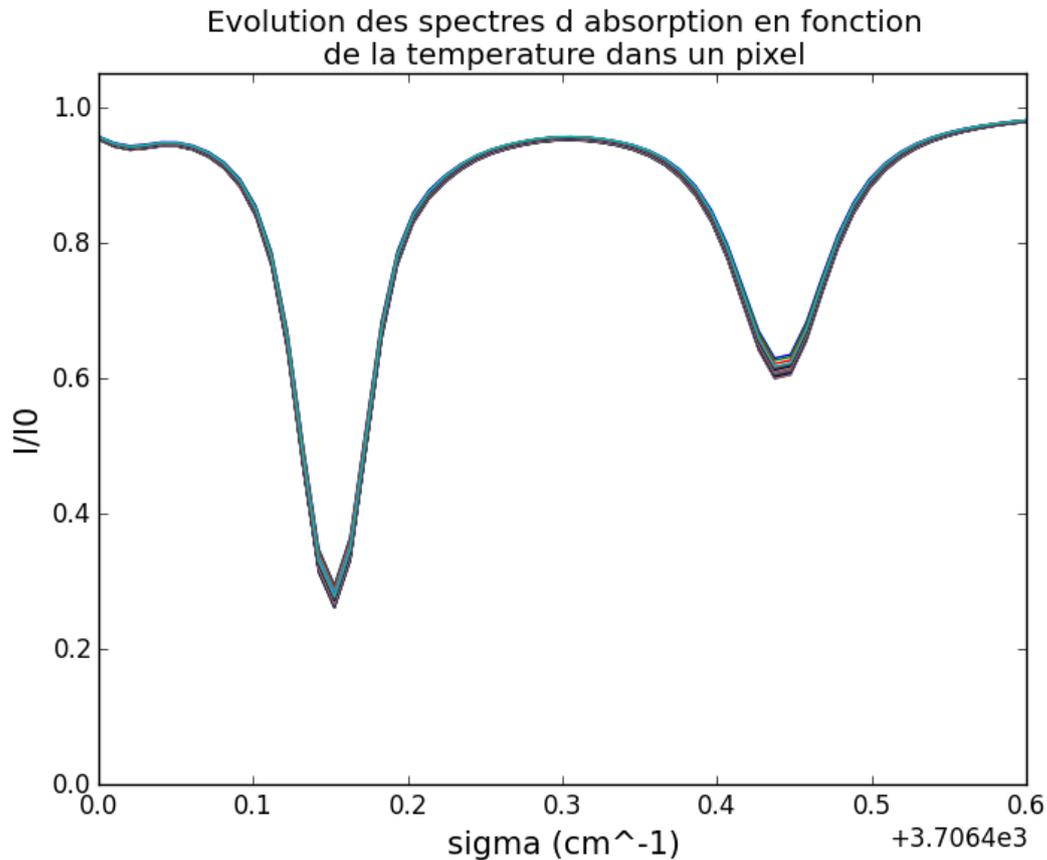


Figure 137 : Spectres d'absorption sur une longueur d'intégration de 6 cm avec un pixel de 0,5 cm dont la valeur de température varie entre 300 k et 2700 K.

Comme on peut le voir sur la Figure 137, les raies d'absorption varient très peu lorsque la valeur de température dans un pixel est modifiée même s'il s'agit d'une grande valeur de température. Un fort niveau de bruit rendrait donc ces variations complètement invisibles sur le spectre.

Ainsi, ce phénomène peut expliquer l'imprécision observée sur la reconstruction tomographique de la température. Le fait que des objets reconstruits très différents donnent deux adéquations très proches viendrait d'un problème de sensibilité des spectres aux variations des valeurs contenues dans les pixels. Un point supplémentaire est que dans le cas de la concentration, ce phénomène de perte de sensibilité est moins important mais on peut toujours constater que pour de faibles variations dans un seul pixel, les raies d'absorption ne sont pas beaucoup modifiées (Figure 138).

