



HAL
open science

Identification expérimentale de propriétés radiatives à partir de méthodes Monte Carlo Symbolique : Application aux matériaux hétérogènes à haute température

Yassine Maanane

► **To cite this version:**

Yassine Maanane. Identification expérimentale de propriétés radiatives à partir de méthodes Monte Carlo Symbolique : Application aux matériaux hétérogènes à haute température. Thermique [physics.class-ph]. Université de Lyon, 2020. Français. NNT : 2020LYSEI093 . tel-03145296

HAL Id: tel-03145296

<https://theses.hal.science/tel-03145296v1>

Submitted on 18 Feb 2021

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.



N°d'ordre NNT : 2020LYSEI093

THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LYON

opérée au sein de
l'INSA Lyon

Ecole Doctorale N° 162
Mécanique – Energétique – Génie civil – Acoustique

Spécialité : Thermique Energétique

Soutenue publiquement le 12/11/2020, par :
Yassine MAANANE

Identification expérimentale de propriétés radiatives à partir de méthodes Monte Carlo Symbolique : application à des matériaux hétérogènes à haute température.

Devant le jury composé de :

Le Niliot, Christophe	Professeur (Aix-Marseille Université, IUSTI)	Président du jury
De Sousa Meneses, Domingos	Professeur (Université d'Orléans, CEMHTI)	Rapporteur
Enguehard, Franck	Professeur (Université de Poitiers, Institut Pprime ENSMA)	Rapporteur
El Hafi, Mouna	Professeure (IMT Mines Albi Carmaux, RAPSODEE)	Examinatrice
Delmas, Agnès	Maître de Conférences (INSA Lyon, CETHIL)	Dir. de thèse
Roger, Maxime	Maître de Conférences (INSA Lyon, CETHIL)	Co-dir. de thèse
Galtier, Mathieu	Maître de Conférences (INSA Lyon, CETHIL)	Invité
Dhima, Dhionis	Expert Scientifique Feu (CSTB)	Invité

Département FEDORA – INSA Lyon - Ecoles Doctorales – Quinquennal 2016-2020

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
CHIMIE	CHIMIE DE LYON http://www.edchimie-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage secretariat@edchimie-lyon.fr INSA : R. GOURDON	M. Stéphane DANIELE Institut de recherches sur la catalyse et l'environnement de Lyon IRCELYON-UMR 5256 Équipe CDFA 2 Avenue Albert EINSTEIN 69 626 Villeurbanne CEDEX directeur@edchimie-lyon.fr
E.E.A.	ÉLECTRONIQUE, ÉLECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE http://edeea.ec-lyon.fr Sec. : M.C. HAVGOUDOUKIAN ecole-doctorale.eea@ec-lyon.fr	M. Gérard SCORLETTI École Centrale de Lyon 36 Avenue Guy DE COLLONGUE 69 134 Écully Tél : 04.72.18.60.97 Fax 04.78.43.37.17 gerard.scorletti@ec-lyon.fr
E2M2	ÉVOLUTION, ÉCOSYSTÈME, MICROBIOLOGIE, MODÉLISATION http://e2m2.universite-lyon.fr Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : H. CHARLES secretariat.e2m2@univ-lyon1.fr	M. Philippe NORMAND UMR 5557 Lab. d'Ecologie Microbienne Université Claude Bernard Lyon 1 Bâtiment Mendel 43, boulevard du 11 Novembre 1918 69 622 Villeurbanne CEDEX philippe.normand@univ-lyon1.fr
EDISS	INTERDISCIPLINAIRE SCIENCES-SANTÉ http://www.ediss-lyon.fr Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : M. LAGARDE secretariat.ediss@univ-lyon1.fr	Mme Sylvie RICARD-BLUM Institut de Chimie et Biochimie Moléculaires et Supramoléculaires (ICBMS) - UMR 5246 CNRS - Université Lyon 1 Bâtiment Curien - 3ème étage Nord 43 Boulevard du 11 novembre 1918 69622 Villeurbanne Cedex Tel : +33(0)4 72 44 82 32 sylvie.ricard-blum@univ-lyon1.fr
INFOMATHS	INFORMATIQUE ET MATHÉMATIQUES http://edinfomaths.universite-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage Tél : 04.72.43.80.46 infomaths@univ-lyon1.fr	M. Hamamache KHEDDOUCI Bât. Nautibus 43, Boulevard du 11 novembre 1918 69 622 Villeurbanne Cedex France Tel : 04.72.44.83.69 hamamache.kheddouci@univ-lyon1.fr
Matériaux	MATÉRIAUX DE LYON http://ed34.universite-lyon.fr Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bât. Direction ed.materiaux@insa-lyon.fr	M. Jean-Yves BUFFIÈRE INSA de Lyon MATEIS - Bât. Saint-Exupéry 7 Avenue Jean CAPELLE 69 621 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.72.43.71.70 Fax : 04.72.43.85.28 jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr
MEGA	MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE, GÉNIE CIVIL, ACOUSTIQUE http://edmega.universite-lyon.fr Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bât. Direction mega@insa-lyon.fr	M. Jocelyn BONJOUR INSA de Lyon Laboratoire CETHIL Bâtiment Sadi-Carnot 9, rue de la Physique 69 621 Villeurbanne CEDEX jocelyn.bonjour@insa-lyon.fr
ScSo	ScSo* http://ed483.univ-lyon2.fr Sec. : Véronique GUICHARD INSA : J.Y. TOUSSAINT Tél : 04.78.69.72.76 veronique.cervantes@univ-lyon2.fr	M. Christian MONTES Université Lyon 2 86 Rue Pasteur 69 365 Lyon CEDEX 07 christian.montes@univ-lyon2.fr

*ScSo : Histoire, Géographie, Aménagement, Urbanisme, Archéologie, Science politique, Sociologie, Anthropologie

Résumé - Abstract

Ce travail s'inscrit dans le cadre de l'étude des transferts de chaleur par rayonnement dans des matériaux hétérogènes utilisés dans des applications haute température, comme la sécurité incendie dans le bâtiment, l'isolation de fours ou la protection thermique dans l'aérospatial. Ces matériaux hétérogènes en structure et/ou en composition s'avèrent être des milieux semi-transparents qui absorbent et qui diffusent le rayonnement thermique, et leurs propriétés radiatives à haute température sont souvent inconnues. Afin de modéliser avec précision le rayonnement au sein de ces matériaux et de quantifier la part du rayonnement par rapport aux autres modes de transferts de chaleur, il est nécessaire de déterminer leurs propriétés radiatives d'absorption et de diffusion. Dans le cadre de cette thèse, ces propriétés sont identifiées par méthode inverse à partir de modèles de rayonnement et de mesures spectrométriques. L'identification expérimentale permet d'accéder aux propriétés radiatives dans des conditions de température proches des conditions d'utilisation du matériau d'intérêt.

Pour mener à bien l'analyse du problème inverse, nous proposons et développons ici une méthodologie se basant sur des méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS). Celles-ci permettent d'exprimer les flux radiatifs sous la forme d'une fonction simple de paramètres dits symboliques. Un seul calcul permet ainsi d'exprimer les flux sur tout l'espace des paramètres, ce qui s'avère très utile dans une démarche d'inversion. Ces méthodes sont particulièrement adaptées pour exprimer des grandeurs radiatives en fonction de la température, du coefficient d'absorption et du coefficient de diffusion. Dans cette thèse, nous proposons une nouvelle méthode symbolique basée sur un développement en séries de polynômes orthogonaux, permettant d'étendre la méthode MCS à d'autres types de paramètres (géométriques, fonction de phase, etc.).

Les expressions de flux radiatif en fonction des propriétés radiatives obtenues par MCS permettent de déterminer si le problème inverse est bien-posé et d'identifier rapidement les propriétés radiatives, tout en prenant en compte les incertitudes expérimentales et numériques. D'autre part, dans le cas où le problème inverse est mal-posé, l'outil proposé permet d'analyser l'apport d'informations supplémentaires par d'autres modèles ou d'autres types de mesures pour l'identification. Dans cette thèse, nous appliquons cette méthodologie à l'identification des propriétés radiatives du Quartzel, famille de matériaux hétérogènes constitués de fibres de Quartz.

Mots clés : émission infrarouge, transferts radiatifs, propriétés radiatives, méthodes inverses, identification expérimentale, méthodes Monte Carlo Symbolique, matériaux hétérogènes, haute température.

This work is about radiative heat transfer in heterogeneous materials used in high temperature applications, such as fire safety in buildings, insulation of furnaces or thermal protection for aerospace vehicles. These semitransparent materials with heterogeneous structure absorb and scatter thermal radiation, and their radiative properties at high temperatures are generally unknown. In order to accurately model radiative transfer within these materials and to quantify the impact of radiation in the global heat transfer, it is necessary to determine absorption and scattering radiative properties. In this thesis, these properties are identified by inverse method from radiative models and spectrometric measurements. Experimental identification from spectrometric measurements provides radiative properties at temperature levels close to real operating conditions for the material of interest.

To carry out the analysis of the inverse problem, we develop here a methodology based on Symbolic Monte Carlo (SMC) methods. These methods allow expressing radiative fluxes as a simple function of the so-called symbolic parameters. A single calculation expresses radiative fluxes overall the parameter space, which turns out to be very useful in an inversion approach. These methods are particularly suitable for expressing radiative quantities as a function of temperature, of absorption and scattering coefficients. In this thesis, we also propose a new symbolic method based on a series expansion of orthogonal polynomials, allowing the extension of SMC methods to other types of parameters (geometric, phase function, etc.).

Expressions of radiative fluxes as functions of radiative properties obtained by SMC are employed to analyze if the inverse problem is well-posed and to efficiently identify the radiative properties, while taking into account the experimental and numerical uncertainties. On the other hand, if the inverse problem is ill-posed, this method can analyze the input of other types of measurements that may allow the identification. The methodology is applied in this work to the identification of radiative properties of a family of heterogeneous materials composed of Quartz fibers.

Keywords : thermal emission, radiative transfer, radiative properties, inverse methods, experimental identification, Symbolic Monte Carlo methods, heterogeneous materials, high temperature.

Table des matières

Résumé - Abstract	1
Introduction	7
1 Transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes	13
1 Interaction rayonnement-matière dans les matériaux hétérogènes	13
1.1 Optique géométrique	17
1.2 Résolution des équations de Maxwell, théorie de Lorentz-Mie	18
1.3 Régime de Rayleigh	19
1.4 Vers un modèle de transferts radiatifs	20
2 Equation du Transfert Radiatif (ETR)	20
2.1 Formulation locale de l'ETR	24
2.2 Formulation intégrale de l'ETR	24
2.3 Fonctions de phase usuelles	26
2.4 Méthodes de résolution de l'ETR	30
3 Modélisation des transferts radiatifs dans des matériaux hétérogènes	32
3.1 Homogénéisation et modèles radiatifs	32
3.1.1 Méthode RDFI	33
3.1.2 Prise de moyenne volumique	34
3.2 Détermination des propriétés radiatives	35
3.2.1 Approche prédictive	35
3.2.2 Approche par identification expérimentale	37
2 Méthodes Monte Carlo Symbolique	41
1 Introduction aux méthodes Monte Carlo	41
1.1 Rappels de statistiques	42
1.2 Calcul approché d'intégrales	44
1.3 Algorithme Monte Carlo classique pour la résolution de l'ETR	47
1.3.1 Cas d'étude	47
1.3.2 Approche standard	49
1.3.3 Approche par <i>Energy partitioning</i>	50
1.4 Algorithmes à collisions nulles (ACN)	52
1.4.1 Approche standard	55

1.4.2	Approche <i>energy partitioning</i>	57
2	Méthodes Monte Carlo Symbolique pour la résolution de l'ETR	60
2.1	Température comme symbole	60
2.2	Coefficient d'absorption comme symbole	65
2.3	Coefficients d'absorption et de diffusion comme symboles	72
2.4	Fonction de phase comme symbole	79
3	Développement d'une nouvelle approche Monte Carlo Symbolique basée sur les séries de polynômes orthogonaux	82
3.1	Démonstration générale	83
3.2	Illustration avec les polynômes de Legendre	87
3	Etude expérimentale et mesures spectrométriques	93
1	Mesure de transmittance et de réflectance spectrales directionnelles-hémisphériques à température ambiante	94
1.1	Principe des mesures	94
1.2	Matériau étudié : feutre fibreux faible densité	96
1.2.1	Description de l'échantillon	96
1.2.2	Spectres de transmittance et de réflectance	97
1.2.3	Estimation des incertitudes de mesure	99
1.3	Matériau étudié : céramique fibreuse faible densité	100
1.3.1	Description de l'échantillon	100
1.3.2	Spectres de transmittance et de réflectance	101
2	Mesures spectrales d'émission à haute température	102
2.1	Présentation du banc d'émission	102
2.1.1	Système de chauffage	103
2.1.2	Acquisition des spectres	105
2.2	Description du principe de la mesure d'émission	106
2.2.1	Etalonnage	106
2.2.2	Détermination de la fonction d'appareil	107
2.3	Mesures d'émission d'une céramique fibreuse en chauffage symétrique	110
2.3.1	Spectres d'émission	111
2.3.2	Détermination de la température de l'échantillon	111
2.3.3	Facteur d'émission spectral - définition et détermination	114
2.4	Mesures d'émission d'une céramique fibreuse en chauffage asymétrique	115
4	Stratégie d'inversion basée sur les méthodes Monte Carlo Symbolique	119
1	Introduction aux méthodes inverses	119
1.1	Outils mathématiques pour l'inversion	120
1.2	Stratégie d'identification des propriétés radiatives	123
2	Identification des propriétés radiatives d'un feutre Quartzel à température ambiante	125
2.1	Mise en équation du modèle radiatif et résolution par MCS	125
2.2	Analyse inverse	129

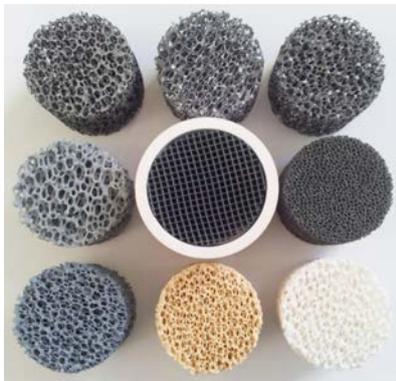
2.2.1	Analyse du problème inverse par une méthode graphique	129
2.2.2	Analyse de sensibilités	132
2.3	Identification des propriétés radiatives et analyse post-convergence	135
3	Influence des choix arbitraires sur l'identification	138
3.1	Influence de la probabilité arbitraire \tilde{P}_s	140
3.2	Influence du coefficient d'extinction $\hat{\beta}$	143
5	Identification des propriétés radiatives à haute température	147
1	Analyse du problème inverse	147
1.1	Modèle radiatif	147
1.2	Analyse inverse	149
1.2.1	Méthode graphique	149
1.2.2	Sensibilités	150
2	Comment identifier les propriétés radiatives à partir de mesures d'émission?	152
2.1	Cas d'un matériau homogène	152
2.2	Cas d'un matériau hétérogène	156
2.2.1	Identification à partir de l'ensemble du spectre d'émission	156
2.2.2	Mesures spectrales de transmittance et de réflectance à haute température	160
	Conclusions générales et perspectives	165
	Bibliographie	171
A	Ecart-type MCS	179
1	Un paramètre symbolique	179
2	Deux paramètres symboliques	180
3	Trois paramètres symboliques	181
B	Spectrométrie Infrarouge à Transformée de Fourier (FTIR)	183
C	Estimation des incertitudes expérimentales	189
1	Transmittance et réflectance directionnelles-hémisphériques	189
2	Mesures d'émission haute température	191

Introduction

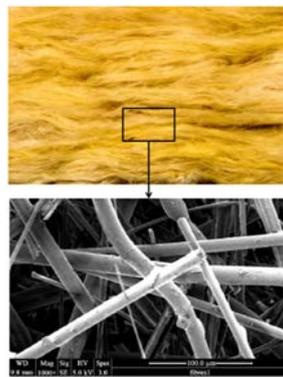
Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit sont une contribution à l'étude des transferts de chaleur par rayonnement dans des matériaux semi-transparents hétérogènes portés à des hauts niveaux de température (supérieurs à 600°C). Ces matériaux peuvent être hétérogènes en structure et/ou en composition, et sont souvent optimisés pour une fonctionnalité spécifique, comme l'allègement mécanique, l'isolation thermique ou au contraire l'amplification des transferts thermiques. Ils sont le siège de transferts conductifs dans la phase solide et convectifs entre les phases solide et fluide. De plus, la structure et/ou la composition de ces matériaux hétérogènes favorise la présence de rayonnement thermique en volume, conséquence des échanges radiatifs à travers les phases fluides du matériau. Selon les applications visées, la présence de rayonnement volumique peut être favorable (refroidissement par émission infrarouge par exemple) ou au contraire indésirable (diminution des performances d'isolation par augmentation du transfert de chaleur global). Il existe différents types de matériaux hétérogènes utilisés pour des applications à haute température, leur choix reposant principalement sur les fonctions visées.

Dans le domaine de l'aérospatial, les matériaux hétérogènes sont souvent utilisés comme boucliers thermiques et sont désignés par leur dénomination anglaise TPS pour *Thermal Protection Systems*. Parmi ces matériaux hétérogènes, on trouve des céramiques poreuses à base d'alumine, de silice, de carbone ou de zirconie yttrée [1–3]. Elles sont par exemple utilisées pour assurer l'isolation thermique d'aubes de turbines tout en les protégeant contre l'érosion et la corrosion. Elles sont soumises à des conditions d'utilisation extrêmes caractérisées par des flux de chaleur convecto-radiatifs importants sur une face (générant un champ de température interne non-uniforme). L'élévation de température dans ces céramiques, qui peut parfois dépasser 2000°C , s'accompagne de transfert par rayonnement qui peut nuire aux propriétés d'isolation. La barrière étant optimisée vis-à-vis du transfert conductif mais la structure hétérogène favorisant la présence de rayonnement, la performance d'isolation peut s'avérer considérablement dégradée. Déterminer si le rayonnement est significatif permet de redimensionner l'épaisseur du bouclier. Parmi les matériaux hétérogènes, on trouve également des mousses à base de carbure de silicium ou de zirconie souvent utilisées comme absorbeurs volumiques pour la récupération d'énergie (tours solaires à concentration [4–6], fours industriels [7], etc.). Ces mousses jouent le rôle d'échangeur de chaleur en absorbant une forme de chaleur (rayonnée) pour la restituer à une autre composante du système, souvent à un fluide caloporteur. Etudier le transfert radiatif dans ces mousses permet de rechercher les configurations pour lesquelles l'absorption du rayonnement est maximale, les déperditions par rayonnement sont minimales et la restitution de la chaleur à la phase fluide est optimale.

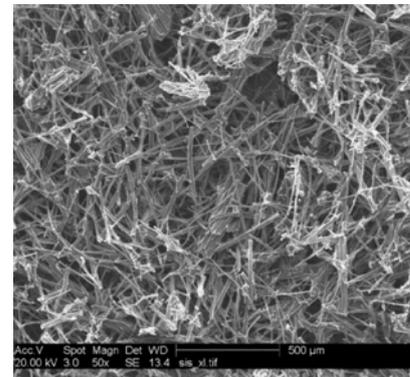
Les matériaux hétérogènes sont aussi présents dans les parois des bâtiments, comme les isolants thermiques (laine de verre, laine de roche, etc.), et font l'objet d'un intérêt récent quant à leur comportement radiatif en situation d'incendie. En effet, de part les niveaux de température atteints à la fois par les flammes et par les parois en condition d'incendie, les transferts radiatifs peuvent jouer un rôle important sur le développement de l'incendie et la propagation des flammes. Les exigences de performance énergétique et thermique des bâtiments se sont traduites par le recours massif aux nouveaux matériaux d'isolation souvent dimensionnés et optimisés vis-à-vis de la conduction thermique. Or, ces mêmes matériaux d'isolation s'avèrent être des milieux hétérogènes semi-transparents qui sont le siège de rayonnement thermique en volume, et leur comportement radiatif à haute température en situation d'incendie est inconnu.



Mousses céramiques utilisées comme absorbeur solaire [5].



Laine de verre [8].



Feutre carbone [2].

Quelle que soit l'application haute température visée et pour mieux prendre en compte la part du rayonnement dans le transfert de chaleur global, il faut être capable de modéliser le transfert radiatif au sein de ces matériaux hétérogènes dans des conditions de température proches des conditions opératoires, et de déterminer leurs propriétés radiatives volumiques d'absorption et de diffusion.

Pour étudier les transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes, deux approches complémentaires ayant chacune ses avantages et ses inconvénients peuvent être mises en oeuvre :

- Approche par prédiction. Comme son nom l'indique, elle permet de prédire le comportement radiatif à partir de modèles de rayonnement. Cette approche s'appuie sur la connaissance de la structure du matériau hétérogène et de sa composition pour simuler le transfert radiatif au sein de ce matériau. C'est une démarche utile et rapide lorsqu'il s'agit d'optimiser des formes selon les applications visées. Elle s'appuie sur des images obtenues à partir de microscopie électronique à balayage (MEB), de tomographies à rayons X ou de répliques numériques. Deux limites ressortent de cette approche : l'accès à la structure n'est cependant possible qu'à température ambiante, et il faut connaître les propriétés optiques des phases contenues dans le matériau hétérogène (ces propriétés sont souvent identifiées à partir du corps homogène pur dont la composition est identique à celle de l'hétérogénéité).

- Approche par identification. Cette démarche consiste à associer modèles et mesures expérimentales. Elle permet de connaître le comportement radiatif de matériaux hétérogènes dans des conditions de température proches des conditions de fonctionnement du matériau. Elle vient toujours en aval d'une analyse prédictive et permet de vérifier les conclusions tirées de l'approche prédictive. L'identification des propriétés radiatives à haute température à partir de mesures expérimentales se heurte à deux difficultés majeures. D'abord, la mise en oeuvre de mesures expérimentales est une tâche compliquée surtout lorsqu'il s'agit d'atteindre des niveaux de températures élevés. De plus, l'identification des propriétés radiatives à haute température n'est pas toujours possible comme nous le montrerons plus loin dans ce manuscrit.

Ce travail de thèse a été réalisé au Centre d'Énergétique et de Thermique de Lyon (CETHIL) dont les activités de recherche du laboratoire concernent la thermique à différentes échelles de temps, d'espace et de température, et visent particulièrement des applications dans le domaine de l'optimisation des systèmes énergétiques. La recherche menée au laboratoire porte à la fois sur l'étude de phénomènes fondamentaux de la physique des transferts thermiques et sur l'application de ces connaissances dans des aspects plus proches du monde sociétal et économique. Le laboratoire est structuré autour de cinq thèmes de recherche, cette thèse s'inscrivant dans la thématique "Milieux Réactifs et Transferts Radiatifs (MRTR)" dont les activités se déclinent au travers de plusieurs opérations de recherche, comme le transfert radiatif dans les atmosphères gazeuses, et l'impact des transferts radiatifs dans des matériaux hétérogènes à hautes températures.

NOTE

Plus récemment, la problématique de sécurité incendie dans le bâtiment s'est inscrite dans le cadre d'un accord de coopération Recherche et Développement entre le CETHIL et le Centre Scientifique et Technique du Bâtiment (CSTB). Cet accord-cadre vise à mener des actions de recherche complémentaires pour la maîtrise des risques incendie, en s'articulant autour de deux thèmes : le développement du feu (interaction flamme-paroi) et la métrologie en environnement de combustion. Les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit sont liés au premier thème de l'accord, l'objectif à long-terme étant de pouvoir quantifier le rôle des transferts radiatifs dans les parois sur la propagation des flammes.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre de recherches qui s'intéressent aux transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes et à l'identification expérimentale de propriétés radiatives, plus particulièrement à haute température. Initialement, le CETHIL s'est positionné depuis le début des années 1990 sur la problématique de l'identification des propriétés radiatives à température ambiante [9–11]. L'identification des propriétés radiatives reposait sur des développements de mesures spectrales de transmittance et de réflectance bi-directionnelles et directionnelles-hémisphériques ainsi que sur la résolution de l'Equation des Transferts Radiatifs par la Méthode des Ordonnées Discrètes. Dès la fin des années 1990, un intérêt particulier a été accordé à la

métrologie à haute température avec les travaux de Rogerio Lopes [12] qui a développé un banc expérimental pour mesurer l'émission radiative infrarouge de céramiques dans différentes directions. Ce premier pilote ne comportait pas de spectromètre, seules des mesures à l'aide de filtres interférentiels étaient réalisées. Lucile Robin [1] s'est intéressée aux transferts thermiques dans des céramiques élaborées par projection plasma et utilisées comme barrières thermiques dans l'aérospatial. La dernière thèse opérée au sein du groupe et soutenue par Sebastien le Foll [2] a porté sur l'étude du transfert conducto-radiatif dans la zone d'ablation de matériaux fibreux utilisés comme barrières thermiques lors de la ré-entrée atmosphérique d'engins spatiaux. Sa démarche a reposé sur l'identification par méthode inverse de propriétés radiatives à haute température en utilisant des mesures spectrales d'émission. Il a repris le banc développé par Lopes et l'a modifié pour permettre le chauffage d'isolants à base de fibres de carbone dans une enceinte à vide afin d'éviter leur oxydation. Il a également introduit un spectromètre FTIR pour la mesure de spectres d'émission, perdant en revanche la possibilité de réaliser des mesures directionnelles. Sa thèse constitue les premiers travaux du laboratoire portant sur l'identification des propriétés radiatives à haute température. Le Foll a par ailleurs utilisé la méthode Méthode Carlo à la place de la méthode des Ordonnées Discrètes pour résoudre le transfert radiatif.

Les travaux développés dans le cadre de cette thèse tissent également des liens avec les récentes activités du thème MRTR sur le développement de méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS) pour l'analyse des transferts radiatifs dans les milieux participants. En particulier, il s'agit d'une contribution au développement de méthodes MCS [13–15] pour l'analyse de problèmes inverses et pour l'identification de propriétés radiatives à partir de spectres expérimentaux. Ces méthodes MCS, introduites par William Dunn et initialement appelées *inverse Monte Carlo* [16] avant d'être renommées *symbolic* par le même auteur [17], peuvent avoir un intérêt dans l'analyse de problèmes inverses et aider à mieux identifier les propriétés radiatives. A la différence des méthodes Monte Carlo classiques, les méthodes MCS utilisent des paramètres inconnus dits symboliques et auxquels aucune valeur scalaire n'est affectée. Dans le cadre de l'inversion, l'intérêt principal de ces méthodes est de ne réaliser qu'un seul calcul pour exprimer une grandeur radiative sur tout l'espace des paramètres symboliques. La forme simple de cette expression dans laquelle les paramètres symboliques à identifier apparaissent de manière explicite, permet de mener une analyse approfondie d'un problème inverse. De plus, ces méthodes MCS bénéficient de tous les avantages des méthodes Monte Carlo classiques. Elles n'induisent pas de biais lors de l'estimation d'une grandeur radiative, fournissent un intervalle de confiance pour le résultat obtenu et sont particulièrement adaptées pour simuler les transferts radiatifs dans des géométries complexes.

Cette présente thèse, au croisement des deux axes de recherche, a pour but de contribuer au développement de méthodes MCS pour la modélisation des transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes et pour l'identification expérimentale des propriétés radiatives. Nous nous proposons ainsi d'aborder la problématique suivante :

Comment optimiser l'analyse de l'identification des propriétés d'absorption et de diffusion de matériaux hétérogènes à haute température ?

Pour répondre à cette problématique, les travaux développés tout au long de ce manuscrit apportent une nouvelle **méthodologie** basée sur les méthodes MCS [13–15, 18, 19]. Cette méthodologie d'inversion basée sur les méthodes MCS se veut simple d'utilisation et applicable à différents types de matériaux hétérogènes sans être restreinte aux matériaux à hétérogénéités sphériques et cylindriques. Cette méthodologie peut aussi être étendue à des problématiques autres que le transfert radiatif. Afin d'illustrer le potentiel des méthodes MCS dans une démarche d'inversion, nous avons fait le choix de l'appliquer au Quartzel, famille de matériaux hétérogènes à base de fibres de Quartz produits et commercialisés par Saint-Gobain Quartz. Le Quartzel constitue un **exemple** d'application de la méthode MCS, l'objectif ici n'étant pas de fournir une banque de données de propriétés radiatives de matériaux, mais de proposer un cas test pour illustrer le potentiel des méthodes MCS dans une démarche d'inversion à partir de mesures spectrométriques. L'application au Quartzel est intéressante à cause de son comportement spectral semi-transparent, avec un spectre comprenant des zones où le matériau a une épaisseur optique faible ou intermédiaire, et des zones où il est optiquement épais et dans lesquelles l'identification risque d'être difficile.

Les travaux présentés ici sont articulés autour de cinq chapitres. Dans un premier temps, nous dresserons un état de l'art des différents travaux de modélisation des transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes ainsi que les différentes techniques de détermination des propriétés radiatives.

Le deuxième chapitre est entièrement dédié au développement de méthodes MCS et à leur utilisation dans le contexte de l'identification de paramètres. Nous porterons une attention particulière aux démonstrations et aux algorithmes puis nous proposerons des exemples d'analyse de problèmes inverses.

Le troisième chapitre décrit les grandeurs d'intérêt pour l'identification des propriétés radiatives et les principes de leurs mesures. A température ambiante, ces grandeurs sont la transmittance et la réflectance. Pour un matériau porté à haute température, la grandeur d'intérêt est le flux radiatif émis. Le banc d'émission haute température développé au CETHIL lors de précédents travaux [2, 12] et adapté pour les applications visées dans cette thèse sera utilisé pour caractériser en émission une céramique fibreuse à des températures allant jusqu'à 1650°C.

Au quatrième chapitre de ce manuscrit, nous définirons une stratégie d'identification basée sur les méthodes MCS. Cette stratégie sera ensuite mise en oeuvre pour identifier les propriétés radiatives d'un feutre Quartzel à partir de mesures spectrométriques de transmittance et de réflectance à température ambiante, tout en prenant en compte et en propageant les incertitudes expérimentales et numériques dans le processus inverse.

Le dernier chapitre de ce manuscrit sera consacré à l'identification des propriétés radiatives de matériaux hétérogènes à partir de mesures spectrométriques d'émission à haute température. Nous déterminerons par la méthode MCS si le problème inverse est bien-posé et si l'identification

des propriétés radiatives à haute température est possible à partir de mesures spectrométriques d'émission. Nous identifierons les difficultés inhérentes à la haute température et à l'identification à partir de mesures spectrométriques d'émission, et nous examinerons les différentes possibilités pour y remédier. En particulier, nous illustrerons dans ce contexte comment la mise en oeuvre d'algorithme symbolique pourrait aider à modéliser le rayonnement dans ces matériaux et à améliorer l'identification.

Enfin une conclusion générale clôturera et des perspectives à court et moyen terme seront dégagées.

Chapitre 1

Transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes

Ce premier chapitre a pour but de dresser un état de l'art des différents modèles qui décrivent le transfert thermique par rayonnement dans les matériaux hétérogènes. Dans un premier temps, les interactions entre le rayonnement et les hétérogénéités seront détaillées. L'Equation du Transfert Radiatif (ETR), très probablement le modèle de rayonnement le plus utilisé [20–22] fera l'objet d'une description détaillée dans la seconde section. Enfin, la troisième et dernière section présentera une bibliographie des différents travaux de modélisation des transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes.

1 Interaction rayonnement-matière dans les matériaux hétérogènes

Le phénomène de rayonnement thermique correspond à l'émission d'ondes électromagnétiques par la matière. Ces ondes dépendent de l'énergie interne du matériau et de ses propriétés optiques. Comme leur nom l'indique, ces ondes sont représentées par un champ électrique et un champ magnétique souvent notés \mathbf{E} et \mathbf{H} . Le champ électrique est représenté mathématiquement par un vecteur porté par une direction de propagation \mathbf{u} et varie dans l'espace et dans le temps. Par exemple, lorsque le milieu est isotrope, infini et homogène, le vecteur champ électrique s'écrit [20] :

$$\mathbf{E}(t, \nu, \mathbf{x}) = E_0 \cos(2\pi\nu t - \frac{2\pi\nu}{c} \mathbf{u} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{u} \quad (1.1)$$

où ν est la fréquence de l'onde exprimée en Hz, t est le temps exprimé en secondes, \mathbf{x} est la position de l'onde et c la vitesse de phase en $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. Il est important de noter ici que la vitesse c , et par conséquent la longueur d'onde λ , dépendent du milieu dans lequel l'onde se propage. En revanche, la fréquence ν est indépendante du milieu de propagation. La longueur d'onde λ et la fréquence ν sont liées par la vitesse c . La vitesse de phase c dépend uniquement de la vitesse de propagation dans le vide notée c_0 et de l'indice de réfraction ordinaire noté n (sans dimension) :

$$c = \frac{c_0}{n} \quad \& \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{c_0}{n\nu} \quad (1.2)$$

Nous remarquerons que cette définition implique nécessairement que l'indice de réfraction ordinaire soit toujours supérieur à 1 puisque la vitesse de propagation dans le vide c_0 constitue une limite supérieure à la vitesse c . La vitesse c considérée ici est la vitesse à laquelle se déplacent les crêtes ou la phase de l'onde et peut être différente de la vitesse à laquelle se déplace l'enveloppe de l'onde (vitesse de groupe) [23]. Cette vitesse de phase est caractéristique de la phase de l'onde et non pas de l'onde, et n'est pas bornée par la vitesse dans le vide c_0 . Aussi, cette définition laisse supposer que l'indice de réfraction est nécessairement un nombre réel, ce qui n'est pas le cas lorsque le milieu de propagation est absorbant. Dans ce cas, l'indice de réfraction n'est plus ordinaire mais complexe :

$$m = n - jk \quad \text{avec } j^2 = -1 \quad (1.3)$$

où la partie imaginaire k est l'indice d'extinction du milieu. L'indice de réfraction indique comment les charges électriques constituant le milieu de propagation réagissent à une excitation électromagnétique. Lorsque le milieu de propagation est non-magnétique, ce qui est le cas pour la majorité des matériaux au sein desquels on étudie les transferts de chaleur, l'indice de réfraction du milieu est directement lié à sa permittivité relative $\epsilon_r = \epsilon_r' - j\epsilon_r''$ par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= m^2 \\ \epsilon_r' &= n^2 - k^2 \\ \epsilon_r'' &= 2nk \end{aligned} \quad \iff \quad \begin{aligned} m &= \sqrt{\epsilon_r} \\ n &= \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_r'^2 + \epsilon_r''^2} + \epsilon_r'}{2}} \\ k &= \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_r'^2 + \epsilon_r''^2} - \epsilon_r'}{2}} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Dans le vide ou dans un milieu homogène d'indice uniforme, une onde électromagnétique se propage dans une direction sans être déviée. Une fraction de l'énergie qu'elle transporte peut toutefois être atténuée par absorption si le milieu de propagation est absorbant. L'absorption correspond à la transformation du rayonnement en d'autres formes d'énergie et est associée aux transitions des niveaux d'énergie des électrons dans le milieu de propagation.

La théorie de la propagation des ondes électromagnétiques peut être étendue aux milieux hétérogènes. Un milieu hétérogène est constitué d'au moins deux phases homogènes et d'indices de réfraction différents. Pour résoudre les équations de Maxwell dans un milieu hétérogène, il faut être capable de décrire la propagation de l'onde électromagnétique dans chacune des phases ainsi que les interactions aux interfaces des phases.

Commençons d'abord par ne considérer qu'une seule hétérogénéité d'indice de réfraction m_2 incluse dans un milieu de propagation d'indice m_1 comme indiqué sur les figures 1.1 et 1.2. Une onde électromagnétique de fréquence ν (longueur d'onde λ) se propage dans le milieu 1 puis parvient au niveau de l'interface optique ($n_1; n_2$). Les interactions possibles aux interfaces des phases sont :

1. La réfraction. L'onde traverse l'hétérogénéité avec un changement de direction, sauf si la direction d'incidence est perpendiculaire à l'interface.

2. La réflexion. Elle peut être vue comme une collision élastique où l'onde électromagnétique rebondit sur une surface. C'est le cas lorsque la surface de l'hétérogénéité est lisse (par opposition à rugueuse) et la réflexion est dite spéculaire. Une surface est lisse lorsque les tailles des rugosités sont très petites devant la longueur d'onde. Lorsque l'onde est réfléchie, sa direction peut facilement être prédite. Par exemple, les lois de Snell-Descartes stipulent que l'onde incidente et l'onde réfléchie appartiennent au même plan (plan d'incidence), et les angles d'incidences et de réflexion (par rapport à la normale à l'interface) sont égaux (voir sous-section 1.1). Lorsque la surface de l'hétérogénéité a une structure irrégulière ou rugueuse, l'onde électromagnétique subit plusieurs réfractions et réflexions de telle sorte qu'il devient difficile de prédire les directions de l'onde réfractée et de l'onde réfléchie.

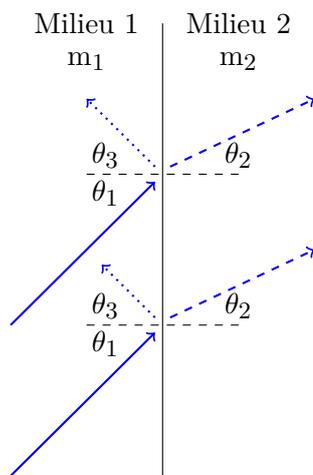


Figure 1.1 – Représentation schématique d'une interface lisse séparant deux milieux d'indices n_1 et n_2 . Réflexion spéculaire et réfraction.

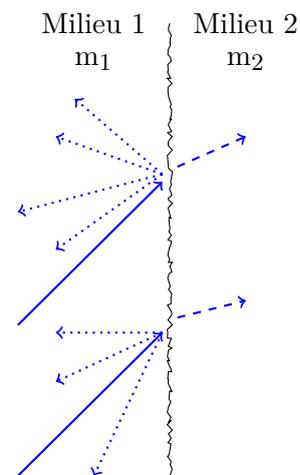


Figure 1.2 – Représentation schématique d'une interface rugueuse séparant deux milieux d'indices n_1 et n_2 . Réflexion diffuse et réfraction.

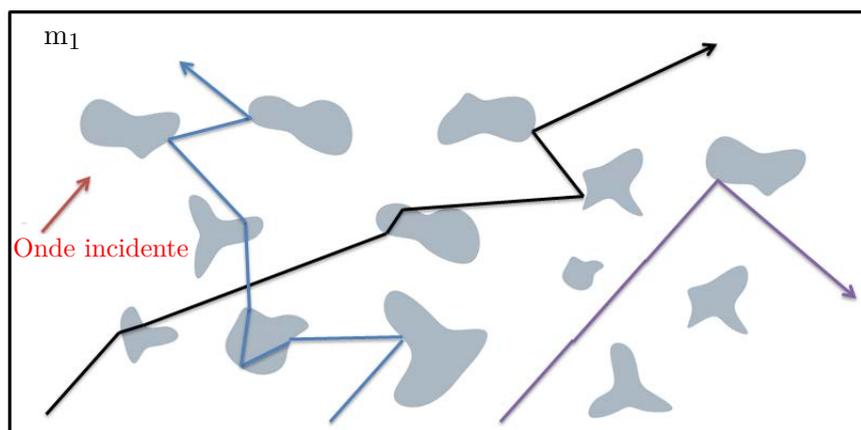


Figure 1.3 – Représentation schématique d'un milieu constitué de plusieurs hétérogénéités.