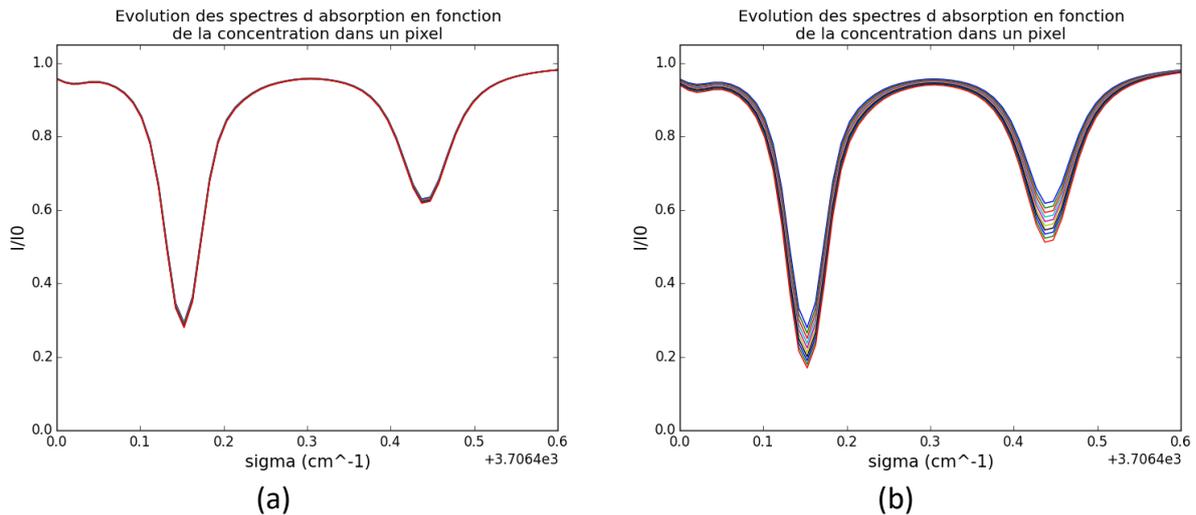


Figure 138 : Evolution des spectres d'absorption sur une longueur d'intégration de 6 cm avec un pixel de 0,5 cm dont la valeur de température varie (a) entre $1,0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $1,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et (b) entre $1,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $1,0 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

D'après la Figure 138, on remarque que sur la longueur d'intégration totale de 6 cm, si la concentration dans un pixel de taille 0,5 cm sur cette ligne varie de $1,0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ à $1,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ les variations sur le spectre sont très peu visibles. Elles le sont beaucoup plus pour de fortes variations comme entre $1,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à $1,0 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Ainsi, pour la concentration également, en cas de spectres très bruités, des variations de valeurs contenues dans un pixel de petites tailles peuvent ne pas être visibles sur le spectre. Il est aussi important de souligner que, pour de fortes variations de concentration, la variation des spectres est plus importante pour la concentration que pour la température, autrement dit la meilleure sensibilité des mesures à la concentration pourrait aussi jouer pour rendre inobservables les variations de température, ce qui peut expliquer que les reconstructions de concentration soient plus fiables que celles de température.

Pour éviter ces phénomènes provenant d'un manque de sensibilité des spectres, il serait nécessaire d'utiliser un autre intervalle spectral qui donnerait une meilleure sensibilité aux variations de la concentration et de la température. Il serait également utile d'augmenter la taille des pixels étudiés, ce qui améliorerait la sensibilité des spectres aux valeurs contenues dans ces derniers mais qui diminuerait la résolution spectrale. Il faudrait également diminuer le bruit au minimum par l'emploi de détecteurs plus sensibles ou avec des intensités lasers plus élevées.

3) Propositions d'améliorations de la reconstruction expérimentale

L'analyse des résultats a permis d'identifier les sources d'erreur dans notre système de mesure qui a une influence sur la convergence de l'algorithme.

Premièrement, nous avons constaté que la méthode pour optimiser les paramètres de régularisation devait être améliorée pour pouvoir exploiter directement les données expérimentales sans tenter de prédire les coefficients optimaux par des simulations. Une première perspective d'amélioration est donc de développer une optimisation basée sur les techniques CRESO, U-cure ou sur le tracé d'une cartographie de l'adéquation aux données en fonction de la régularisation de la concentration et de la température.

Ensuite, pour améliorer les résultats, il faudrait probablement utiliser un spectromètre permettant d'exploiter un autre intervalle spectral qui présente une meilleure sensibilité à la température. Par exemple, il serait intéressant de réaliser la même mesure avec le spectromètre émettant autour de $1,3 \mu m$ développé au cours de la thèse et présenté dans le chapitre 2 (III)1) page 57), qui présente des raies de H_2O dont le rapport pourrait donner une meilleure sensibilité à la température.

Enfin, nous pensons qu'une grande amélioration pourrait être obtenue en modifiant le système de scan des faisceaux. En effet, il serait très important d'augmenter le nombre de positions et d'angles de faisceaux. Pour cela, une amélioration envisageable serait d'utiliser une nappe laser divergente. Un collimateur optique relié à une fibre optique serait placé en sortie du spectromètre et une lentille divergente placée après le collimateur permettrait de créer cette nappe laser. Cette nappe serait mise en rotation avec le système de scan par rotation que nous avons développé et la détection se ferait avec une barrette CCD placée sur la couronne et mise en rotation avec la nappe laser (Figure 139). Un tel système a déjà été utilisé dans la littérature notamment dans l'article [66].