Lorsque le milieu de propagation est hétérogène, c'est-à-dire qu'il présente des variations de propriétés électromagnétiques, l'onde électromagnétique subit des réflexions et des réfractions qui peuvent être multiples. C'est particulièrement le cas lorsque le milieu hétérogène inclut une hétérogénéité à surface rugueuse (figure 1.2) ou lorsqu'il est constitué de plusieurs hétérogénéités dispersées comme cela est représenté sur la figure 1.3 où l'onde se propageant dans le milieu hôte d'indice m_1 rencontre successivement plusieurs hétérogénéités d'indices m_i différents de m_1 .

L'ensemble des phénomènes de réflexions et de réfractions multiples qui génèrent une redistribution de la direction de propagation d'ondes électromagnétique peut être regroupé sous le terme de diffusion (*scattering*). Au lieu de décrire les réflexions et réfractions aux interfaces successives, il est possible de se positionner à l'échelle de l'hétérogénéité pour décrire la répartition directionnelle de l'onde par la diffusion. La diffusion entraîne un changement de direction de l'onde par rapport à sa direction d'incidence initiale. La nouvelle direction de propagation après interaction avec la particule, souvent notée Θ , correspond à l'angle entre la direction d'incidence et la direction de diffusion. Nous pouvons donc définir une grandeur appelée "fonction de phase" notée P_{sca} qui décrit la probabilité qu'une onde arrivant d'une direction d'incidence \mathbf{u}_i soit diffusée dans un angle élémentaire autour de la direction de diffusion \mathbf{u}_s .

Dorénavant, nous utiliserons le terme "particule" ou "diffuseur" pour décrire une hétérogénéité quelconque. Nous venons de voir que la diffusion résulte de l'interaction entre une onde électromagnétique incidente et une particule. Pour bien représenter la diffusion, les caractéristiques du milieu environnant et des particules doivent être connues, comme leurs tailles, leurs distributions et leurs orientations dans le milieu hôte. Plus généralement, la quantité d'énergie contenue dans l'onde diffusée et la direction de diffusion dépendent de plusieurs paramètres, dont :

- La forme des particules. Pour des cas simples, les particules peuvent être considérées sphériques (par exemple des matériaux élaborés par frittage) ou cylindriques (approximation généralement utilisée pour les matériaux fibreux).
- Les indices de réfractions de la matrice et des particules dépendent de la fréquence (ou de la longueur d'onde) et renseignent sur le comportement électromagnétique des constituants du milieu hétérogène.
- La distance séparant les particules. Directement liée à la fraction volumique de diffuseurs dans le milieu hétérogène, elle permet de considérer si la diffusion par chaque particule est indépendante. Dans ce cas, la contribution totale de tous les diffuseurs est la somme des contributions de chaque diffuseur. Si la diffusion n'est pas indépendante, il est possible de considérer un agrégat de particules comme une seule hétérogénéité et de définir un modèle de fonction de phase pour cet agrégat.
- La taille de la particule. Souvent, la taille du diffuseur est explorée à travers le paramètre de taille $x = \frac{2\pi r}{\lambda}$ où r est une dimension caractéristique de la particule (par exemple le rayon d'un diffuseur sphérique ou cylindrique). Le paramètre de taille exprime la taille relative du diffuseur comparée à la longueur d'onde de l'onde incidente.

Pour décrire la variation de la quantité d'énergie contenue dans l'onde suite à son interaction avec une particule d'indice optique différent, la théorie des ondes électromagnétiques de Maxwell doit être mise en oeuvre. La résolution rigoureuse des équations de Maxwell peut toutefois s'avérer fastidieuse et des approches simplifiées sont utilisées en fonction du paramètre de taille

$$x = \frac{2\pi r}{\lambda} :$$

- $x \gg 1$: optique géométrique ;
- $x \ll 1$: régime de Rayleigh ;
- $x \simeq 1$: équations de Maxwell ou théorie de Lorentz-Mie pour le cas particulier des particules sphériques ou cylindriques.

1.1 Optique géométrique

Dans un premier temps, supposons que les milieux de propagation ne sont pas absorbants. Cela revient à considérer que la partie imaginaire de l'indice de réfraction complexe (aussi appelée indice d'extinction) est nulle. L'optique géométrique est un modèle qui représente la propagation d'une onde électromagnétique par un rayon lumineux. L'optique géométrique est confortée par l'optique ondulatoire en faisant l'approximation que toutes les dimensions des hétérogénéités sont grandes devant la longueur d'onde. Une onde électromagnétique se propageant dans un milieu d'indice optique n_1 (matrice) et rencontrant une particule d'indice n_2 interagit avec celle-ci (figures 1.1 et 1.2). Le changement d'indice de réfraction à l'interface matrice-particule induit une réflexion de l'onde à la surface de la particule et une réfraction (changement de direction) de l'onde à la traversée de la particule. Toujours à l'échelle de cette interface, la réflexion et la réfraction sont régies par les lois de Snell-Descartes :

$$n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2) \quad (1.5)$$

où θ_1 et θ_2 sont respectivement les angles d'incidence et de réfraction de l'onde par rapport à la normale à l'interface matrice-particule. Lorsque l'interface est lisse, la réflexion est dite spéculaire : l'onde réfléchie et l'onde incidente sont dans le même plan, et l'angle de réflexion est égal à l'angle d'incidence ($\theta_3 = \theta_1$). Dans le cas d'une interface rugueuse, l'onde subit des réflexions multiples et leurs directions sont difficilement prédictibles. Les différents phénomènes de réflexion et de réfraction à l'échelle d'une interface séparant un milieu de propagation d'une particule sont responsables de la diffusion volumique de la particule.

Dès que l'on considère un milieu de propagation absorbant et/ou une particule absorbante, l'indice de réfraction n'est plus un nombre réel mais un nombre complexe. En conséquence, l'angle de réfraction devient complexe. Chang *et. al.* [24] expliquent que l'absorption est souvent prise en compte en réduisant l'énergie contenue dans l'onde selon la distance parcourue. Les pertes par absorption sont représentées par une simple atténuation exponentielle (loi de Beer). Cette pratique est valable pour les longueurs d'onde où l'absorption est faible. En revanche, lorsque l'absorption est prépondérante, la généralisation des lois de Snell-Descartes pour des

milieux absorbants repose sur les équations de Maxwell. Le lecteur se référera aux travaux de Dupertuis [25] pour une démonstration complète.

1.2 Résolution des équations de Maxwell, théorie de Lorentz-Mie

Dans le cas où la taille de la particule diffusante est proche de celle de la longueur d'onde, les équations de Maxwell doivent être mises en oeuvre pour résoudre le problème d'absorption et de diffusion d'une onde par une particule. Il n'existe cependant pas de solutions analytiques des équations de Maxwell, sauf dans des cas particuliers comme pour les diffuseurs sphériques ou cylindriques. Un grand nombre de méthodes de résolution des équations de Maxwell existe et leur utilisation dépend du problème de diffusion à résoudre.

Nous reprenons ici les notations des ouvrages de Van de Hulst, [26], Kerker [27] et de Bohren et Huffman [28]. La capacité d'absorption, de diffusion et d'extinction d'une particule est souvent représentée par sa section efficace notée C_{abs} , C_{sca} et $C_{\text{ext}} = C_{\text{abs}} + C_{\text{sca}}$. Cette grandeur est homogène à une surface et s'exprime en m^2 . La section efficace C peut être interprétée comme la surface effective d'interaction entre la particule et le rayonnement électromagnétique incident.

Il est commun d'utiliser des facteurs d'efficacité d'absorption, de diffusion et d'extinction, notés Q_{abs} , Q_{sca} et $Q_{\text{ext}} = Q_{\text{abs}} + Q_{\text{sca}}$ qui représentent le rapport de la section efficace par la surface projetée de la particule dans la direction d'incidence (lorsque la particule est sphérique, cette surface projetée est un disque). Les facteurs d'efficacité Q sont des grandeurs adimensionnelles.

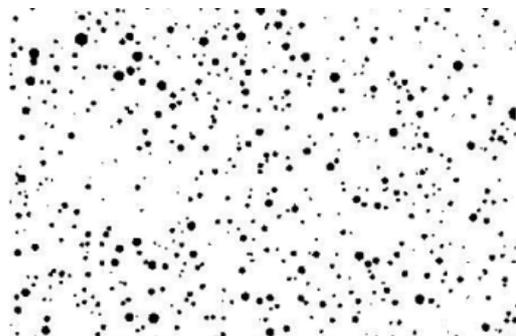
Les facteurs d'efficacité Q s'obtiennent de différentes manières selon le problème de diffusion à résoudre. Dans le cas particulier où la particule diffusante est de forme sphérique ou cylindrique, la théorie de Lorentz-Mie constitue une solution particulière des équations de Maxwell. Initialement, Ludvig Lorenz a décrit en 1890 l'interaction entre le rayonnement et une sphère isolée sans avoir eu recours aux équations de Maxwell. Plus tard en 1908, Gustav Mie a proposé une formulation basée sur les équations de Maxwell. Depuis, la théorie de Lorentz-Mie constitue une référence pour l'étude de la diffusion par une particule sphérique ou cylindrique. Elle a fait l'objet de plusieurs ré-écritures avec des formes numériques plus ou moins directes et surtout plus ou moins stables [26–28]. La théorie de Lorentz-Mie permet de calculer les sections efficaces C_{abs} , C_{sca} et C_{ext} et la fonction de phase $P_{\text{sca}}(\Theta)$ d'une particule sphérique ou cylindrique à partir du paramètre de taille x , son indice optique m et celui du milieu hôte. Le lecteur se référera aux références précédentes pour les développements mathématiques correspondants.

La figure 1.4 montre des exemples de matériaux hétérogènes, poreux ou fibreux, où la théorie de Lorentz-Mie peut être utilisée. La théorie de Lorentz-Mie a par exemple été mise en oeuvre par Lee [29–32] pour traiter l'absorption et diffusion d'une onde électromagnétique par un ensemble de fibres représentées par des cylindres de longueur infinie, puis appliquée par Boulet, Jeandel et Morlot [33,34] pour décrire le rayonnement thermique au sein d'isolants fibreux. Au CETHIL, Le

Foll [2,35] a utilisé la théorie de Lorentz-Mie pour modéliser le rayonnement dans des céramiques constituées de fibres de silice.



(a) Image MEB d'une céramique à base de fibres de silice [2].



(b) Coupe 2D d'une tomographie à rayons X d'une céramique de silice poreuse [36].

Figure 1.4 – Exemples de matériaux poreux ou fibreux.

1.3 Régime de Rayleigh

La diffusion par des particules dont la taille est très petite devant la longueur d'onde a d'abord été traitée par Lord Rayleigh [37] avant le développement de la théorie de Mie. Toutefois, les résultats pour des petites sphères s'obtiennent en considérant les bonnes limites dans la solution générale du modèle de Lorentz-Mie. On parle d'approximation de Rayleigh ou de régime de diffusion de Rayleigh pour les petites particules sans se restreindre aux particules non absorbantes.

D'après l'ouvrage de Bohren et Hoffman [28], les facteurs d'efficacité d'absorption Q_{abs} et de diffusion Q_{sca} dépendent directement de l'indice optique m et du paramètre de taille x de la petite particule diffusante :

$$\begin{aligned} Q_{\text{sca}} &= \frac{8}{3} \left\| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 1} \right\|^2 x^4 \\ Q_{\text{ext}} &= -4 \operatorname{Im} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 1} \right) x \end{aligned} \quad (1.6)$$

Comme $x^4 \ll x$, le facteur d'efficacité de diffusion peut être négligé comparé au facteur d'efficacité d'absorption. Ainsi, $Q_{\text{abs}} \simeq Q_{\text{ext}}$. Nous pouvons également remarquer la dépendance spectrale des facteurs d'efficacité de diffusion et d'absorption :

$$\begin{aligned} Q_{\text{sca}} &\propto \lambda^{-4} \\ Q_{\text{abs}} &\propto \lambda^{-1} \end{aligned} \quad (1.7)$$

La fonction de phase pour un régime de diffusion type Rayleigh est :

$$P_{\text{sca},\lambda}(\Theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{3}{4} (1 + \cos^2(\Theta)) \quad (1.8)$$

Dans les matériaux et les applications qui concernent les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit, la taille des particules diffusantes est au moins égale aux longueurs d'onde étudiées. Nous n'aurons donc pas à traiter ce régime.

1.4 Vers un modèle de transferts radiatifs

La modélisation des interactions rayonnement-matière à l'échelle de la longueur d'onde nécessite l'accès à la structure du milieu hétérogène et aux indices optiques des différentes phases le composant. Le paramètre de taille joue un rôle important car il permet d'adopter des régimes adaptés :

- Lorsque la taille caractéristique de l'hétérogénéité est très petite devant la longueur d'onde, le régime de Rayleigh fournit une solution rapide des équations de Maxwell dans le cas d'un diffuseur sphérique. L'efficacité de diffusion est proportionnelle au paramètre de taille à la puissance 4 tandis que l'efficacité d'absorption lui est directement proportionnelle.
- Lorsque la taille de l'hétérogénéité est très grande devant la longueur d'onde, les lois de l'optique géométrique peuvent être appliquées. Dès lors que l'on a accès à la structure du milieu hétérogène et aux indices optiques des différentes phases le constituant, il est possible d'appliquer des techniques de lancer de rayons pour simuler la propagation du rayonnement dans ces milieux.
- Enfin, si la taille de l'hétérogénéité est de l'ordre de la longueur d'onde, la résolution des équations de Maxwell devient nécessaire. La théorie de Lorentz-Mie fournit une solution particulière des équations de Maxwell dans le cas d'un diffuseur sphérique ou cylindrique.

Ces approches sont mises en oeuvre pour comprendre par exemple le rôle et les effets de la répartition des hétérogénéités sur la propagation du rayonnement dans le milieu hétérogène. Revenons désormais à la problématique de rayonnement visée dans ce manuscrit de thèse : nous cherchons à modéliser le comportement radiatif global de matériaux hétérogènes, et plus particulièrement à caractériser l'émission thermique de matériaux hétérogènes semi-transparents à haute température. Pour cela, nous utiliserons des modèles de transferts radiatifs plutôt que la résolution des équations de Maxwell. Dans les sections qui vont suivre, nous allons décrire les principaux modèles de transferts radiatifs utilisés dans les applications concernant les matériaux hétérogènes, en commençant par décrire l'Equation des Transferts Radiatifs (ETR) qui est le modèle fondamental de description du rayonnement thermique [20–22], et sert généralement de base aux autres modèles plus complexes ou plus simplifiés.

2 Equation du Transfert Radiatif (ETR)

L'ETR est le modèle le plus utilisé pour décrire les transferts radiatifs dans les milieux semi-transparents comme les matériaux hétérogènes, poreux ou fibreux. Dans les matériaux qui nous intéressent dans le cadre de ce travail, les hétérogénéités ont des répartitions aléatoires. Dans ce type de matériaux, l'ETR s'avère être un modèle adéquat pour décrire le transfert radiatif au

sein de ces matériaux [21, 22].

L'ETR s'obtient en réalisant le bilan d'énergie radiative sur un volume élémentaire. Ce bilan d'énergie est réalisé sur la luminance spectrale notée $L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ ou $L_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ qui représente la puissance spectrale Φ_ν ou Φ_λ rayonnée au point $\mathbf{x} = (x; y; z)$, par unité de fréquence ou de longueur d'onde, par unité de surface projetée et par unité d'angle solide Ω porté par la direction \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= \frac{d^3\Phi_\nu}{dS \cos(\theta) d\Omega d\nu} \quad [\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{Hz}^{-1}] \\ L_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= \frac{d^3\Phi_\lambda}{dS \cos(\theta) d\Omega d\lambda} \quad [\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{m}^{-1}] \end{aligned} \quad (1.9)$$

Pour un milieu semi-transparent, l'ETR décrit la variation de la luminance spectrale à la traversée d'un volume dV . Raisonnons sur les différents mécanismes d'interaction entre le rayonnement et la matière entre les positions \mathbf{x} et $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ et les instants t et $t + dt$ (avec $d\mathbf{x} = c dt$ où c est la vitesse de propagation du rayonnement dans le milieu). La figure 1.5 montre la variation de la luminance spectrale à la traversée du volume dV de longueur $d\mathbf{x}$ dans la direction \mathbf{u} .

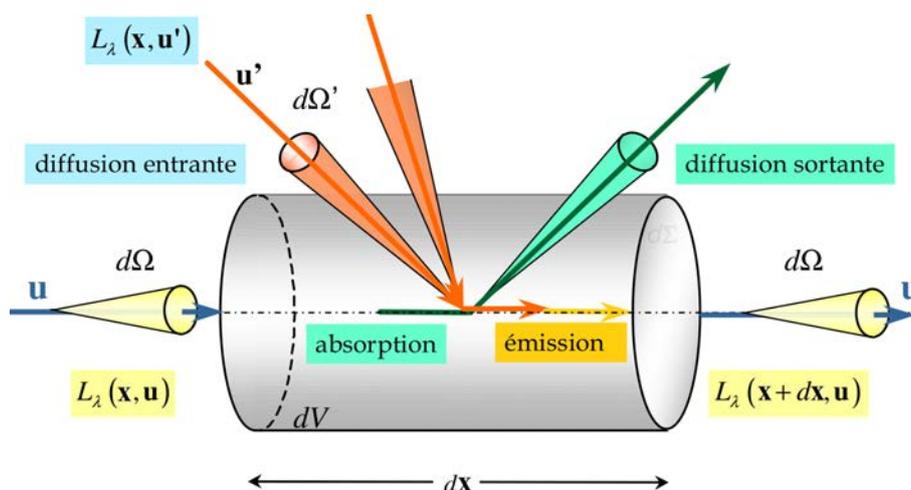


Figure 1.5 – Contributions aux variations de la luminance spectrale dans la direction \mathbf{u} à la traversée du volume dV de milieu semi-transparent.

— **Atténuation de la luminance par absorption :**

Ce phénomène correspond à la transformation de l'énergie électro-magnétique en énergie thermique. Pour un milieu absorbant, la variation due uniquement à l'absorption de la luminance le long de la direction \mathbf{u} à l'abscisse curviligne \mathbf{x} s'écrit :

$$\frac{L_\nu(\mathbf{x} + c dt, \mathbf{u}, t + dt) - L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{c dt} = -\kappa_\nu(\mathbf{x}) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (1.10)$$

κ_ν est le coefficient d'absorption monochromatique du milieu. Il a la dimension inverse d'une longueur. Le signe négatif traduit l'atténuation de la luminance.

Pour un milieu homogénéisé, nous pouvons définir la longueur de libre parcours moyen spectral d'absorption notée $l_{\text{abs},\nu} = \kappa_\nu^{-1}$ qui, dans une approche corpusculaire, représente la distance moyenne parcourue par un photon avant d'être absorbé.

— **Atténuation de la luminance par diffusion :**

Ce phénomène intervient lorsque le milieu est hétérogène. Ces hétérogénéités sont définies par un indice de réfraction différent de celui du milieu de propagation. La diffraction, la réflexion et la réfraction conduisent à une redistribution du rayonnement dans l'espace. L'atténuation de la luminance par diffusion dans la direction \mathbf{u} s'écrit donc :

$$\frac{L_\nu(\mathbf{x} + c \, dt, \mathbf{u}, t + dt) - L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{c \, dt} = -\sigma_\nu(\mathbf{x})L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (1.11)$$

σ_ν est le coefficient de diffusion monochromatique du milieu. Il a la dimension inverse d'une longueur. Le signe négatif traduit l'atténuation de la luminance.