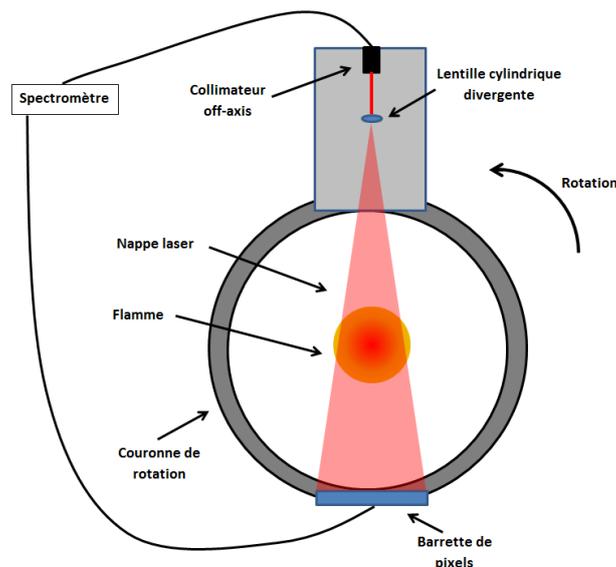


Figure 139 : Schéma du système de scan par rotation avec nappe laser

Ce système expérimental permettrait d'observer avec la nappe la flamme en entier et le scan par rotation permettrait de multiplier le nombre de positions angulaires autour de la flamme. La difficulté serait d'obtenir assez de puissance laser pour obtenir une nappe

suffisamment intense et de disposer d'une barrette CCD permettant une cadence d'acquisition assez rapide pour acquérir des spectres avec une résolution suffisante.

Conclusion

Cette étude sur l'application de méthodes d'inversion tomographique aux mesures par spectroscopie d'absorptions a conduit à plusieurs résultats originaux.

Premièrement, d'un point de vue expérimental, nous avons développé un système expérimental fonctionnel permettant la caractérisation de plusieurs espèces chimiques séparément ou simultanément et qu'il est possible d'installer sur des bancs de combustion. Nous avons proposé un système de mécanique de balayage par rotation permettant de multiplier les positions et les angles des faisceaux de mesures autour d'un écoulement afin de collecter les spectres nécessaires à la reconstruction tomographique. Ce système a été utilisé sur un banc de combustion de propergol de grande envergure pour réaliser des mesures de TDLAS un scan angulaire de la flamme puis sur un brûleur expérimental pour réaliser des mesures de tomographie. Deuxièmement, le développement de l'algorithme numérique d'inversion a permis de traiter les données acquises avec ce système expérimental afin de réaliser des reconstructions par tomographie non-linéaire. De plus, l'étude paramétrique menée au cours de la thèse a permis d'évaluer les performances de cet algorithme ainsi que proposer des améliorations envisageables.

L'analyse des différents résultats présentés au cours de cette thèse a permis de déterminer quels paramètres ont une influence sur la qualité des mesures par tomographie et donc de proposer des perspectives d'améliorations du dispositif expérimental et de l'algorithme de reconstruction.

En ce qui concerne l'algorithme de TDLAT, l'étude paramétrique que nous avons menée nous a permis d'évaluer les réglages optimaux de l'algorithme en fonction des conditions expérimentales. En revanche, ces réglages sont restés relativement approximatifs car les simulations ne reproduisent jamais parfaitement les conditions réelles des mesures telles que le niveau de bruit et les déformations de l'enveloppe spectrale provenant des turbulences dans la flamme. Ainsi, l'amélioration majeure qu'il est indispensable de mettre en œuvre est le développement d'une technique d'optimisation fiable de la régularisation pouvant être appliquée directement sur des données expérimentales sans utiliser de simulations par une étude paramétrique. Il serait intéressant de tester cette technique sur des données simulées et également dans un cas expérimental simple comme celui de la flamme du brûleur MacKenna. Cette technique pourrait d'abord être étudiée sur cas simplifié comme celui de notre étude paramétrique, à savoir sur la reconstruction d'une seule espèce chimique et de la température. L'étape suivante serait ensuite d'adapter ces réglages à la reconstruction de la pression, de la température et de plusieurs espèces chimiques. A plus long terme, l'algorithme pourrait être adapté pour reconstruire des distributions de concentrations chimiques et de grandeurs thermodynamiques à partir de spectres d'absorption issus de plusieurs spectromètres émettant sur chacun sur des

intervalles de nombre d'ondes différents. Ce qui permettrait des reconstructions multi-espèces permettant d'exploiter tous les spectromètres développés au cours de la thèse.

En ce qui concerne le dispositif expérimental, des perspectives d'améliorations sont également à envisager. Les techniques d'étalonnage spectral et de suppression d'enveloppe peuvent être perfectionnées afin d'améliorer les spectres exploités par l'algorithme de tomographie. D'autres spectromètres de TDLAS peuvent être développés afin de caractériser d'autres espèces chimiques présentes dans les flammes des bancs de combustions. Le système de scan par rotation peut également être amélioré en utilisant un système de lentilles permettant de disperser les faisceaux de mesures et couvrir plus de surfaces sur les flammes à reconstruire. L'utilisation d'un tel système permettrait d'augmenter le nombre de position et d'angles de mesures et donc d'améliorer les reconstructions tomographiques. Il nécessiterait une modification des moyens de mesures notamment par l'utilisation de matrices de pixels ou de caméra rapides afin de conserver une bonne résolution spectrale sur les spectres d'absorption. L'ensemble de ces modifications pourrait permettre d'obtenir un système expérimental et un algorithme de tomographie donnant des reconstructions plus précises.

Bibliographie

- [1] W. Demtröder, *Laser Spectroscopy 1: Basic Principles*. Springer, 2014.
- [2] L. Galatry, “Simultaneous Effect of Doppler and Foreign Gas Broadening on Spectral Lines,” *Phys. Rev.*, vol. 122, no. 4, pp. 1218–1223, May 1961.
- [3] L. S. Rothman *et al.*, “THE HITRAN MOLECULAR SPECTROSCOPIC DATABASE AND HAWKS (HITRAN ATMOSPHERIC WORKSTATION): 1996 EDITION,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 60, no. 5, pp. 665–710, Nov. 1998.
- [4] E. E. Whiting, “An empirical approximation to the Voigt profile,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 8, no. 6, pp. 1379–1384, Jun. 1968.
- [5] M. P. Arroyo and R. K. Hanson, “Absorption measurements of water-vapor concentration, temperature, and line-shape parameters using a tunable InGaAsP diode laser,” *Appl. Opt.*, vol. 32, no. 30, pp. 6104–6116, 1993.
- [6] A. Goldman, R. R. Gamache, A. Perrin, J.-M. Flaud, C. P. Rinsland, and L. S. Rothman, “HITRAN partition functions and weighted transition-moments squared,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 66, no. 5, pp. 455–486, Sep. 2000.
- [7] R. R. Gamache, R. L. Hawkins, and L. S. Rothman, “Total internal partition sums in the temperature range 70–3000 K: atmospheric linear molecules,” *J. Mol. Spectrosc.*, vol. 142, no. 2, pp. 205–219, 1990.
- [8] L. S. Rothman *et al.*, “The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 110, no. 9, pp. 533–572, 2009.
- [9] D. W. Mattison *et al.*, “In-cylinder gas temperature and water concentration measurements in HCCI engines using a multiplexed-wavelength diode-laser system: Sensor development and initial demonstration,” *Proc. Combust. Inst.*, vol. 31, no. 1, pp. 791–798, Jan. 2007.
- [10] M. A. Bolshov, Y. A. Kuritsyn, V. V. Liger, V. R. Mironenko, S. B. Leonov, and D. A. Yarantsev, “Measurements of the temperature and water vapor concentration in a hot zone by tunable diode laser absorption spectrometry,” *Appl. Phys. B*, vol. 100, no. 2, pp. 397–407, Aug. 2010.
- [11] W. Zeller, L. Naehle, P. Fuchs, F. Gerschuetz, L. Hildebrandt, and J. Koeth, “DFB Lasers Between 760 nm and 16 μm for Sensing Applications,” *Sensors*, vol. 10, no. 4, pp. 2492–2510, Mar. 2010.
- [12] M. J. Thorpe, F. Adler, K. C. Cossel, M. H. G. de Miranda, and J. Ye, “Tomography of a supersonically cooled molecular jet using cavity-enhanced direct frequency comb spectroscopy,” *Chem. Phys. Lett.*, vol. 468, no. 1–3, pp. 1–8, Jan. 2009.
- [13] M. Lackner, “Tunable diode laser absorption spectroscopy (TDLAS) in the process industries—a review,” *Rev. Chem. Eng.*, vol. 23, no. 2, pp. 65–147, 2007.
- [14] M. A. Bolshov, Yu. A. Kuritsyn, and Yu. V. Romanovskii, “Tunable diode laser spectroscopy as a technique for combustion diagnostics,” *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.*, vol. 106, pp. 45–66, Apr. 2015.
- [15] F. Li *et al.*, “Simultaneous measurements of multiple flow parameters for scramjet characterization using tunable diode-laser sensors,” *Appl. Opt.*, vol. 50, no. 36, p. 6697, Dec. 2011.
- [16] J. Radon, “On the determination of functions from their integral values along certain manifolds,” *IEEE Trans. Med. Imaging*, vol. 5, no. 4, pp. 170–176, 1986.
- [17] A. M. K. Thomas, A. K. Banerjee, and U. Busch, *Classic Papers in Modern Diagnostic Radiology*. Springer Science & Business Media, 2005.
- [18] J. Idier, *Approche Bayésienne pour les problèmes inverses*. Hermes/Lavoisier, 2002.
- [19] F. Dubois, “Reconstruction des images tomographiques par rétroprojection filtrée,” *Rev. L’ACOMEN*, vol. 4, no. 2, pp. 92–99, 1998.