Pour un milieu homogénéisé, nous pouvons également définir la longueur de libre parcours moyen spectral de diffusion notée $l_{\text{sca},\nu} = \sigma_\nu^{-1}$ qui, dans une approche corpusculaire, représente la distance moyenne parcourue par un photon avant d'être diffusé.

Si le milieu est à la fois absorbant et diffusant, nous pouvons faire intervenir le coefficient d'extinction spectral β_ν qui est la somme des coefficients d'absorption et de diffusion. De nouveau, l'inverse du coefficient d'extinction appelé libre parcours moyen spectral d'extinction et noté $l_{\text{ext},\nu} = \beta_\nu^{-1}$, indique la distance moyenne parcourue par un photon avant qu'il ne subisse une absorption ou une diffusion. Quelle est l'utilité d'introduire les libres parcours moyens d'un milieu semi-transparent ? Par comparaison des libres parcours moyens à la longueur caractéristique l_{milieu} du milieu étudié, l'importance relative des divers phénomènes peut être évaluée :

- $l_{\text{abs},\nu} \ll l_{\text{sca},\nu} \Leftrightarrow \kappa_\nu \gg \sigma_\nu$: quelle que soit la longueur caractéristique du milieu, la diffusion peut être négligée devant l'absorption.

Une autre grandeur permet de quantifier la part relative de la diffusion par rapport à l'extinction totale. C'est l'albédo de diffusion défini par :

$$\omega_\nu = \frac{\sigma_\nu}{\beta_\nu} = \frac{\sigma_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu} \quad (1.12)$$

Ainsi, si l'albédo tend vers 0, la diffusion peut être négligée devant l'absorption.

- $l_{\text{abs},\nu} \gg l_{\text{sca},\nu}$:
 - * $l_{\text{abs},\nu} \gg l_{\text{sca},\nu} \gg l_{\text{milieu}}$: l'absorption et la diffusion sont négligeables. Cela revient à considérer le milieu comme transparent.
 - * $l_{\text{abs},\nu} \gg l_{\text{sca},\nu} \simeq l_{\text{milieu}}$: l'absorption est négligeable devant la diffusion, et les photons subissent en moyenne une seule diffusion (la diffusion est dite simple).
 - * $l_{\text{abs},\nu} \gg l_{\text{milieu}} \gg l_{\text{sca},\nu}$: l'absorption est négligeable devant la diffusion, et les photons subissent plusieurs diffusions (la diffusion est dite multiple).

* $l_{\text{milieu}} \gg l_{\text{abs},\nu} \gg l_{\text{sca},\nu}$: les phénomènes d'absorption et de diffusion doivent être pris en compte.

— **Renforcement de la luminance par émission :**

L'émetteur idéal de rayonnement est le corps noir. A l'équilibre thermodynamique local, le corps noir est également un absorbeur idéal. L'émission du corps noir, notée $B_\nu(T)$, $B_\lambda(T)$ ou $B_\eta(T)$ dans l'équation 1.13, est régie par la loi de Planck¹ :

$$\begin{aligned} B_\nu(T) &= \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \quad [\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{Hz}^{-1}] \\ B_\lambda(T) &= \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \quad [\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{m}^{-1}] \\ B_\eta(T) &= 2hc^2\eta^3 \frac{1}{\exp\left(\frac{hc\eta}{k_B T}\right) - 1} \quad [\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{(m}^{-1}\text{)}^{-1}] \end{aligned} \quad (1.13)$$

où :

- $h = 6,6255.10^{-34}$ J.s est la constante de Planck ;
- $k_B = 1,3805.10^{-23}$ J.K⁻¹ est la constante de Boltzmann ;
- $c = \frac{c_0}{n}$ est la vitesse de propagation du rayonnement dans le milieu.

Le renforcement de la luminance par émission dans un milieu semi-transparent est proportionnel à la loi d'émission de Planck :

$$\frac{L_\nu(\mathbf{x} + c \, dt, \mathbf{u}, t + dt) - L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{c \, dt} = +\kappa_\nu(\mathbf{x})B_\nu(T(\mathbf{x}, t)) \quad (1.14)$$

Le terme de renforcement par émission est souvent négligé lorsqu'on considère le comportement radiatif d'un matériau hétérogène à température ambiante. Il peut à l'opposé être important dès lors qu'on considère un matériau à haute température.

— **Renforcement de la luminance par diffusion :**

Ce phénomène correspond à la déviation des luminances provenant de toutes les direction \mathbf{u}' autres que \mathbf{u} , dans la direction \mathbf{u} :

$$\frac{L_\nu(\mathbf{x} + c \, dt, \mathbf{u}, t + dt) - L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{c \, dt} = +\sigma_\nu(\mathbf{x}) \int_{4\pi} P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u}) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}', t) d\mathbf{u}' \quad (1.15)$$

Dans ce cas, la diffusion est dite entrante. La description de la contribution des luminances entrantes (se propageant initialement dans la direction \mathbf{u}' et diffusées dans la direction \mathbf{u}) se fait grâce à la fonction de phase $P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{u}', \mathbf{u})$ qui décrit la probabilité, en l'abscisse \mathbf{x} , que la luminance en provenance de la direction \mathbf{u}' soit diffusée dans la direction \mathbf{u} .

La fonction de phase $P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u})$ doit être positive et normalisée :

$$\int_{4\pi} P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u}) d\mathbf{u}' = 1$$

1. La conversion en fréquence ν , en longueur d'onde λ ou en nombre d'onde η de la Loi de Planck utilise la relation suivante : $B_\nu(T)|d\nu| = B_\lambda(T)|d\lambda| = B_\eta(T)|d\eta|$ où $c = \lambda\nu = \frac{\nu}{\eta}$.

2.1 Formulation locale de l'ETR

A la limite où dt tend vers 0, le membre de gauche des équations précédentes représente la dérivée totale de la luminance :

$$\begin{aligned} \frac{L_\nu(\mathbf{x} + c dt, \mathbf{u}, t + dt) - L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{c dt} &= \frac{1}{c} \frac{d}{dt} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \\ &= \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \\ &= \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \end{aligned}$$

En régime permanent et pour les applications thermiques visées dans cette thèse, le terme $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$ peut être négligé devant les autres du fait de la très grande vitesse de propagation du rayonnement dans le milieu ($c \simeq 3.10^8 \text{m.s}^{-1}$). Nous sommes alors en régime stationnaire.

En regroupant l'ensemble des mécanismes d'atténuation (extinction par absorption et diffusion) et de renforcement (émission propre et diffusion entrante), l'ETR sous sa forme locale dans le cas d'un régime stationnaire s'écrit :

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= -\beta_\nu(\mathbf{x}) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ &+ \kappa_\nu(\mathbf{x}) B_\nu(T(\mathbf{x})) \\ &+ \sigma_\nu(\mathbf{x}) \int_{4\pi} P_{\text{sca}, \nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u}) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \end{aligned}} \quad (1.16)$$

Il s'agit d'une équation intégro-différentielle qui permet d'obtenir le champs des luminances en tout point de l'espace. Le développement de cette équation a nécessité certaines hypothèses :

- Le milieu est à l'équilibre thermodynamique local.
- Dans le volume élémentaire dV , le milieu a un indice de réfraction uniforme.

2.2 Formulation intégrale de l'ETR

Comme nous le verrons dans le chapitre 2 sur les méthodes Monte Carlo, ces dernières permettent d'estimer des grandeurs intégrales. Tout au long de ce manuscrit, l'ETR sera exprimée sous sa forme intégrale afin de la résoudre par une méthode Monte Carlo. La méthode pour exprimer une luminance sous forme intégrale est détaillée dans cette sous-section.

Pour exprimer la luminance $L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ en un point \mathbf{x}_0 et dans une direction \mathbf{u}_0 , nous allons intégrer l'ETR entre deux positions \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_0 le long de la direction \mathbf{u}_0 :

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_1 + \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| \mathbf{u}_0$$

Nous nous baserons sur le schéma suivant pour les différentes notations utilisées dans cette sous-section.

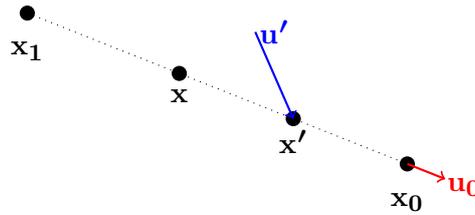


Figure 1.6 – Notations utilisées pour la formulation intégrale de l'ETR.

Reprenons les mécanismes d'interaction du rayonnement un à un comme démontré dans la sous-section précédente.

— **Atténuation par absorption et par diffusion :**

L'atténuation par absorption et par diffusion est appelée extinction. La contribution de l'extinction dans l'expression de la luminance au point \mathbf{x}_0 est :

$$L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = L_\nu(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \exp \left(\int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} -(\kappa_\nu(\mathbf{x}) + \sigma_\nu(\mathbf{x})) dl \right) \quad (1.17)$$

Pour alléger l'écriture, nous pouvons définir une transmittance $\Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_0)$ qui traduit la part de rayonnement transmis de \mathbf{x}_1 à \mathbf{x}_0 selon la direction \mathbf{u}_0 telle que :

$$\Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_0) = \exp \left(\int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} -\beta_\nu(\mathbf{x}) dl \right) \quad (1.18)$$

Ainsi, la transmission de la luminance après extinction le long du chemin $||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|| \mathbf{u}_0$ s'écrit :

$$L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = L_\nu(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_0) \quad (1.19)$$

— **Renforcement par émission :**

Soit une position \mathbf{x} comprise entre \mathbf{x}_0 et \mathbf{x}_1 . Le rayonnement émis en \mathbf{x} et reçu en \mathbf{x}_0 a été "transmis" de \mathbf{x} à \mathbf{x}_0 après avoir été atténué par absorption et par diffusion. Nous pouvons donc écrire :

$$L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} \kappa_\nu(\mathbf{x}) B_\nu(T(\mathbf{x})) \exp \left(\int_0^{||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||} -\beta_\nu(\mathbf{x}') dl' \right) dl \quad (1.20)$$

En allégeant l'écriture avec la transmittance, l'écriture intégrale du renforcement de la luminance par émission est :

$$L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} \kappa_\nu(\mathbf{x}) B_\nu(T(\mathbf{x})) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0) dl \quad (1.21)$$

— **Renforcement par diffusion :**

De la même manière que pour le renforcement par émission, si nous considérons une position \mathbf{x} entre \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_0 , alors la luminance en provenance de toutes les directions \mathbf{u}' et diffusée dans la direction \mathbf{u}_0 en \mathbf{x} est transmise le long du chemin $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0$:

$$L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} \sigma_\nu(\mathbf{x}) \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca}, \nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u}_0) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') du' \right) \exp \left(\int_0^{||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||} -\beta_\nu(\mathbf{x}') dl' \right) dl \quad (1.22)$$

Cela revient à écrire l'expression suivante en utilisant la transmittance :

$$L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} \sigma_\nu(\mathbf{x}) \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u}_0) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \right) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0) dl \quad (1.23)$$

En regroupant l'ensemble des mécanismes d'atténuation (extinction par absorption et diffusion) et de renforcement (émission propre et diffusion entrante), l'ETR sous sa forme intégrale s'écrit :

$$\begin{aligned} L_\nu(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & L_\nu(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_0) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_0) \\ & + \int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} \kappa_\nu(\mathbf{x}) B_\nu(T(\mathbf{x})) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0) dl \\ & + \int_0^{||\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0||} \sigma_\nu(\mathbf{x}) \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' | \mathbf{u}_0) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \right) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0) dl \end{aligned} \quad (1.24)$$

L'ETR fait intervenir trois propriétés caractéristiques du milieu étudié :

- Le coefficient d'absorption κ_ν qui décrit les phénomènes d'absorption volumique dans le milieu ;
- Le coefficient de diffusion σ_ν qui décrit la diffusion volumique due à la présence d'hétérogénéités dans le milieu ;
- La fonction de phase $P_{\text{sca},\nu}$ qui peut être considérée comme la probabilité, en l'abscisse \mathbf{x} , que luminance en provenance de la direction \mathbf{u}' soit diffusée dans la direction \mathbf{u} .

Avant d'expliquer comment déterminer ces trois propriétés, faisons un point sur les différents types de fonctions de phase utilisées et sur les méthodes de résolution de l'ETR.

2.3 Fonctions de phase usuelles

Dès que le milieu étudié présente des hétérogénéités, il est nécessaire de prendre en compte les phénomènes de diffusion. La difficulté réside dans le choix de la fonction de phase $P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{u}', \mathbf{u})$ (la connaissance de la structure du matériau peut aider à choisir une fonction de phase adéquate) et dans l'utilisation d'un modèle simplifié de celle-ci pour faciliter les calculs numériques.

Développement en polynômes de Legendre

Chu et Churchill [38, 39] ont proposé de décomposer la fonction de phase en une somme de polynômes de Legendre. Elle ne dépend que de l'angle Θ entre les directions \mathbf{u}' et \mathbf{u} :

$$P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}) = P_{\text{sca},\nu}(\cos(\Theta)) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=0}^{i=\infty} A_{i,\nu} P_i(\cos(\Theta)) \quad (1.25)$$

où $A_{i,\nu}$ sont les coefficients de développement des polynômes de Legendre (avec $A_{0,\nu} = 1$) et P_i les polynômes de Legendre au degré i . L'un des intérêts de cette méthode est la rapide

reconstruction de la fonction de phase pour n'importe quel angle de diffusion Θ . Cependant, la qualité de la représentation dépend de la troncature : un ordre faible donne une fonction de phase approchée, tandis qu'un ordre élevé conduit à une meilleure représentation de la diffusion, mais entraîne des calculs de plus en plus complexes et lourds.

Fonction de phase isotrope

Dire que la fonction de phase est isotrope signifie que le rayonnement peut être diffusé uniformément dans l'espace. En d'autres termes, quelle que soit la direction \mathbf{u}' , $P_{\text{sca},\nu}(\mathbf{u}' \cdot \mathbf{u})$ est égal à $\frac{1}{4\pi}$. Cela revient à considérer un seul terme dans le développement en polynômes de Legendre de l'équation 1.25. C'est une hypothèse qui est fréquemment non valide, sauf si la structure du matériau contribue à rendre la diffusion isotrope.

Linéaire anisotrope et approximation de transport

La fonction de phase linéaire anisotrope n'est autre que la restriction à l'ordre 1 du développement en série de polynômes de Legendre :

$$P_{\text{sca},\nu,\text{LA}}(\Theta) = \frac{1}{4\pi} (1 + 3g_\nu \cos(\Theta)) \quad (1.26)$$

où g_ν est le paramètre d'asymétrie qui représente une direction de diffusion moyenne :

$$g_\nu = \overline{\cos(\Theta)} = \int_{4\pi} P_{\text{sca},\nu}(\Theta) \cos(\Theta) d\Omega \quad (1.27)$$

La fonction de phase linéaire anisotrope n'est valable que lorsque $|g_\nu| < \frac{1}{3}$. Elle devient négative lorsque $|g_\nu| > \frac{1}{3}$ et n'est donc pas adéquate pour bien modéliser les pics de diffusion vers l'avant ou vers l'arrière.

Si nous prenons en compte seulement le pic en diffusion vers l'avant ou vers l'arrière, il est possible de représenter la fonction de phase comme une combinaison linéaire de deux fonctions de Dirac. Sous cette approximation, l'intégrale de la luminance sur les angles solides (diffusion entrante dans l'ETR) disparaît. Lorsque le milieu de propagation est monodimensionnel, cette approximation peut suffire. Elle peut toutefois s'avérer imprécise pour modéliser la diffusion dans des milieux plus complexes [22].

Un troisième modèle de fonction de phase, communément appelé approximation de transport, combine une fonction de phase isotrope et un terme Dirac qui décrit un pic de diffusion vers l'avant ou vers l'arrière [40] :

$$P_{\text{sca},\nu,\text{tr}}(\Theta) = \frac{1}{4\pi} ((1 - g_\nu) + 2g_\nu \delta(1 - \cos(\Theta))) \quad (1.28)$$

Sous l'approximation de transport, la formulation locale de l'ETR devient :

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} \cdot \nabla L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= -\beta_\nu \cdot L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \kappa_\nu B_\nu(T(\mathbf{x})) + \sigma_\nu \int_{4\pi} P_{\text{tr}, \nu} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot d\mathbf{u}' \\
&= -\beta_\nu \cdot L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \kappa_\nu B_\nu(T(\mathbf{x})) + \sigma_\nu \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} \left((1 - g_\nu) + 2g_\nu \delta(1 - \cos(\Theta)) \right) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot d\mathbf{u}' \\
&= -\beta_\nu \cdot L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \kappa_\nu B_\nu(T(\mathbf{x})) + \sigma_\nu (1 - g_\nu) \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot d\mathbf{u}' \\
&\quad + 2g_\nu \sigma_\nu \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} \delta(1 - \cos(\Theta)) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot d\mathbf{u}'
\end{aligned}$$

Or,

$$\begin{aligned}
2g_\nu \sigma_\nu \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} \delta(1 - \cos(\Theta)) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot d\mathbf{u}' &= 2g_\nu \sigma_\nu \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{1}{4\pi} \delta(1 - \cos(\Theta)) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot \sin(\Theta) d\Theta d\phi \\
&= g_\nu \sigma_\nu \int_0^\pi \delta(1 - \cos(\Theta)) L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') \cdot \sin(\Theta) d\Theta \\
&= g_\nu \sigma_\nu L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u})
\end{aligned}$$

Ainsi, la formulation locale de l'ETR sous l'approximation de transport devient :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = -\beta'_\nu L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \kappa_\nu B_\nu(T(\mathbf{x})) + \sigma'_\nu \int_{4\pi} \frac{1}{4\pi} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}'$$

avec $\sigma'_\nu = \sigma_\nu (1 - g_\nu)$ le coefficient de diffusion réduit et $\beta'_\nu = \kappa_\nu + \sigma_\nu (1 - g_\nu)$ le coefficient d'extinction.

Utiliser l'approximation de transport revient à considérer une fonction de phase isotrope et à inclure l'anisotropie dans le coefficient de diffusion à travers le coefficient de diffusion réduit. Cette approximation a notamment permis à Dombrovsky *et. al.* [41, 42] d'obtenir une solution semi-analytique de l'ETR pour modéliser la transmittance et la réflectance directionnelles-hémisphériques à température ambiante, et l'émittance normale dans le cas de milieux à haute température.

Delta-Eddington

Lorsque la diffusion présente un pic vers l'avant (cas des sphères de grands diamètres devant la longueur d'onde), le développement en polynômes de Legendre peut être complexe car il nécessite plusieurs termes. Le calcul est pénalisé dans ce cas de figure. Le pic vers l'avant peut être remplacé par une fonction Delta (fonction de Dirac). Introduite par Joseph *et. al.* [43], la fonction de phase type Delta-Eddington est une combinaison linéaire d'une diffusion pointue vers l'avant et une fonction de diffusion anisotrope : cela se traduit par une combinaison d'une fonction de Dirac et d'un développement en série de polynômes de Legendre à l'ordre 1 :

$$P_{\text{sca}, \nu, \text{DE}}(\Theta) = \frac{1}{4\pi} \left[2f_\nu \delta(1 - \cos(\Theta)) + (1 - f_\nu) (1 + 3g_\nu \cos(\Theta)) \right] \quad (1.29)$$

où f_ν est un coefficient compris entre -1 et 1 qui quantifie l'anisotropie de la diffusion, et g_ν est le paramètre d'asymétrie compris entre $-1/3$ et $1/3$ (ceci est la conséquence de la normalisation de la fonction de phase).

Henyeey-Greenstein

Henyeey et Greenstein [44] ont proposé une fonction de phase qui prend en compte un pic de diffusion vers l'avant ou vers l'arrière (rétrodifffusion). Elle ne dépend que du paramètre d'asymétrie g et de l'angle de diffusion Θ , soit :

$$P_{\text{sca},\nu,\text{HG}}(\Theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{\left(1 + g^2 - 2g\nu\cos(\Theta)\right)^{3/2}} \quad (1.30)$$

Dans cette équation, le coefficient d'asymétrie g_ν est compris entre -1 et 1 (positif lorsque la diffusion admet un pic vers l'avant, négatif pour la rétro-diffusion).

La figure 1.7a illustre l'évolution de la fonction de phase de Henyeey-Greenstein en fonction de l'angle de diffusion Θ (angle entre le rayonnement incident et le rayonnement diffusé). Lorsque le facteur d'asymétrie g tend vers 1 , la diffusion admet un pic vers l'avant ($\Theta = 0^\circ$). Quand $g = 0$, la diffusion est isotrope. La diffusion admet un pic vers l'arrière ($\Theta = \pm 180^\circ$) lorsque g tend vers -1 . Nous pouvons remarquer la relation de symétrie suivante :

$$P_{\text{sca},\nu,\text{HG}}(-g, \Theta + \pi) = P_{\text{sca},\nu,\text{HG}}(g, \Theta)$$

Dans sa thèse, Nicolau [9] a modifié le modèle d'Henyeey-Greenstein pour combiner une diffusion très pointue vers l'avant et une rétrodiffusion (avec un coefficient d'asymétrie négatif) :

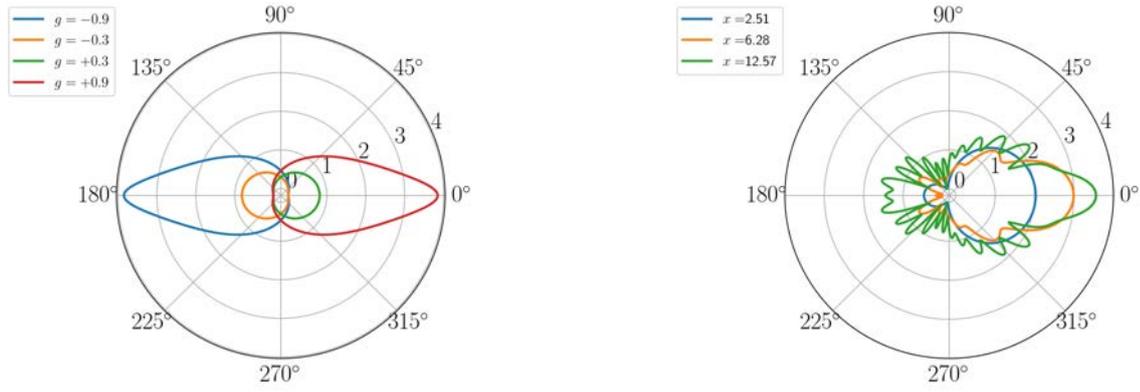
$$P_{\text{sca},\nu,\text{N}}(\Theta) = f_2 \left[f_1 P_{\text{sca},\nu,\text{HG}}(\Theta, g_1) + (1 - f_1) P_{\text{sca},\nu,\text{HG}}(\Theta, g_2) \right] + \frac{1 - f_2}{4\pi} \quad (1.31)$$

où f_1 , f_2 et g_1 varient de 0 à 1 , tandis que g_2 varie de -1 à 0 . Le paramètre f_1 fait la pondération entre la participation du pic vers l'avant et celle du pic vers l'arrière, tandis que f_2 pondère l'effet d'anisotropie contre l'effet d'isotropie.

Fonction de phase de Mie

La fonction de phase de Mie se déduit de la théorie de Lorentz-Mie qui constitue une solution particulière des équations de Maxwell dans le cas de diffuseurs sphériques ou cylindriques. Le lecteur se référera à l'ouvrage de Bohren et Huffman [28] pour les expressions analytiques de la fonction de phase de Mie dans le cas de diffuseurs sphériques. Sur la figure 1.7b est représentée la fonction de phase de Mie pour une particule sphérique de SiO_2 . Nous pouvons remarquer que la fonction de phase de Mie dépend du paramètre de taille (rapport relatif de la taille de la particule à la longueur d'onde dans le vide) et varie fortement avec l'angle de diffusion Θ . Par exemple, si le paramètre de taille est de $12,6$ environ, le rayonnement est diffusé dans toutes les directions avec une plus grande probabilité d'être diffusé vers l'avant.

La fonction de phase choisie est ensuite introduite dans l'ETR pour calculer la luminance. Lorsque les trois propriétés radiatives (coefficients d'absorption et de diffusion, fonction de phase) sont connues, la résolution de l'ETR nécessite généralement la mise en oeuvre des méthodes numériques dont les principales sont présentées dans la sous-section ci-après.



(a) Fonction de phase de Henyey-Greenstein.

(b) Exemple de fonction de phase de Mie d'une particule sphérique de SiO₂ à $\lambda = 5 \mu\text{m}$, à $T = 298 \text{ K}$ et $m = 1,347 - 0,005j$ [45].

Figure 1.7 – Exemples de fonctions de phase usuelles.

2.4 Méthodes de résolution de l'ETR

Pour résoudre l'ETR et modéliser les transferts radiatifs au sein de milieux hétérogènes, plusieurs méthodes peuvent être utilisées. Ces méthodes sont listées de manière non exhaustive ci-dessous. La méthode Monte Carlo sera quant à elle développée dans le chapitre 2.

Harmoniques sphériques - Approximation P_N

Jeans [46] a été le premier à adopter la méthode des harmoniques sphériques dans ses travaux sur la modélisation des transferts radiatifs dans les étoiles. La luminance $L_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ à la position \mathbf{x} peut être vue comme une fonction scalaire par unité de surface sphérique de rayon unité autour de la position \mathbf{x} . Cette fonction peut être exprimée par une série de Fourier définie comme :

$$L_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \sum_{i=0}^{i=\infty} \sum_{m=-i}^{m=i} I_i^m(s) Y_i^m(\mathbf{u}) \quad (1.32)$$

où $I_i^m(s)$ sont des coefficients qui dépendent de la position et $Y_i^m(\mathbf{u})$ sont les harmoniques sphériques données par :

$$Y_i^m(\mathbf{u}) = \begin{cases} \cos(m\psi) P_i^m(\cos(\theta)) & \text{pour } m \geq 0 \\ \sin(|m|\psi) P_i^m(\cos(\theta)) & \text{pour } m < 0 \end{cases} \quad (1.33)$$

Les harmoniques sphériques satisfont les équations de Laplace en coordonnées sphériques. θ et ψ sont respectivement les angles polaire et azimutal décrivant la direction \mathbf{u} . P_i^m est le polynôme de Legendre défini par :

$$P_i^m(x) = (-1)^m \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^i i!} \frac{d^{i+|m|}}{dx^{i+|m|}} (x^2-1)^i \quad (1.34)$$

La méthode consiste à :

1. Injecter l'équation 1.33 dans l'équation des transferts radiatifs 1.16 après avoir adimensionné l'ETR avec le coefficient d'extinction (on utilise $d\tau_\lambda = \beta_\lambda dl$ avec $\beta_\lambda = \kappa_\lambda + \sigma_\lambda$) ;

2. Utiliser le développement en polynômes de Legendre de la fonction de phase (équation 1.25) ;
3. Multiplier la nouvelle équation par Y_l^m ;
4. Intégrer sur toutes les directions ;
5. Exploiter les propriétés d'orthogonalité des harmoniques sphériques pour obtenir un système d'équations ayant les coefficients I_l^m pour inconnues [47].

Ordonnées discrètes (DOM) - Approximation S_N

La méthode des ordonnées discrètes est un outil permettant de transformer l'ETR en un ensemble d'équations différentielles. Initialement introduite par Chandrasekar [48], la méthode est basée sur une représentation discrète de la variation directionnelle de la luminance spectrale. Une solution du problème de transport consiste à résoudre l'ETR pour un ensemble de directions discrètes couvrant l'angle solide total 4π .

Pour chaque direction \mathbf{u}_i pour $i = \{1, \dots, N\}$, l'intégrale selon la direction est remplacée par des quadratures numériques telles que :

$$\int_{4\pi} L_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \simeq \sum_{i=1}^{i=N} w_i L_\lambda(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i, t) \quad (1.35)$$

w_i est le poids de quadrature associé à la direction \mathbf{u}_i . Le choix du schéma de quadratures est arbitraire tant que les moments d'ordre 0, 1 et 2 sont respectés :

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} d\Omega &= \sum_{i=1}^{i=N} w_i = 4\pi \\ \int_{4\pi} \mathbf{u} \cdot d\Omega &= \sum_{i=1}^{i=N} w_i \mathbf{u}_i = \mathbf{0} \\ \int_{4\pi} \mathbf{u} \mathbf{u} \cdot d\Omega &= \sum_{i=1}^{i=N} w_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i = \frac{4}{3} \delta \end{aligned} \quad (1.36)$$

avec δ le tenseur unité. Pour différentes quadratures, Lee [49] puis Lathrop et Carlson [50] ont tabulé différentes directions et différents poids de quadrature répondant aux moments d'ordre 0, 1 et 2.

Méthode 2-flux

Introduite en 1905 par Schuster [51] et popularisée par Kubelka [52], la méthode 2-flux repose sur deux hypothèses simplificatrices :

- Le rayonnement incident sur le milieu étudié est supposé diffus. Il n'y a alors pas de flux collimaté susceptible de se propager au sein du milieu.
- Tous les flux diffus sont décomposés en deux flux de sens de propagation opposés. Pour illustrer son utilisation, en transferts radiatifs atmosphériques, la méthode 2-flux (également appelée "*two-stream method*"), décompose la luminance en une luminance descen-

dante (dans le sens des altitudes décroissantes) et en une luminance montante (dans le sens des altitudes croissantes).

Méthode 4-flux

La méthode 4-flux a été introduite par Silberstein [53] et permet de tenir compte à la fois des flux diffus et des flux collimatés qui se propagent au sein d'un milieu diffusant. Cette méthode considère la propagation des flux diffus et spéculaires dans deux directions :

- la direction de propagation du rayonnement incident ;
- la direction de propagation opposée.

La méthode 4-flux calcule, selon ces deux directions, l'atténuation de ces flux par diffusion et par absorption. Comme dans la méthode 2-flux, l'information angulaire sur la diffusion est perdue.

Méthodes Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est souvent considérée comme méthode de référence car elle permet d'avoir simultanément une estimation de la grandeur radiative d'intérêt et l'incertitude sur le résultat numérique. Utilisée initialement en physique nucléaire dans les années 1940, c'est Howell [54] qui utilise la méthode Monte Carlo pour la première fois en transferts radiatifs. Il s'agit une méthode stochastique qui s'appuie sur une formulation intégrale de l'ETR. La chapitre 2 de ce manuscrit est entièrement dédié à cette méthode de résolution de l'ETR.

3 Modélisation des transferts radiatifs dans des matériaux hétérogènes

La modélisation des transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes pour des applications à haute température est un domaine qui s'est particulièrement développé depuis la fin des années 2000. Citons par exemple les travaux de Chahlafi [55] qui s'intéresse aux coeurs de réacteurs nucléaires lors d'un accident grave ou de Zarrouati [56] qui étudie des réacteurs tubulaires remplis de pastilles catalytiques pour des procédés de vaporeformage de méthane. Le transfert radiatif dans des mousses ou dans des céramiques poreuses réticulées pour les absorbeurs volumiques solaires a également fait l'objet de plusieurs études, comme celles de Petrash *et. al.* [57] ou de Haussener *et. al.* [58, 59].

3.1 Homogénéisation et modèles radiatifs

Il existe deux approches pour modéliser les transferts dans les matériaux hétérogènes. Une première approche est dite discrète et se base sur la connaissance des phénomènes physiques d'absorption, de réfraction et de réflexion à l'échelle des hétérogénéités. Elle suppose l'accès à la structure du matériau hétérogène pour décrire de manière fine le transfert radiatif pour chaque hétérogénéité.

Une seconde approche dite continue est quant à elle basée sur l'homogénéisation. Homogénéiser, c'est trouver un milieu homogène équivalent qui aurait le même comportement radiatif que le milieu hétérogène réel. Cela revient à considérer que le volume de travail est supérieur au Volume Élémentaire Représentatif (VER). Un VER (voir figure 1.8) est choisi de telle sorte que la distribution des hétérogénéités à l'intérieur de ce volume soit représentative de la répartition des hétérogénéités dans tout le matériau. Les transferts dans le VER doivent également être représentatifs des transferts à l'échelle globale du matériau.

Modéliser le transfert radiatif à l'échelle de chaque hétérogénéité (quelques microns voire moins) peut vite s'avérer contraignant, surtout si l'objectif de la modélisation est de connaître le comportement radiatif global du matériau hétérogène d'intérêt (échelle du centimètre). Ainsi, un ensemble d'hétérogénéités est alors représenté par un matériau homogène avec des propriétés radiatives différentes des propriétés réelles des différents corps constituant le matériau hétérogène. Ces propriétés sont dites propriétés radiatives homogènes équivalentes. La phase homogène équivalente alors est entièrement décrite par les propriétés radiatives qui interviennent dans l'ETR, à savoir les coefficients volumiques d'absorption κ_ν , de diffusion σ_ν et la fonction de phase $P_{sca,\nu}$.

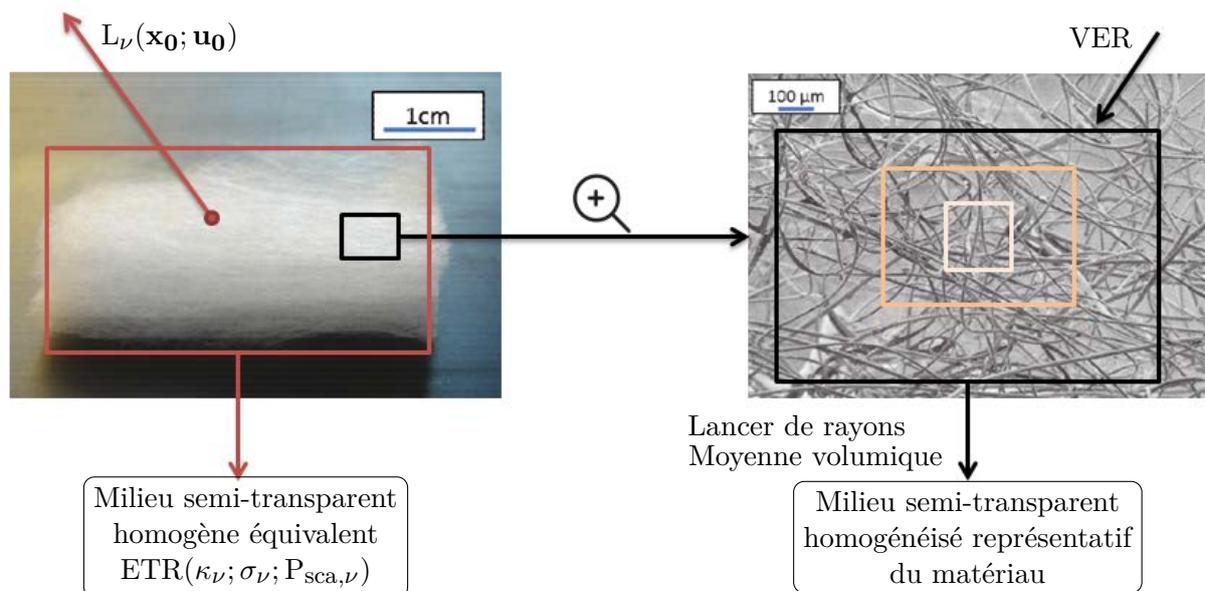


Figure 1.8 – Echelles de représentation d'un milieu homogénéisé. Exemple d'un feutre faible densité constitué de fibres de Quartz [60].

3.1.1 Méthode RDFI

Une première méthode pour modéliser les transferts radiatifs dans des milieux hétérogènes utilise une technique de lancer de rayons dans le matériau hétérogène répliqué numériquement (morphologie proche de la structure réelle du matériau étudié). Il s'agit d'une approche purement statistique dont le principe de base est le calcul des libres parcours d'extinction dans le milieu hétérogène. L'avantage de cette méthode est la prise en compte de la structure réelle du

matériau hétérogène pour modéliser son comportement radiatif.

Des études menées par Taine *et al.* [61, 62] ont montré que dans certains milieux homogénéisés, l'ETR n'est pas toujours valide. Ce n'est plus l'ETR qui doit être utilisée, mais plutôt l'ETR généralisée (dénommée ETRG). Quand la loi de Beer n'est pas valide (le milieu est dit non-Beerien), les propriétés radiatives caractérisant le matériau ne sont plus des coefficients d'absorption et de diffusion, mais des fonctions statistiques radiatives. Les premiers travaux sur les milieux homogénéisés non-Beeriens remontent à ceux de Tancrez et Taine [63] qui concernaient des empilements de sphères. Une technique de lancer de rayons a été développée pour les suivre dans le milieu hétérogène jusqu'à leur premier point d'extinction. A partir de ces longueurs d'extinction sont déduites les fonctions de distribution cumulée d'extinction qui peuvent être liées aux paramètres effectifs du milieu homogénéisé (coefficient d'extinction). Cette méthode est connue sous le nom de *Radiative Distribution Function Identification* (RDFI). Zeghondy *et al.* [64, 65] l'appliquent à des mousses de mullite numérisées par tomographie. Petrasch *et al.* [57] ou encore Haussener *et al.* [58, 59] s'en servent pour modéliser le transfert radiatif dans des mousses céramiques.

3.1.2 Prise de moyenne volumique

Nous venons de voir que les techniques de lancer de rayons appliquées à des structures numériques permettent d'obtenir des coefficients radiatifs équivalents. Une seconde méthode qui peut être mise en oeuvre est l'application à l'ETR de l'opérateur de prise de moyenne volumique (*volume average*). La méthode consiste à considérer que le matériau hétérogène est constitué d'au moins deux phases homogènes dont chacune est modélisée par l'ETR. La question principale qui se pose est : comment obtenir un milieu homogène équivalent de propriétés radiatives effectives, tout en prenant en compte la structure hétérogène et les différentes interactions entre les phases du matériau hétérogène ?

Les premiers chercheurs qui ont proposé un formalisme basé sur l'opérateur de prise de moyenne volumique sont Consalvi *et al.* [66] qui ont développé une ETR "multiphasique" à partir d'une intensité locale moyenne. Lipinski *et al.* [67] ont ensuite repris la méthode pour proposer des propriétés radiatives effectives de la phase continue équivalente. Pour cela, ils considèrent un milieu poreux statistiquement homogène, isotrope, gris, absorbant et diffusant. Les milieux considérés sont constitués de deux phases semi-transparentes. En partant de la formulation locale de l'ETR pour chacune des phases et en appliquant l'opérateur de prise de moyenne volumique à chaque terme de l'ETR, ils obtiennent un modèle macroscopique à deux phases dans lequel la transmission de l'énergie d'une phase à l'autre est prise en compte. Le principal avantage de cette méthode est l'obtention des propriétés thermophysiques et radiatives à l'échelle du matériau hétérogène. Cependant, le VER à choisir pour y appliquer l'opérateur de prise de moyenne doit être suffisamment grand pour contenir un grand nombre d'hétérogénéités, mais suffisamment petit comparé à la taille du matériau hétérogène. Aussi, un tel modèle appliqué à une morphologie hétérogène réelle nécessiterait de discrétiser une géométrie complexe et serait

coûteux en temps de calcul. Il reste néanmoins adapté à des géométries simplifiées.