- [20] A. Reshef, C. Riddell, Y. Trouset, S. Ladjal, and I. Bloch, “Reconstruction tomographique 2D : une nouvelle méthode de rétro-projection filtrée”, 2017.
- [21] F. Lavallo and J. M. Lagrange, “Opérateurs tomographiques pour la reconstruction d’objets à symétrie de révolution,” in *20° Colloque sur le traitement du signal et des images, FRA, 2005*, 2005.
- [22] C. J. Dasch, “One-dimensional tomography: a comparison of Abel, onion-peeling, and filtered backprojection methods,” *Appl. Opt.*, vol. 31, no. 8, p. 1146, Mar. 1992.
- [23] M. S. Kaczmarz, “Angenäherte Auflösung von Systemen Linearer Gleichungen,” *Bull Acad Pol. Sci Lett*, pp. 355–357, 1937.
- [24] R. Gordon, R. Bender, and G. T. Herman, “Algebraic reconstruction techniques (ART) for three-dimensional electron microscopy and X-ray photography,” *J. Theor. Biol.*, vol. 29, no. 3, pp. 471–481, 1970.
- [25] G. T. Herman, A. Lent, and P. H. Lutz, “Relaxation methods for image reconstruction,” *Commun. ACM*, vol. 21, no. 2, pp. 152–158, Feb. 1978.
- [26] C. Byrne, “The multiplicative algebraic reconstruction technique solves the geometric programming problem,” *Univ. Mass. Lowell Tech Rep*, 2007.
- [27] P. Gilbert, “Iterative methods for the three-dimensional reconstruction of an object from projections,” *J. Theor. Biol.*, vol. 36, no. 1, pp. 105–117, 1972.
- [28] Ming Jiang and Ge Wang, “Convergence of the simultaneous algebraic reconstruction technique (SART),” *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 12, no. 8, pp. 957–961, Aug. 2003.
- [29] K. Ren, G. Bal, and A. H. Hielscher, “Frequency Domain Optical Tomography Based on the Equation of Radiative Transfer,” *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 28, no. 4, pp. 1463–1489, Jan. 2006.
- [30] R. Fletcher and C. M. Reeves, “Function minimization by conjugate gradients,” *Comput. J.*, vol. 7, no. 2, pp. 149–154, Jan. 1964.
- [31] K. J. Daun, S. J. Grauer, and P. J. Hadwin, “Chemical species tomography of turbulent flows: Discrete ill-posed and rank deficient problems and the use of prior information,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 172, pp. 58–74, Mar. 2016.
- [32] A. Guha and I. Schoegl, “Tomographic laser absorption spectroscopy using Tikhonov regularization,” *Appl. Opt.*, vol. 53, no. 34, p. 8095, Dec. 2014.
- [33] N. Terzija *et al.*, “Image optimization for chemical species tomography with an irregular and sparse beam array,” *Meas. Sci. Technol.*, vol. 19, no. 9, p. 094007, Sep. 2008.
- [34] M. G. Twynstra and K. J. Daun, “Laser-absorption tomography beam arrangement optimization using resolution matrices,” *Appl. Opt.*, vol. 51, no. 29, p. 7059, Oct. 2012.
- [35] M. P. Wood and K. B. Ozanyan, “Optimisation of a tomography sensor for imaging of temperature in a gas turbine engine,” in *2013 IEEE SENSORS*, Baltimore, MD, USA, pp. 1–4, 2013.
- [36] T. Yu and W. Cai, “Benchmark evaluation of inversion algorithms for tomographic absorption spectroscopy,” *Appl. Opt.*, vol. 56, no. 8, p. 2183, Mar. 2017.
- [37] H. Xia, Z. Xu, R. Kan, Y. He, J. Liu, and G. Zhang, “Numerical study of two-dimensional water vapor concentration and temperature distribution of combustion zones using tunable diode laser absorption tomography,” *Infrared Phys. Technol.*, vol. 72, pp. 170–178, Sep. 2015.
- [38] X. Ouyang and P. L. Varghese, “Selection of spectral lines for combustion diagnostics,” *Appl. Opt.*, vol. 29, no. 33, p. 4884, Nov. 1990.
- [39] V. L. Kasyutich and P. A. Martin, “Towards a two-dimensional concentration and temperature laser absorption tomography sensor system,” *Appl. Phys. B*, vol. 102, no. 1, pp. 149–162, Jan. 2011.