3.2 Détermination des propriétés radiatives

La connaissance des propriétés radiatives (coefficient d'absorption, coefficient de diffusion et fonction de phase) est indispensable pour la résolution de l'ETR ou des autres modèles de rayonnement. Rappelons que ces propriétés ne sont pas directement accessibles par la mesure.

Sacadura [68] dresse un état de l'art sur la détermination des propriétés radiatives, nécessaire à la résolution de l'ETR. Deux approches co-existent pour la détermination des propriétés radiatives :

- une approche prédictive basée sur une modélisation fine des transferts radiatifs (pouvant aller jusqu'à la résolution des équations de Maxwell) à partir de la connaissance de la structure des matériaux, de leur composition et des indices de réfraction ;
- une approche d'identification qui couple la résolution d'un modèle radiatif à des mesures expérimentales (en général des mesures de flux radiatifs transmis, réfléchis ou émis).

3.2.1 Approche prédictive

L'approche prédictive s'appuie sur la connaissance de la structure des matériaux et des propriétés optiques (indice de réfraction complexe) afin de déterminer les propriétés radiatives soit de manière analytique, soit de manière numérique. Cette approche implique souvent l'utilisation de techniques de lancer de rayon sous l'approximation de l'optique géométrique pour des hétérogénéités de taille grande devant les longueurs d'onde d'étude. Il est également possible de mettre en oeuvre la théorie de diffusion des ondes électromagnétiques (théorie de Lorentz-Mie pour le cas des sphères par exemple, théorie de Rayleigh ...) à condition de considérer que les particules sont distribuées et orientées de manière aléatoire dans le milieu hétérogène. Dans le cas de la diffusion indépendante, les propriétés radiatives de tout le matériau s'obtiennent en sommant la contribution de chacune des particules présentes dans le milieu.

Comme nous venons de le voir précédemment, Zeghondy *et. al.* [64, 65] ont proposé une procédure de lancer de rayons de type Monte Carlo qu'ils ont ensuite appliquée à des mousses de mullite numérisées par tomographie. La méthode RDFI, initialement proposée par Tancrez et Taine [63] pour l'étude d'un empilement de sphères, a été mise en oeuvre afin de calculer la distribution des distances parcourues par ces rayons. Les propriétés radiatives du milieu homogène peuvent directement être liées aux distances parcourues par les rayons dans la phase fluide des mousses de mullite. Par exemple, le coefficient d'extinction β_ν du milieu homogène équivalent peut être obtenu en appliquant la loi de Beer à partir de l'épaisseur du matériau hétérogène et de la simulation des chemins optiques.

Ces méthodes de lancer de rayons ont alimenté des études plus récentes, comme celles de Petrash *et. al.* [57] qui ont combiné une tomographie de céramiques poreuses réticulées (carbure de silice) avec une technique de lancer de rayons sous l'approximation de l'optique géométrique. Le coefficient d'extinction du milieu homogène a été prédit à partir des chemins parcourus par

les rayons, tandis que la fonction de phase a été calculée à partir de la distribution angulaire des rayons au sein du matériau. Parthasarathy *et. al.* [69] calculent les propriétés radiatives équivalentes d'une alumine poreuse à partir de la reconstruction de la structure 3D du milieu dont la morphologie est obtenue par tomographie par résonance magnétique. La phase solide du matériau est supposée opaque et l'espace interstitiel est considéré transparent. La dimension des hétérogénéités étant supérieure à la valeur de la longueur d'onde dans la gamme spectrale considérée, les lois de l'optique géométrique ont été utilisées. La connaissance des chemins parcourus permet grâce à la loi de Beer d'obtenir le coefficient d'extinction du milieu homogénéisé. Les travaux de Arambakam *et. al.* [70] ont porté sur la modélisation du transfert radiatif dans des matériaux à fibres de verre utilisés pour l'isolation. Leur modèle 3D permet de générer un matériau fibreux virtuel avec des propriétés bien définies (orientation, diamètre des fibres, etc.). Pour chacune des fibres, les propriétés radiatives sont calculées en utilisant la théorie de Mie puis, en supposant que les diffusions par chaque fibre sont indépendantes (milieu à forte porosité), la contribution totale de toutes les fibres est obtenue en sommant les contributions individuelles de chacune des fibres. Les propriétés radiatives calculées par la théorie de Mie sont ensuite injectées dans l'ETR qui est résolue en utilisant la Méthode des Ordonnées Discrètes (DOM). Randrianalisoa et Baillis [71] se sont également appuyés sur les techniques de lancer de rayons pour déterminer les propriétés radiatives d'un matériau poreux constitué de sphères contenues dans une matrice solide non-absorbante ou semi-transparente. Les coefficients d'absorption, de diffusion et la fonction de phase sont calculés à partir des chemins parcourus par les rayons et leur distribution angulaire dans le milieu. Ils montrent également que l'ETR du milieu homogène équivalent peut être utilisée avec les propriétés radiatives équivalentes pour modéliser le transfert radiatif dans les milieux contenant des sphères denses. Les études menées par Delmas *et. al.* [72] sur des céramiques de type zircone yttrée et aluminées, ont porté sur leur caractérisation à haute température. La connaissance de la structure (porosité, distribution et taille des pores) ainsi que de l'indice de réfraction complexe pour l'oxyde diélectrique prépondérant (porosité inférieure à 20%) leur a permis de déterminer les propriétés radiatives à partir de la théorie de Mie pour les échantillons obtenus par frittage (hétérogénéités sphériques), et à partir de la résolution des équations de Maxwell pour les échantillons obtenus par projection plasma (hétérogénéités de structure complexe). Ces propriétés radiatives prédites sont ensuite injectées dans l'ETR qui est résolue par la méthode des ordonnées discrètes.

L'approche prédictive permet d'étudier et de mieux comprendre l'influence de la morphologie du milieu hétérogène (taille et répartition des hétérogénéités) et des indices optiques sur les propriétés radiatives du milieu hétérogène, et donc sur son comportement radiatif. Cette approche est également une étape préliminaire à la conception de nouveaux matériaux dotés de propriétés radiatives spécifiques. Une autre approche basée sur l'identification expérimentale renseigne sur les propriétés radiatives du milieu hétérogène réel à partir de développements en métrologie radiative. L'identification peut également servir à vérifier la validité du choix du modèle de prédiction des propriétés radiatives et prend en compte l'éventuelle déformation de la structure sous contraintes thermiques.

3.2.2 Approche par identification expérimentale

L'identification des propriétés radiatives est une approche qui nécessite le choix :

1. d'un modèle direct de transferts radiatifs (ETR, approximation de la diffusion, etc.) qui définit un jeu de paramètres à identifier ;
2. d'une ou plusieurs grandeurs mesurées expérimentalement ;
3. d'une méthode inverse.

L'identification s'appuie sur des mesures spectrales de flux émis, réfléchis et/ou transmis selon la gamme de températures et de longueurs d'ondes considérées. Les propriétés à identifier peuvent être les coefficients d'absorption, de diffusion, la fonction de phase de l'ETR, ou encore les propriétés diélectriques (indices optiques). Dans tous les cas, l'identification est basée sur la minimisation des erreurs quadratiques entre les valeurs obtenues par le modèle radiatif (solutions de l'ETR par exemple) et les mesures expérimentales de la grandeur radiative choisie.

Boulet *et al.* [73] ont étudié des échantillons de Polyméthacrylate de méthyle (PMMA) à température ambiante. Leurs travaux ont permis d'identifier les indices optiques de PMMA qui se comporte comme un matériau transparent dans la gamme spectrale du visible et proche-infrarouge, et optiquement épais pour quelques bandes spectrales infrarouges. Les parties réelle (indice de réfraction) et imaginaire (indice d'extinction) de l'indice de réfraction complexe du matériau ont été obtenues en utilisant une technique d'inversion basée sur des mesures de transmittance et de réflectance à température ambiante. Lorsque la mesure de transmittance n'est pas exploitable (incertitude de mesure de 100%), l'indice de réfraction complexe est obtenu suite à l'identification des paramètres de la fonction diélectrique (modèle d'oscillateurs de Lorentz) à partir des mesures de réflectance seulement. De Sousa Meneses *et al.* [74] ont montré que le modèle de Drude-Lorentz ne permet pas de modéliser correctement la fonction diélectrique de monocristaux de silice et ont développé une fonction diélectrique basée sur des profils Gaussiens tout en respectant les relations de Kramers-Kronig. A température ambiante, l'écart entre des mesures de réflectivité de monocristaux de silice et la réflectivité théorique donnée par les lois de Fresnel a été réduit en utilisant une technique des moindres carrés afin d'obtenir le meilleur jeu de paramètres de la fonction diélectrique.

L'identification des propriétés radiatives peut aller jusqu'à la modélisation fine de la fonction diélectrique du matériau. Cette approche nécessite une connaissance fine de la structure du matériau et est particulièrement adaptée aux milieux homogènes constitués de corps purs comme les monocristaux. Pour s'affranchir des connaissances en physique de la matière nécessaires à la modélisation des fonctions diélectriques, l'approche qui s'appuie sur l'identification des propriétés radiatives du milieu homogène équivalent est plus explorée.

Les travaux de Baillis *et al.* [75] ont eu pour but d'identifier les propriétés radiatives spectrales (coefficients d'absorption et de diffusion, paramètre d'asymétrie de la fonction de phase de Henyey-Greenstein) de mousses de polyuréthane à partir de mesures de transmittance et de

réflectance à température ambiante pour une bande spectrale de $[2 \mu\text{m}; 15 \mu\text{m}]$. Le modèle direct repose sur l'utilisation de l'ETR résolue avec la Méthode des Ordonnées Discrètes. Lorsque des mesures spectrales directionnelles-hémisphériques sont utilisées, seuls les coefficients d'absorption et de diffusion peuvent être identifiés, mais la fonction de phase est supposée connue. Contrairement aux mesures hémisphériques, les mesures bi-directionnelles fournissent plus d'informations pour l'identification de la fonction de phase, surtout si le matériau caractérisé diffuse le rayonnement dans des directions privilégiées. La combinaison de deux types de mesures (directionnelles-hémisphériques et bi-directionnelles) fournit des informations complémentaires sur l'identification des propriétés radiatives à température ambiante. Tilioua *et. al.* [76] identifient les propriétés radiatives à température ambiante de matériaux d'isolation élaborés à partir de bouteilles en polyéthylène terephthalate (PET) recyclées en utilisant une méthode inverse basée sur des mesures spectrales de transmittance et de réflectance normales-hémisphériques ainsi que des mesures spectrales de transmittance normale-normale pour une bande spectrale de $[2 \mu\text{m}; 21 \mu\text{m}]$. Ces matériaux d'isolation sont composés de fibres cylindriques absorbantes, diffusantes et orientées de manière aléatoire dans le milieu. Le modèle direct est basé sur l'ETR dans un milieu homogène équivalent, résolue par la méthode des ordonnées discrètes. La minimisation des écarts quadratiques entre le modèle direct et les trois types de mesure, a permis d'identifier les coefficients d'absorption et de diffusion ainsi que le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase d'Henye-Greenstein. De Sousa Meneses *et. al.* [77] ont utilisé le modèle 2-flux développé par Dombrovsky *et. al.* [41] pour identifier le coefficient d'absorption et le coefficient de diffusion réduit d'une céramique de Nitrure de Bore pyrolytique à partir de mesures spectrales de transmittance et de réflectance normales-hémisphériques à température ambiante.

Les techniques expérimentales présentées ci-dessus étudient le comportement radiatif de matériaux à température ambiante. La mise en oeuvre expérimentale de mesures à température ambiante de transmittances et de réflectances bi-directionnelles ou directionnelles-hémisphériques s'avère plus aisée qu'en température. Leurs différentes combinaisons permettent d'identifier les propriétés d'absorption et de diffusion de matériaux semi-transparents. Cependant, contrairement aux mesures à température ambiante, l'émission propre de matériaux à haute température ne peut plus être négligée. On ne peut s'orienter vers des mesures de transmittance ou de réflectance puisqu'il est difficile de distinguer les flux radiatifs transmis et réfléchis du flux radiatif émis par l'échantillon. Une solution consiste à chauffer le matériau à partir d'une source externe puis de mesurer uniquement le flux émis par l'échantillon. Dans les paragraphes qui suivent, des exemples de caractérisation expérimentale du facteur d'émission (rapport de la luminance émise par un milieu à une température T sur la luminance de Planck à la même température T) de milieux semi-transparents à haute température seront brièvement présentés.

Les travaux de Dombrovsky *et. al.* [78] ont permis d'identifier le coefficient d'absorption d'oxyde d'hafnium stabilisé avec de l'oxyde de zirconium (YSZ) à partir d'une méthode d'identification basée sur des mesures d'émission jusqu'à 1700K (ramenées à un facteur d'émission en connaissant la température de surface) et à partir d'une solution semi-analytique développée dans de précédents travaux [42]. En négligeant la diffusion volumique, le coefficient d'absorp-

tion identifié dépend de la température. La comparaison des coefficients d'absorption identifiés et prédits par la théorie de Mie montre que le coefficient d'absorption identifié est surestimé lorsque la diffusion est négligée, même lorsque la porosité de l'échantillon est de l'ordre de 3%. Le Foll *et. al.* [35] ont étudié des céramiques fibreuses à base de silice utilisées pour des systèmes de protection thermique (TPS) pour l'aérospatial. Ces TPS sont soumis à des hauts niveaux de température. Pour évaluer la part du transfert radiatif dans le transfert de chaleur global (conduction-rayonnement), la connaissance des propriétés radiatives à haute température est nécessaire. La combinaison des mesures spectrométriques à haute température (mesures d'émission et de température au point de Christiansen) et d'une méthode Monte Carlo pour la résolution de l'ETR a permis de retrouver les facteurs d'émission pour des températures allant de 800 à 2000 K. En adoptant un modèle de fonction diélectrique, un algorithme génétique permet de minimiser les écarts entre les facteurs d'émission calculés et mesurés et d'identifier les paramètres de la fonction diélectrique. Les coefficients d'absorption et de diffusion sont ensuite déterminés à l'aide d'une technique d'homogénéisation basée sur la méthode de Mie pour des cylindres infinis [30]. Dans les travaux de Rozenbaum *et. al.* [36], une approche "hybride" qui combine identification expérimentale et prédiction a été développée pour déterminer les propriétés radiative d'une céramique de silice poreuse (contenant des bulles non-interconnectées) portée à 1200 K. La méthode consiste d'abord à imager l'échantillon poreux par tomographie à rayons X réalisée à température ambiante afin de connaître sa structure et la distribution de bulles. Les indices de réfraction complexes d'un cristal de silice (homogène et non poreux) ont ensuite été identifiés à partir de mesures d'émission à 1200 K. La connaissance des indices de réfraction de la matrice de silice et des bulles OH de la silice poreuse à 1200 K, ainsi que la connaissance de la structure de l'échantillon supposée inchangée avec la température ont permis l'application d'une méthode de lancer de rayons (optique géométrique) à l'échantillon numérique afin de simuler la transmittance et la réflectance normales-hémisphériques à 1200 K. Enfin, les coefficients d'absorption et de diffusion du milieu homogène équivalent ont été identifiés à partir des simulations de transmittance et de réflectance et du modèle à deux flux de Dombrovsky *et. al.* [41].

Conclusions du chapitre

L'ETR est un modèle radiatif qui, à partir de la connaissance des propriétés radiatives du milieu homogène équivalent (coefficient d'absorption, coefficient de diffusion, paramètres de la fonction de phase), permet d'estimer une luminance ou une densité de flux.

Pour déterminer ces propriétés, deux approches existent : une approche prédictive qui suppose la connaissance de la structure du milieu et des indices optiques de phases le constituant, et une approche par identification qui combine modèles et mesures. A haute température, il est courant de supposer que la structure et la distribution des hétérogénéités d'un matériau ne dépendent pas de la température. Cela revient à supposer que le matériau ne se déforme pas, ne s'oxyde

pas et n'est pas le siège de réactions thermo-chimiques lorsque sa température augmente. La tomographie d'un échantillon à température ambiante correspondrait à celle du même échantillon à des niveaux de température plus élevés. L'approche prédictive peut s'avérer erronée pour des applications à haute température puisqu'elle se base sur la structure du matériau hétérogène à température ambiante.

L'approche par identification sera préférée à l'approche prédictive dans le cadre de cette thèse. De plus, l'identification expérimentale permet d'accéder aux propriétés radiatives dans les conditions opératoires d'utilisation du matériau d'intérêt et éventuellement de mettre en évidence par l'expérience des phénomènes non prévisibles.

A température ambiante, l'identification des propriétés d'absorption et de diffusion est possible car la mise en oeuvre de mesures de transmittance et de réflectances directionnelles-hémisphériques et bi-directionnelles engendre des problèmes métrologiques moins nombreux qu'à haute température. Pour des applications à haute température, l'identification des propriétés optiques de cristaux purs non-diffusants (matériaux homogènes comme la silice, l'alumine, etc.) est basée sur une modélisation des fonctions diélectriques ; mais dès lors qu'on s'intéresse aux milieux hétérogènes, l'identification des propriétés radiatives du milieu homogène équivalent reste un verrou scientifique majeur et s'avère être une tâche délicate qui sera explorée au fur et à mesure de ce travail. A haute température, la principale question qui se pose est : comment bien identifier les coefficients d'absorption et de diffusion (et éventuellement la fonction de phase) ? Pour répondre à cette problématique, nous cherchons à développer dans ce manuscrit une méthodologie d'identification des propriétés radiatives en utilisant des modèles assez simples, sans avoir à utiliser des modèles fins d'interaction rayonnement-matière (équations de Maxwell, théorie de Mie, etc.). L'idée de la méthodologie d'identification est de garder une certaine généralité surtout si les matériaux hétérogènes d'intérêt ne sont pas constitués d'hétérogénéités sphériques ou cylindriques. La méthodologie doit pouvoir mieux baliser le problème inverse et savoir quels types de modèles et quelles mesures fournissent le plus d'informations pour l'identification des propriétés radiatives à haute température. La nouvelle méthodologie développée dans cette thèse repose sur des méthodes Monte Carlo Symbolique qui seront détaillées dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Méthodes Monte Carlo Symbolique

Dans le cadre de cette thèse, nous avons fait le choix de développer des méthodes d'identification basées sur les méthodes Monte Carlo pour diverses raisons. Premièrement, les méthodes Monte Carlo n'induisent pas de biais lors de l'estimation d'une grandeur radiative et fournissent un intervalle de confiance pour le résultat obtenu. De plus, ces méthodes sont connues pour être particulièrement adaptées pour simuler les transferts radiatifs dans des géométries complexes. En particulier, nous nous intéressons dans cette thèse au développement de méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS) et à leur utilisation dans le contexte de l'identification de paramètres. A la différence des algorithmes Monte Carlo standard ou classique (MCC), les algorithmes MCS utilisent des paramètres inconnus, dits symboliques et auxquels aucune valeur scalaire n'est affectée. Pour le cas de l'ETR, ces paramètres symboliques peuvent être la température, les coefficients d'absorption et/ou de diffusion ou le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase. Pour l'identification des propriétés radiatives de matériaux hétérogènes, les méthodes MCS constituent un outil d'analyse intéressant pour l'analyse de problèmes inverses [13–15, 18, 19] puisqu'un seul calcul permet d'estimer une grandeur (luminance, flux, etc.) dans l'espace des paramètres symboliques.

Ce chapitre dédié aux méthodes Monte Carlo Symbolique débutera par un bref rappel de définitions utiles en probabilités et en statistiques avant de présenter un algorithme MCC. Un accent particulier sera mis sur les algorithmes à collisions nulles [79–81] dont la compréhension est primordiale pour appréhender les méthodes MCS. Les différents développements MCS, les démonstrations associées et des exemples d'analyse de problèmes inverses seront présentés à la section 2 de ce chapitre. Enfin, une nouvelle méthode Symbolique basée sur les développements en séries de polynômes orthogonaux sera développée dans la section 3 de ce chapitre.

1 Introduction aux méthodes Monte Carlo

Introduites par Metropolis et Ulam [82] à la fin des années 1940, les méthodes Monte Carlo permettent de calculer des grandeurs intégrales de manière stochastique. Elles ont d'abord été utilisées dans la neutronique avant d'être généralisées à d'autres domaines tels que les transferts radiatifs [21]. Aujourd'hui, elles sont notamment développées et utilisées pour les transferts de chaleur couplés conduction-rayonnement [7, 83–85] et la synthèse d'image [86, 87].

1.1 Rappels de statistiques

Avant d'introduire les méthodes Monte Carlo, il convient de rappeler quelques éléments de statistiques et de probabilités :

- **Variable aléatoire** : une variable est aléatoire ou stochastique s'il n'est pas possible d'estimer à l'avance sa valeur. Seule l'expérience permet de connaître sa valeur. Une variable aléatoire est définie sur l'ensemble des éventualités. Il est possible de concevoir une variable aléatoire en associant un résultat à une éventualité (tirage à pile ou face, lancer de dés, etc.). Une fonction de variables aléatoires est également une variable aléatoire. Les variables aléatoires seront notées en majuscule dans le calcul intégral suivant ces définitions.
- **Echantillon (ou réalisation)** : il s'agit de la valeur que prend une variable aléatoire lors d'une expérience.
- **Probabilités, fonction densité de probabilités** : il est également possible de définir une variable aléatoire par sa loi de probabilité et son domaine de définition. Il s'agit d'un modèle probabiliste, positif et normalisé sur son ensemble de définition et qui caractérise le comportement de la variable aléatoire.

Lorsque la variable aléatoire Y est discrète, la loi de probabilité associée à chaque élément m de l'ensemble de N_{pop} éléments, une probabilité $P_Y(y_m)$ telle que :

$$\sum_{m=1}^{N_{\text{pop}}} P_Y(y_m) = 1$$

Lorsque la variable aléatoire X définie sur $[x_{\min}; x_{\max}]$ est continue, la loi de probabilité notée p_X est qualifiée de fonction densité de probabilité ("pdf" pour *probability density function*). La quantité $p_X dx$ correspond à la probabilité qu'un échantillon x_i de la variable aléatoire X soit compris dans l'intervalle dx autour de x . Cette fonction densité de probabilité est normée :

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) dx = 1$$

- **Fonction de répartition** : notée "cdf" pour *cumulative distribution function*, elle correspond à la probabilité notée $r(X)$ qu'une réalisation de la variable aléatoire continue X soit comprise entre x_{\min} et x . Dans le cas discret, elle correspond à la probabilité notée $R(Y)$ qu'une réalisation de la variable aléatoire discrète Y soit comprise entre y_1 et y_m :

$$r_X(x) = \int_{x_{\min}}^x p_X(x') dx'$$

$$R_Y(y_m) = \sum_{m'=1}^m P_Y(y_{m'})$$

- **Espérance** : elle correspond à la moyenne d'une variable aléatoire, pondérée par sa densité de probabilité. Elle représente la valeur moyenne que l'on pourrait atteindre d'une expérience de tirages aléatoires.

Lorsque la variable aléatoire est discrète et en reprenant les notations précédentes, l'es-

perance est donnée par :

$$E[Y] = \sum_{m=1}^{N_{\text{pop}}} P_Y(y_m) y_m$$

Lorsque la variable aléatoire est continue, l'espérance est définie par :

$$E[X] = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) x \, dx$$

Nous avons indiqué précédemment qu'une fonction f de variables aléatoires étant elle-même une variable aléatoire, il est possible d'écrire l'espérance d'une fonction :

$$E[f(X)] = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) f(x) \, dx$$

Si la fonction f dépend de n variables aléatoires, son espérance est donnée par :

$$E[f(X_1, \dots, X_n)] = \int_{x_{\min,1}}^{x_{\max,1}} p_{X_1}(x_1) \, dx_1 \dots \int_{x_{\min,n}}^{x_{\max,n}} p_{X_n}(x_n) \, dx_n f(x_1, \dots, x_n)$$

- **Variance** : la variance d'une population caractérise la dispersion de la distribution de la variable aléatoire considérée autour de son espérance.

Pour une variable aléatoire continue X , elle est définie par :

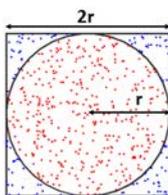
$$\begin{aligned} V(X) &= \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) [x - E[X]]^2 \, dx \\ &= E[(X - E[X])^2] \\ &= E[X^2] - (E[X])^2 \end{aligned}$$

La variance d'une variable aléatoire discrète Y est donnée par :

$$\begin{aligned} V(Y) &= \sum_{m=1}^{N_{\text{pop}}} P_Y(y_m) [y_m - E[Y]]^2 \\ &= E[(Y - E[Y])^2] \\ &= E[Y^2] - (E[Y])^2 \end{aligned}$$

Les méthodes Monte Carlo reposent sur des fondements mathématiques complexes, mais il est possible d'avoir un intuitif sur son fonctionnement comme l'illustre l'exemple académique du calcul approché de π .

NOTE : Calcul approché de π



Soit un cercle de rayon r placé dans un carré de côté $2r$, à la manière d'un seau d'eau placé sur un sol. La surface du cercle est πr^2 tandis que la surface du carré est $(2r)^2$.

Considérons des gouttes d'eau qui tombent de manière aléatoire et uniforme soit dans le cercle, soit à l'extérieur du seau (tout en étant à l'intérieur de la surface carrée).

L'approximation de la probabilité qu'une goutte soit à l'intérieur du cercle est :

$$\tilde{P} = \frac{\pi r^2}{(2r)^2} = \frac{\pi}{4}$$

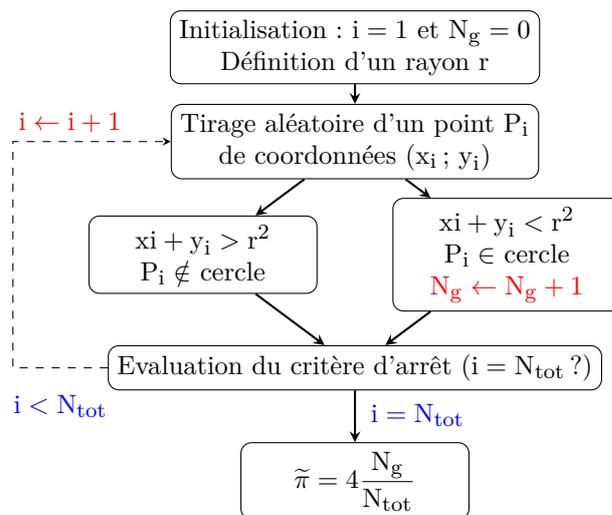
Pour chaque goutte lancée (indice i), nous testons son appartenance au disque de rayon r . La répétition de l'expérience donne un total de N_g gouttes tombées dans le cercle pour N_{tot} gouttes lancées au total. La probabilité qu'une goutte soit tombée dans le cercle est :

$$P \simeq \frac{N_g}{N_{tot}}$$

Une approximation de π est donc donnée par :

$$\pi \simeq \tilde{\pi} = 4 \frac{N_g}{N_{tot}}$$

Une représentation schématique de l'algorithme Monte Carlo pour le calcul approché de π est donnée dans la figure 2.1. Le tableau 2.1 donne des approximations de π pour différentes valeurs de N_{tot} . Plus le nombre d'échantillonnages de Monte Carlo est grand, plus l'erreur d'approximation est réduite. Cet exemple illustre la loi des grands nombres sur laquelle reposent les méthodes Monte Carlo.



N_{tot}	$\tilde{\pi}$	Ecart (%)
10^1	3.200	1.9
10^2	3.120	0.7
10^3	3.152	0.3
10^4	3.167	0.8
10^5	3.139	0.09
10^6	3.142	0.01

Tableau 2.1 – Ecart relatif entre π et son estimation par Monte Carlo.

Figure 2.1 – algorithme Monte Carlo appliqué au calcul approché de π .

Nous voyons à travers l'exemple simple du calcul approché de π que, dès lors qu'une observable peut être formulée sous la forme d'une espérance, celui-ci peut être résolu par une méthode Monte Carlo. Cette vision statistique sera ensuite appliquée au calcul d'intégrales.

1.2 Calcul approché d'intégrales

Les méthodes Monte Carlo reposent sur la loi des grands nombres selon laquelle la moyenne arithmétique d'un nombre important d'échantillons indépendants x_i d'une variable aléatoire X ,

converge vers l'espérance de cette variable aléatoire :

$$\lim_{N_{mc} \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=0}^{N_{mc}} x_i \right) = E(X) \quad (2.1)$$

Considérons maintenant l'intégrale d'une fonction f définie sur $[x_{\min}; x_{\max}]$.

$$I = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x) dx$$

Les méthodes Monte Carlo ne calculant que des espérances, nous devons nous ramener au formalisme exposé dans la sous-section d'introduction aux variables statistiques. Pour cela, introduisons une fonction densité de probabilité p_X positive et normalisée sur $[x_{\min}; x_{\max}]$:

$$I = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p_X(x) \frac{f(x)}{p_X(x)} dx \quad (2.2)$$

Nous voyons apparaître la définition de l'espérance d'une variable aléatoire :

$$I = E \left[\frac{f(X)}{p_X(X)} \right] \quad (2.3)$$

Nous allons pouvoir approximer I grâce à un algorithme qui consiste à générer un grand nombre N_{mc} d'échantillons x_i de la variable aléatoire X selon la fonction densité de probabilité $p_X(x)$, et à calculer les poids de Monte Carlo $w_i = f(x_i)/p_X(x_i)$ correspondants. Une estimation \tilde{I} de l'intégrale I est donnée par :

$$I \simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \frac{f(x_i)}{p_X(x_i)} \quad (2.4)$$

En plus de pouvoir estimer une grandeur intégrale, les méthodes Monte Carlo permettent d'évaluer l'incertitude de cette estimation. Le théorème de la limite centrale énonce que toute somme de variables aléatoires identiquement distribuées et indépendantes tend vers une variable aléatoire distribuée selon une loi de Gauss. Ceci implique que la distribution de l'estimation d'une grandeur obtenue par un algorithme Monte Carlo tend vers une distribution Gaussienne. Son erreur statistique peut donc être représentée par l'écart-type de la somme de variables aléatoires identiquement distribuées et indépendantes. Si on reprend l'estimation \tilde{I} de l'intégrale I , l'écart-type de \tilde{I} est estimé par :

$$s(\tilde{I}) \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}} \quad (2.5)$$

L'écart-type (ou erreur d'estimation statistique de Monte Carlo) permet de définir, à partir de la loi normale, un intervalle de confiance $[\tilde{I} - \alpha s(\tilde{I}); \tilde{I} + \alpha s(\tilde{I})]$ autour de l'estimation \tilde{I} de I (α est un réel positif) dans lequel il y a une certaine probabilité que la grandeur d'intérêt I y soit incluse (indice de confiance). Le tableau 2.2 illustre les indices de confiance associés aux différentes valeurs de α . Le lecteur se référera à l'ouvrage de Dunn et Shultis [17] pour des démonstrations plus détaillées.

Intervalle de confiance	Indice de confiance (%)
$[\tilde{I} - 1s(\tilde{I}); \tilde{I} + 1s(\tilde{I})]$	68,27
$[\tilde{I} - 2s(\tilde{I}); \tilde{I} + 2s(\tilde{I})]$	95,45
$[\tilde{I} - 3s(\tilde{I}); \tilde{I} + 3s(\tilde{I})]$	99,73
$[\tilde{I} - 5s(\tilde{I}); \tilde{I} + 5s(\tilde{I})]$	99,99994

Tableau 2.2 – Intervalles de confiance de la loi normale.

NOTE : Calcul approché d'une intégrale

Soit l'intégrale de Dirichlet définie par :

$$I = \int_0^{\pi/2} \ln(\sin(x)) dx$$

et qui admet comme solution analytique $-\pi \frac{\ln(2)}{2} \simeq -1,089$. En adoptant le formalisme adopté précédemment, introduisons une fonction densité de probabilités $p_X(x)$:

$$I = \int_0^{\pi/2} p_X(x) \frac{\ln(\sin(x))}{p_X(x)} dx$$

avec, par exemple, $p_X(x) = \frac{1}{\pi/2}$ (fonction densité de probabilité uniforme sur $[0; \frac{\pi}{2}]$).

Une approximation de I est :

$$\tilde{I} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \frac{\pi}{2} \ln(\sin(x_i))$$

où x_i est un tiré aléatoirement selon p_X . Pour N_{mc} échantillonnages, l'algorithme Monte Carlo correspondant au calcul approché de l'intégrale de Dirichlet est schématisé dans la figure 2.2.

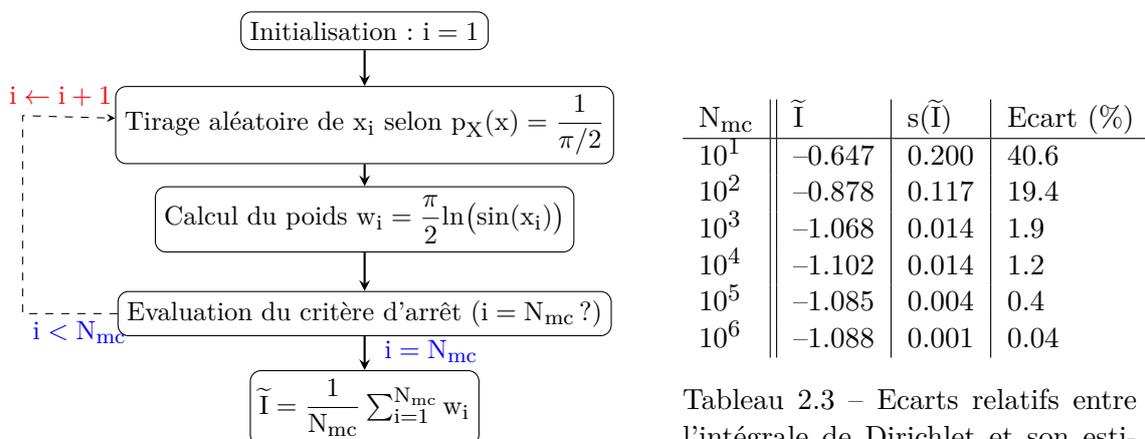


Tableau 2.3 – Ecart relatif entre l'intégrale de Dirichlet et son estimation par Monte Carlo.

Figure 2.2 – algorithme Monte Carlo appliqué au calcul approché de l'intégrale de Dirichlet.

1.3 Algorithme Monte Carlo classique pour la résolution de l'ETR

1.3.1 Cas d'étude

Avant de détailler le fonctionnement des algorithmes Monte Carlo (classique et symbolique) pour la résolution de l'ETR, commençons d'abord par définir un cas d'étude qui servira de base pour les développements qui vont suivre. Pour ce cas, nous exprimons l'ETR sous forme intégrale que nous cherchons ensuite à résoudre par une méthode Monte Carlo.

Considérons pour ce cas d'étude un milieu semi-transparent solide, émettant, absorbant, diffusant, anisotherme, homogène, de propriétés radiatives uniformes. Le milieu est placé dans un environnement "froid" (aucune luminance incidente sur le milieu). Une illustration du milieu considéré est donnée dans la figure 2.3.

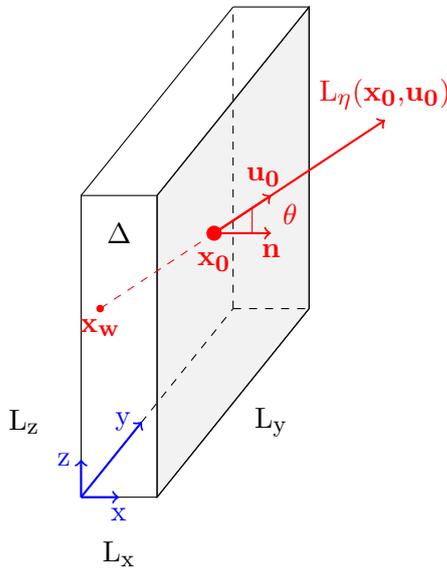


Figure 2.3 – Schéma du cas test. La luminance est calculée au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 correspondant au centre de la surface $x = L_x$ ayant \mathbf{n} comme normale.

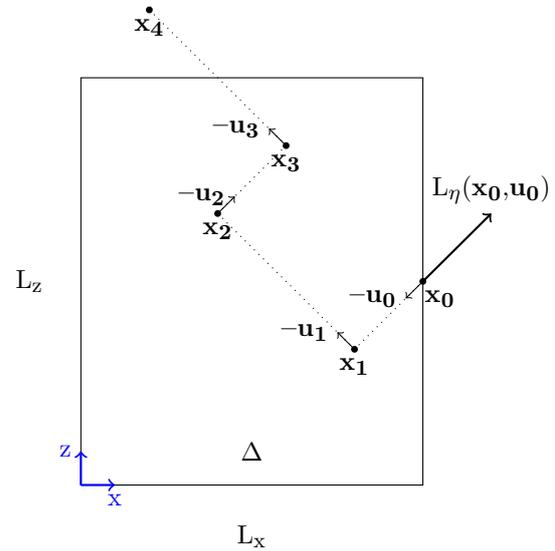


Figure 2.4 – Notations utilisées pour l'algorithme Monte Carlo (vue 2D).

Soit Δ le volume semi-transparent de dimension $L_x \times L_y \times L_z$. Nous nous intéressons ici à la résolution de l'ETR sous sa forme intégrale par la méthode Monte Carlo, afin d'obtenir la luminance sortante du milieu considéré au point d'abscisse \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 . Nous notons \mathbf{x}_w le point appartenant à une surface de bord et partant de \mathbf{x}_0 le long de la direction $-\mathbf{u}_0$. D'après l'équation 1.24 démontrée au chapitre 1, la luminance partante du point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 s'écrit :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^{|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0|} \kappa_\eta B_\eta(T(\mathbf{x})) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0) dl + \int_0^{|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0|} \sigma_\eta \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}', \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') du' \right) \Upsilon_{\mathbf{u}_0}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0) dl \quad (2.6)$$

où Υ est la transmittance dont la définition est rappelée ci-dessous :

$$\Upsilon_{\mathbf{u}'_{1,2}}(\mathbf{x}'_2 \rightarrow \mathbf{x}'_1) = \exp \left(\int_0^{\|\mathbf{x}'_2 - \mathbf{x}'_1\|} -\beta_\eta(\mathbf{x}') dl' \right)$$

Pour un milieu homogène de propriétés radiatives uniformes, la transmittance s'écrit de manière générale :

$$\Upsilon_{\mathbf{u}'_{1,2}}(\mathbf{x}'_1 \rightarrow \mathbf{x}'_2) = \exp \left(\int_0^{\|\mathbf{x}'_1 - \mathbf{x}'_2\|} -\beta_\eta dl' \right) = \exp \left(-\beta_\eta \|\mathbf{x}'_2 - \mathbf{x}'_1\| \right) \quad (2.7)$$

Avec cette définition de la transmittance, la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^{\|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|} \kappa_\eta B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) \exp(-\beta_\eta \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|) dl_1 \\ &+ \int_0^{\|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|} \sigma_\eta \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right) \exp(-\beta_\eta \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|) dl_1 \end{aligned} \quad (2.8)$$

où \mathbf{x}_1 est une position comprise entre \mathbf{x}_0 et \mathbf{x}_w et $l_1 = \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|$. L'étape suivante consiste à faire apparaître une fonction densité de probabilité afin d'appliquer un algorithme Monte Carlo pour le calcul intégral. Premièrement, l'intégrale de 0 à $\|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|$ peut être remplacée par une intégrale sur \mathbb{R}^+ par l'utilisation d'une fonction notée H équivalente à la fonction Heaviside :

$$\int_0^{\|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|} \exp(-\beta_\eta l_1) dl_1 = \int_0^\infty \exp(-\beta_\eta l_1) dl_1 H(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|) \quad (2.9)$$

La fonction $H(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|)$ est nulle si la condition $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|$ n'est pas respecté, ou égale à 1 si la condition est vérifiée. Autrement dit, si $\mathbf{x}_1 \notin \Delta$, cette fonction est nulle :

$$H(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| < \|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_0\|) \equiv H(\mathbf{x}_1 \in \Delta)$$

Avec cette nouvelle expression, la luminance écrite sous sa forme intégrale devient :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \int_0^\infty \kappa_\eta B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) \exp(-\beta_\eta l_1) H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) dl_1 \\ &+ \int_0^\infty \sigma_\eta \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right) \exp(-\beta_\eta l_1) H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) dl_1 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Multiplions et divisons à présent le terme de droite par le coefficient d'extinction β_η :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &= \frac{\kappa_\eta}{\beta_\eta} \int_0^\infty H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) dl_1 \\ &+ \frac{\sigma_\eta}{\beta_\eta} \int_0^\infty H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1) \left(\int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0, s) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right) dl_1 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Nous voyons ainsi apparaître la définition d'une fonction densité de probabilité :

$$p_L(l) = \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l) \quad \text{car} \quad \int_0^\infty \beta_\eta \exp(-\beta_\eta x) = 1$$

Cette fonction densité de probabilité est basée sur la loi de Beer. L'inversion de sa cumulée permet de générer de manière statistique des longueurs d'extinction.