- [40] H. Xia *et al.*, “Two-step tomographic reconstructions of temperature and species concentration in a flame based on laser absorption measurements with a rotation platform,” *Opt. Lasers Eng.*, vol. 90, pp. 10–18, Mar. 2017.
- [41] 李宁 Ning Li and 翁春生 Chunsheng Weng (翁春生), “Modified adaptive algebraic tomographic reconstruction of gas distribution from incomplete projection by a two-wavelength absorption scheme,” *Chin. Opt. Lett.*, vol. 9, no. 6, pp. 061201–061205, 2011.
- [42] E. Bryner *et al.*, “Tunable Diode Laser Absorption Technique Development for Determination of Spatially Resolved Water Concentration and Temperature,” presented at the American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2010.
- [43] W. Cai and C. F. Kaminski, “Tomographic absorption spectroscopy for the study of gas dynamics and reactive flows,” *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 59, pp. 1–31, Mar. 2017.
- [44] W. Cai and C. F. Kaminski, “A numerical investigation of high-resolution multispectral absorption tomography for flow thermometry,” *Appl. Phys. B*, vol. 119, no. 1, pp. 29–35, Apr. 2015.
- [45] R. A. Rutenbar, “Simulated annealing algorithms: an overview,” *IEEE Circuits Devices Mag.*, vol. 5, no. 1, pp. 19–26, Jan. 1989.
- [46] L. Ma *et al.*, “50-kHz-rate 2D imaging of temperature and H₂O concentration at the exhaust plane of a J85 engine using hyperspectral tomography,” *Opt. Express*, vol. 21, no. 1, pp. 1152–1162, 2013.
- [47] L. Ma and W. Cai, “Determination of the optimal regularization parameters in hyperspectral tomography,” *Appl. Opt.*, vol. 47, no. 23, pp. 4186–4192, 2008.
- [48] P. C. Hansen, “Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve,” *SIAM Rev.*, vol. 34, no. 4, pp. 561–580, Dec. 1992.
- [49] C. F. Kaminski, “A tomographic technique for the simultaneous imaging of temperature, chemical species, and pressure in reactive flows using absorption spectroscopy with frequency-agile lasers,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 104, no. 3, p. 034101, Jan. 2014.
- [50] M. G. Allen, “Diode laser absorption sensors for gas-dynamic and combustion flows,” *Meas. Sci. Technol.*, vol. 9, no. 4, pp. 545–562, Apr. 1998.
- [51] R. K. Hanson, P. A. Kuntz, and C. H. Kruger, “High-resolution spectroscopy of combustion gases using a tunable ir diode laser,” *Appl. Opt.*, vol. 16, no. 8, p. 2045, Aug. 1977.
- [52] K. M. Busa, J. C. McDaniel, G. S. Diskin, M. J. DePiro, D. P. Capriotti, and R. L. Gaffney, “Spatially resolved temperature and water vapor concentration distributions in supersonic combustion facilities by TDLAT,” 33rd Airbreathing Propulsion, 2012.
- [53] K. M. Busa *et al.*, “Scramjet Combustion Efficiency Measurement via Tomographic Absorption Spectroscopy and Particle Image Velocimetry,” *AIAA J.*, vol. 54, no. 8, pp. 2463–2471, Aug. 2016.
- [54] A. K. Prasad, “Stereoscopic particle image velocimetry,” *Experiments in fluids* 29, p. 14, 2000.
- [55] A. Boutier, *Diode Laser Absorption Spectroscopy Techniques in Laser Metrology in Fluid Mechanics: Granulometry, Temperature and Concentration Measurements*, John Wiley & Sons, A. Mohamed, *Chapter 4: Diode Laser Absorption Spectroscopy Techniques*, pp 223-270, 2013.
- [56] J. J. Moré, “The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory,” in *Numerical Analysis*, vol. 630, G. A. Watson, Ed. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, pp. 105–116, 1978.

- [57] D. Taupin, *Probabilities, data reduction and error analysis in the physical sciences*. Les Ulis: Ed. Physique, 1988.
- [58] A. K. Hui, B. H. Armstrong, and A. A. Wray, “Rapid computation of the Voigt and complex error functions,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 19, no. 5, pp. 509–516, 1978.
- [59] H.-J. Clar, R. Schieder, M. Reich, and G. Winnewisser, “High precision frequency calibration of tunable diode lasers stabilized on an internally coupled Fabry-Perot interferometer,” *Appl. Opt.*, vol. 28, no. 9, pp. 1648–1656, 1989.
- [60] *NIST Chemistry Webbook: NIST Standard Reference Database Number 69*. NIST, 2000.
- [61] R. Vallon, J. Soutadé, J.-L. Vérant, J. Meyers, S. Paris, and A. Mohamed, “A Compact Tunable Diode Laser Absorption Spectrometer to Monitor CO₂ at 2.7 μm Wavelength in Hypersonic Flows,” *Sensors*, vol. 10, no. 6, pp. 6081–6091, Jun. 2010.
- [62] L. Vingert, “Experimental Investigations of Liquid Oxygen/Methane Combustion at Low Mixture Ratio at the Mascotte Test Facility,” presented at the ISTS, Japon, 2019.
- [63] A. Devenas, *Solid rocket propulsion technology*, Pergamon. 1992.
- [64] Nocedal, Wright, *Numerical Optimization*, Springer. 2006.
- [65] R. Villarreal and P. L. Varghese, “Frequency-resolved absorption tomography with tunable diode lasers,” *Appl. Opt.*, vol. 44, no. 31, pp. 6786–6795, 2005.
- [66] C. Liu, L. Xu, J. Chen, Z. Cao, Y. Lin, and W. Cai, “Development of a fan-beam TDLAS-based tomographic sensor for rapid imaging of temperature and gas concentration,” *Opt. Express*, vol. 23, no. 17, p. 22494, Aug. 2015.
- [67] P. Colli-Franzone *et al.*, “A mathematical procedure for solving the inverse potential problem of electrocardiography. analysis of the time-space accuracy from in vitro experimental data,” *Math. Biosci.*, vol. 77, no. 1–2, pp. 353–396, Dec. 1985.
- [68] D. Krawczyk-Stańdo and M. Rudnicki, “Regularization Parameter Selection in Discrete Ill-Posed Problems — The Use of the U-Curve,” *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, vol. 17, no. 2, pp. 157–164, Jun. 2007.
- [69] J. Chamorro-Servent, R. Dubois, M. Potse, and Y. Coudière, “Improving the Spatial Solution of Electrocardiographic Imaging: A New Regularization Parameter Choice Technique for the Tikhonov Method,” in *Functional Imaging and Modelling of the Heart*, vol. 10263, M. Pop and G. A. Wright, Eds. Cham: Springer International Publishing, pp. 289–300, 2017.
- [70] B. Yang, G. He, P. Liu, and Z. Qi, “Design of Diode Laser Sensor Based on TDLAS for Rocket Based Combined Cycle,” in *2011 Symposium on Photonics and Optoelectronics (SOPO)*, Wuhan, China, pp. 1–4, 2011.

Publications

Articles publiés en congrès avec présentations orales :

V. Corbas, F. Champagnat, G. Le Besnerais, A. Vincent-Randonnier, N. Fdida, A. Mohamed, "Development of a multispectral scanning spectrometer for chemical concentrations and temperature mapping in a turbulent flame", ONERA DLR Aerospace Symposium, 2017.

V. Corbas, F. Champagnat, G. Le Besnerais, A. Vincent-Randonnier, A. Mohamed, "Mapping of H₂O concentration and temperature in a turbulent methane/air diffusion flame using multispectral absorption tomography", European Conference for Aeronautics and Space Sciences, 2017.

V. Corbas, F. Champagnat, G. Le Besnerais, A. Vincent-Randonnier, N. Fdida, A. Mohamed, "Tomographie par spectroscopie d'absorption à multifaisceaux lasers accordables en longueur d'onde pour la cartographie des espèces chimiques dans les foyers aéronautiques", 16eme Congrès Francophone de Techniques Lasers, 2018.

V. Corbas, F. Champagnat, G. Le Besnerais, A. Mohamed, "Tunable Diode Laser Absorption Tomography for characterization of chemical species in aeronautical flames", European Conference for Aeronautics and Space Sciences, 2019.

Communications orales :

V. Corbas, F. Champagnat, G. Le Besnerais, A. Vincent-Randonnier, N. Fdida, A. Mohamed, "Tomographic Absorption spectroscopy by tunable multi laser beams for chemical species mapping in combustion flames", Measurement and Observation Techniques for Aerospace Research, 2018.

V. Corbas, F. Champagnat, G. Le Besnerais, A. Mohamed, " Tunable Diode Laser Absorption Tomography for characterization of chemical species during combustion in aeronautical flames", Measurement and Observation Techniques for Aerospace Research, 2019.

Contribution à un article de congrès en tant que co-auteur :

L.Vingert, N. Fdida, Y. Mauriot, I. Ortega Colomer, C. Irimea, D. Delhaye, A. Mohamed, V. Corbas, M. Theron, "Experimental Investigations of Liquid Oxygen/Methane combustion at very low mixture ratio at the MASCOTTE test facility", International Symposium on Space Technology and Science, 2019.

Titre : Cartographie d'espèces chimiques en combustion par tomographie et spectroscopie d'absorption multifaisceaux

Mots clés : Tomographie, spectroscopie d'absorption, métrologie laser, combustion

Résumé : La concentration des espèces chimiques comme H_2O , CO_2 , CO , K , HCl ainsi que les grandeurs thermodynamiques comme la pression et la température sont des paramètres clés pour comprendre les réactions de combustion. Ces données permettent de mieux caractériser la combustion dans les foyers aéronautiques et aussi d'affiner les simulations numériques qui permettent d'aider à la conception de moteurs. L'objectif est d'améliorer leur efficacité avec un meilleur rendement et une diminution du rejet de gaz polluants.

La thèse a pour objectif de développer une méthode de caractérisation optique non-intrusive permettant d'obtenir des cartographies de concentrations d'espèces chimiques, de température et de pression dans ces flammes. Cette méthode consiste à acquérir des spectres d'absorption à plusieurs positions et angles dans l'écoulement réactif. L'inversion spectrale de ces données permettra de remonter quantitativement aux concentrations chimiques, à la pression et à la température.

Dans la thèse, nous avons choisi de combiner cette inversion spectrale à un algorithme de tomographie permettant d'améliorer la résolution spatiale. La méthode développée est appelée Tunable Diode Laser Absorption Tomography (TDLAT).

Deux axes de recherches ont été poursuivis au cours de la thèse. Le premier a consisté à développer plusieurs spectromètres d'absorptions associés à un système mécanique de balayage spatial de la flamme. Dans un second temps, nous avons cherché à développer un algorithme de tomographie non-linéaire permettant d'exploiter les séries de spectres d'absorption pour obtenir la résolution spatiale.

Les principaux résultats obtenus en simulation ont permis d'optimiser l'algorithme et aussi d'adapter son fonctionnement aux configurations de mesures représentatives des bancs de combustion. Les principaux résultats de mesures ont été enregistrés dans une flamme de laboratoire et sur un banc de combustion de propergol solide.

Title: Chemical species cartography in combustion by tomography and multiple laser beams absorption spectroscopy

Keywords: Tomography, absorption spectroscopy, laser metrology, combustion

Abstract: Chemical species densities like H_2O , CO_2 , CO , K , HCl and thermodynamic data like pressure and temperature are keys parameters to understand combustion. Measurements of these parameters are great help to validate or complement numerical simulations aiming at improving engine design and efficiency.

The current thesis presents the development of an optical characterization method leading to two dimensional maps of chemical densities, pressure and temperature in combustion flames. This method consists to acquire absorption spectra at different positions and angles around the reactive flow. The spectral inversion of these data can be used to recover quantitatively chemical densities, pressure and temperature. In this thesis, we have chosen to combine this spectral inversion with a tomographic algorithm in order to obtain results with improved spatial resolution.

The developed method is called Tunable Diode Laser Absorption Tomography (TDLAT).

Two research directions have been followed during the thesis. The first consisted to develop several absorption spectrometers associated with a mechanical scanning device of the flame. In a second time, we have searched to develop a non-linear tomographic algorithm in order to process absorption spectra series in order to obtain spatial resolution.

The main results obtained in simulations have led to an optimization of the tomographic algorithm in order to adapt its functioning to measurements configurations characteristics of combustion benches. The main measurements results have been acquired in a laboratory flame and in a solid propellant combustion bench.