Rappelons la définition de l'albédo de diffusion : $\omega_\eta = \frac{\sigma_\eta}{\beta_\eta}$. L'ETR sous sa forme intégrale pour le cas étudié ici devient :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left((1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \omega_\eta \int_{4\pi} P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right) \quad (2.12)$$

Nous avons réussi à écrire la grandeur radiative d'intérêt sous forme intégrale en faisant apparaître une fonction densité de probabilité. Elle correspond alors à l'espérance d'une variable aléatoire que nous allons échantillonner par un algorithme Monte Carlo.

Cet algorithme Monte Carlo consiste à reconstruire des trajets optiques en sens inverse depuis la position \mathbf{x}_0 et la direction \mathbf{u}_0 jusqu'à soit une position et une direction d'émission, soit une position et une direction d'incidence dans le matériau considéré. Ces algorithmes sont appelés *reverse* ou *backwards* Monte Carlo.

Dans tous les algorithmes détaillés dans ce chapitre, nous désignons par l'indice i le i -ème échantillonnage. Chaque i -ème échantillonnage débute à la position \mathbf{x}_0 . Une longueur d'extinction $l_{1,i}$ est ensuite générée aléatoirement selon la fonction densité de probabilité basée sur la loi de Beer $\beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1)$. La longueur d'extinction $l_{1,i}$ permet d'obtenir une nouvelle position $\mathbf{x}_{1,i} = \mathbf{x}_0 - l_{1,i} \mathbf{u}_0$. Si la position $\mathbf{x}_{1,i}$ est à l'extérieur du domaine Δ , le poids de Monte Carlo retenu est égal à 0 car aucune luminance n'est incidente sur le milieu d'étude. Si la position $\mathbf{x}_{1,i}$ se trouve à l'intérieur du domaine Δ , deux approches peuvent être mises en oeuvre pour poursuivre l'algorithme et seront détaillées dans les paragraphes qui suivent. Ces approches sont connues sous les termes de *collision method* et de *path length* [88] et nous les désignerons respectivement par l'approche standard et l'approche *energy partitioning*.

1.3.2 Approche standard

La mise en oeuvre d'un algorithme Monte Carlo pour la résolution de l'ETR (équation 2.12) par une approche standard consiste à considérer les albédos de diffusion ω_η et d'absorption $1 - \omega_\eta$ comme des probabilités discrètes. A la position $\mathbf{x}_{1,i}$, il faut tester aléatoirement le type de collision. Pour cela, un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 est uniformément généré puis comparé à ω_η . Si ce nombre est inférieur à $1 - \omega_\eta$, alors une émission a eu lieu, le poids de Monte Carlo retenu correspond à la luminance de Planck à la position $\mathbf{x}_{1,i}$ et le i -ème échantillonnage s'arrête. En revanche, si le nombre aléatoire est supérieur à $1 - \omega_\eta$, alors une diffusion a lieu. Une nouvelle direction $\mathbf{u}_{1,i}$ est générée selon la fonction de phase $P_{\text{sca}, \eta}$ qui, pour rappel, est une fonction densité de probabilité. L'algorithme se poursuit en générant aléatoirement une longueur d'extinction $l_{2,i}$ selon la loi de Beer, puis une position d'émission $\mathbf{x}_{2,i} = \mathbf{x}_{1,i} - l_{2,i} \mathbf{u}_{1,i}$. Le i -ème échantillonnage s'arrête lorsque la position $\mathbf{x}_{N_{\text{sca}}+1,i}$ est en dehors du milieu Δ ou lorsqu'il y a eu émission à la position $\mathbf{x}_{N_{\text{sca}}+1,i}$ où N_{sca} est le nombre de diffusions qu'il y a eu lors du i -ème échantillonnage. L'algorithme Monte Carlo correspondant à l'approche standard est résumé sur

la figure 2.5.

En connaissant le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion, le champ de température et la fonction de phase, la luminance sortante du point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 est estimée en moyennant les poids de Monte Carlo suivants :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i \quad \text{avec} \quad w_i = \begin{cases} B_\eta(T(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}}+1,i})) & \text{si } \mathbf{x}_{N_{\text{sca}}+1,i} \in \Delta \\ 0 & \text{si } \mathbf{x}_{N_{\text{sca}}+1,i} \notin \Delta \end{cases} \quad (2.13)$$

$$s(\tilde{I}) \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{\text{mc}} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}}$$

où $\mathbf{x}_{N_{\text{sca}}+1,i}$ est la position d'émission obtenue lors du i -ème échantillonnage après N_{sca} diffusions.

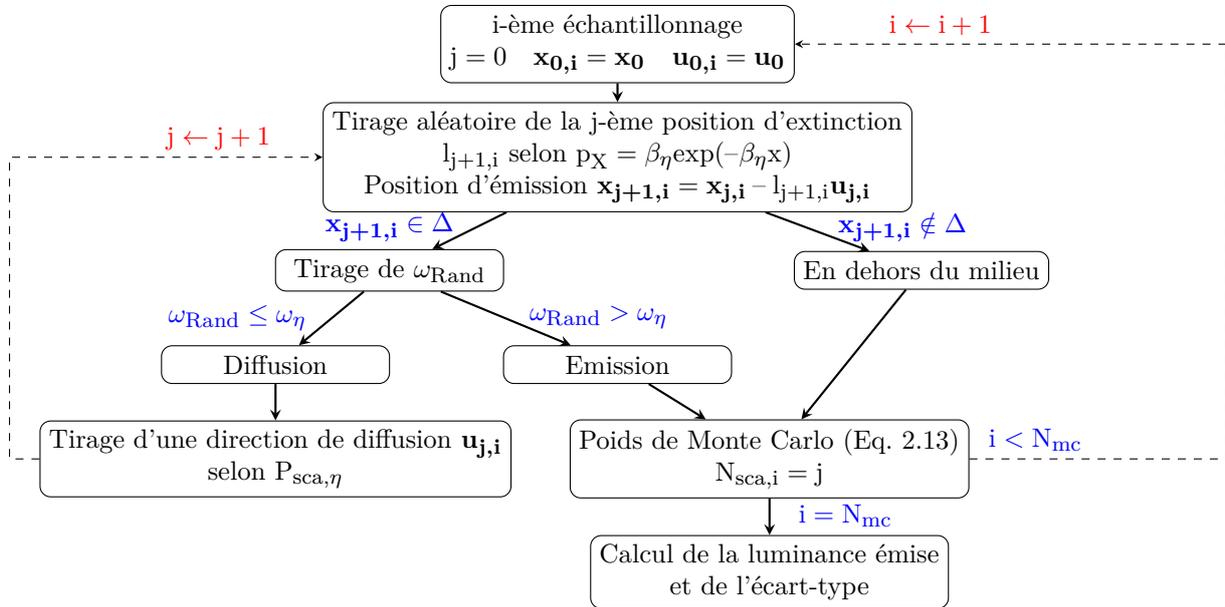


Figure 2.5 – Algorithme MCC correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant et diffusant à haute température". Approche standard. Toutes les propriétés radiatives sont connues.

1.3.3 Approche par *Energy partitioning*

Nous venons de voir que toutes les contributions au poids de Monte Carlo pour l'estimation de la luminance sortante d'un milieu absorbant et diffusant correspondent uniquement aux événements d'émission. Les différents tests statistiques sont réalisées grâce à l'albédo d'absorption $(1 - \omega_\eta)$ et à l'albédo de diffusion (ω_η) qui constituent une probabilité discrète.

Une seconde manière de procéder consiste à ne pas considérer les rapports ω_η et $1 - \omega_\eta$ comme des probabilités, mais à les traiter de manière déterministe. A chaque diffusion, la contribution liée à l'émission est toujours prise en compte. En d'autres termes, pour le i -ème échantillonnage, à la position $\mathbf{x}_{j,i}$, nous ne testons plus aléatoirement s'il y a une émission ou une diffusion, mais

l'émission et la diffusion sont simultanément prises en compte. Ainsi, par opposition à l'approche standard qui consiste à suivre un chemin optique jusqu'à sa position d'émission, l'approche dite *energy partitioning* [80, 81, 89] consiste à prendre en compte l'émission de façon progressive le long du chemin optique.

Après avoir généré la première position d'émission $\mathbf{x}_{1,i}$, comme nous ne testons plus de manière statistique si une émission ou diffusion a eu lieu, la contribution de chaque évènement est incluse dans le poids avec un coefficient multiplicatif : $1 - \omega_\eta$ pour l'émission et ω_η pour la diffusion. Le poids de Monte Carlo est implémenté en prenant en compte la fraction de rayonnement émis :

$$w_i \leftarrow (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i}))$$

En $\mathbf{x}_{1,i}$, le chemin optique est toujours dans le milieu Δ et le poids est multiplié par ω_η . Une nouvelle direction de diffusion $\mathbf{u}_{1,i}$ est générée selon la fonction de phase. Le libre parcours poursuit son chemin en générant une nouvelle position d'émission selon la loi de Beer, puis le poids de Monte Carlo est mis à jour :

$$w_i \leftarrow (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i})) + \omega_\eta \times (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{2,i}))$$

Le poids se met à jour continuellement jusqu'à ce que le chemin optique quitte le milieu Δ . De manière générale, pour le i -ème échantillonnage, le poids de Monte Carlo s'écrit de manière récursive :

$$\begin{aligned} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) &= (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i})) + \omega_\eta w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{u}_{1,i})) \\ w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{u}_{1,i})) &= (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{2,i})) + \omega_\eta w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{2,i}, \mathbf{u}_{2,i})) \\ &\vdots \\ w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}}-1,i}, \mathbf{u}_{N_{\text{sca}}-1,i})) &= (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}},i})) + \omega_\eta \times 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

avec $N_{\text{sca},i}$ le nombre de diffusions qu'il y a eu le long du i -ème échantillonnage. La forme récursive du poids de Monte Carlo fait apparaître un coefficient multiplicatif constant qui vaut ω_η . Le poids de Monte Carlo peut se réécrire sous la forme générale suivante :

$$w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) = \sum_{j=1}^{N_{\text{sca},i}} \left\{ (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j,i})) \omega_\eta^{j-1} \right\} \quad (2.15)$$

La luminance sortante est approximée par l'espérance des poids de Monte Carlo :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \left\{ \sum_{j=1}^{N_{\text{sca},i}} (1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j,i})) \omega_\eta^{j-1} \right\} \\ s(\tilde{I}) &\simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{\text{mc}} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}} \end{aligned} \quad (2.16)$$

L'algorithme Monte Carlo correspondant à l'approche *energy partitioning* est résumé dans la figure 2.6.

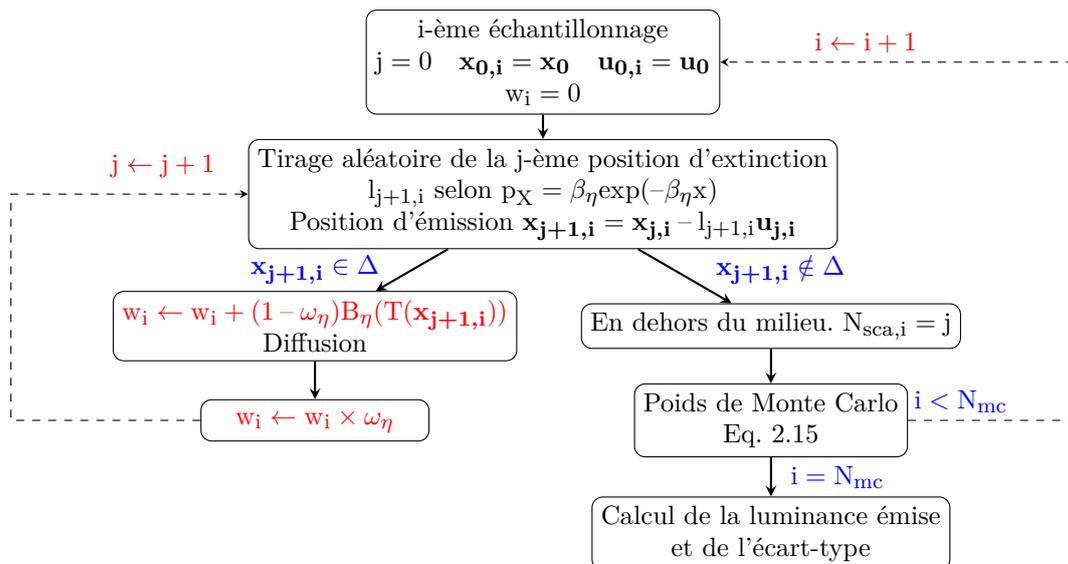


Figure 2.6 – Algorithme MCC correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant et diffusant à haute température". Approche *energy partitioning*. Toutes les propriétés radiatives sont connues.

La résolution de l'ETR par une méthode MCC, que ce soit en utilisant l'approche standard ou l'approche *energy partitioning*, est aisée du moment que le champ de température et les propriétés radiatives (coefficients d'absorption et de diffusion, fonction de phase) sont connus. Dans une démarche d'inversion, le champ de température et/ou les propriétés radiatives peuvent être inconnus. Au lieu de leur attribuer une valeur à chaque simulation MCC, les méthodes symboliques (MCS) vont nous permettre de ne réaliser qu'une seule et unique simulation Monte Carlo tout en conservant certains paramètres comme sous forme symbolique, (comme T , κ et σ).

Avant de décrire le fonctionnement des méthodes MCS dans le cas de certaines grandeurs comme la température, les coefficients d'absorption et de diffusion, et le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase, faisons d'abord un point sur les algorithmes à collisions nulles dans la sous-section qui suit.

1.4 Algorithmes à collisions nulles (ACN)

Comme nous le verrons dans la section suivante sur les méthodes Monte Carlo Symbolique, les algorithmes à collisions nulles sont essentiels si nous souhaitons conserver le coefficient d'absorption κ_η et/ou le coefficient de diffusion σ_η sous forme symbolique afin d'exprimer une grandeur radiative en fonction de ces propriétés radiatives.

Toutes les explications qui suivent sont détaillées dans le manuscrit de thèse de Galtier [81] et dans les publications [79, 80]. Loin de faire une description détaillée des Algorithmes à Collisions Nulles (ACN), nous introduisons ici les enjeux liés à l'utilisation des ACN dans le cas d'un

milieu hétérogène (coefficient d'extinction non uniforme).

Nous venons de voir dans la sous-section précédente que, si les propriétés radiatives sont uniformes et connues, alors l'échantillonnage des libres parcours s'effectue selon la loi de Beer $p_X(x) = \beta_\eta \exp(-\beta_\eta x)$. Cela revient à générer des positions d'extinction en inversant la cumulée de la fonction densité de probabilité. Cependant, dans le cas où les propriétés radiatives du milieu considéré sont inconnues ou ne sont pas uniformes (cas d'un milieu hétérogène), alors l'inversion de la cumulée de la loi de Beer peut s'avérer être une tâche délicate. L'échantillonnage des libres parcours, nécessaire pour les simulations de Monte Carlo, devient difficile.

Pour s'affranchir de cette difficulté, deux approches peuvent être mises en oeuvre [81] :

- **Discrétisation du milieu hétérogène** : la plus connue d'entre elles est la discrétisation du milieu d'intérêt. Les propriétés radiatives sont supposées uniformes à l'intérieur de chaque maille. Les propriétés radiatives étant constantes par morceaux, il est alors possible d'échantillonner les libres parcours d'extinction. Néanmoins, la discrétisation du milieu modifie le modèle radiatif et les résultats des simulations dépendent fortement du choix de maillage.
- **Introduction de probabilités arbitraires** : il est possible d'introduire une fonction densité de probabilité arbitraire \tilde{p}_L dans la formulation intégrale de l'ETR pour échantillonner les libres parcours. Il reste tout de même à calculer l'épaisseur optique dans le poids de Monte Carlo (le problème a été déplacé de l'échantillonnage du libre parcours au calcul du poids de Monte Carlo). Cette manoeuvre s'avère être délicate à cause de la **non-linéarité** de la fonction exponentielle (loi de Beer-Lambert) dans la formulation intégrale de l'ETR [90].

Les approches proposées ci-dessus pour s'affranchir de la difficulté liée à la non-linéarité de l'exponentielle sont coûteuses en temps de calcul et imprécises. C'est la raison pour laquelle une troisième approche a été approfondie dans les travaux de thèse de Galtier [81]. Il s'agit des **Algorithmes à Collision Nulles** (ACN) qui consistent à reformuler la version intégrale des équations de transport. Ils sont connus depuis les années 1960 dans la neutronique et la physique du plasma. Dans sa thèse, Galtier [81] a étendue l'approche aux transferts radiatifs. Les ACN ont ensuite été utilisés dans d'autres disciplines comme la synthèse d'image [86, 87], et peuvent être considérés comme une technique algorithmique/numérique permettant de calculer des grandeurs liées au transport.

Le paragraphe qui suit expose brièvement la méthodologie utilisée dans le cadre d'un algorithme à collisions nulles. Les travaux de Galtier *et. al.* [79–81, 91] détaillent l'utilisation des algorithmes à collisions nulles pour la résolution de l'ETR. L'idée de base des ACN est d'introduire dans le problème radiatif des collisionneurs supplémentaires en quantité ajustable, qui génèrent des collisions sans effet sur le transport (d'où le terme "collisions nulles"). Ce champ positif de collisions nulles noté γ_η ajouté au champ d'extinction β_η permet de rendre le nou-

veau champ d'extinction global $\widehat{\beta}_\eta$ uniforme (voir figure 2.7) pour chacun des nombres d'ondes considérées :

$$\kappa_\eta(\mathbf{x}) + \sigma_\eta(\mathbf{x}) + \gamma_\eta(\mathbf{x}) = \widehat{\beta}_\eta = \text{cste} \quad \forall \mathbf{x} \quad (2.17)$$

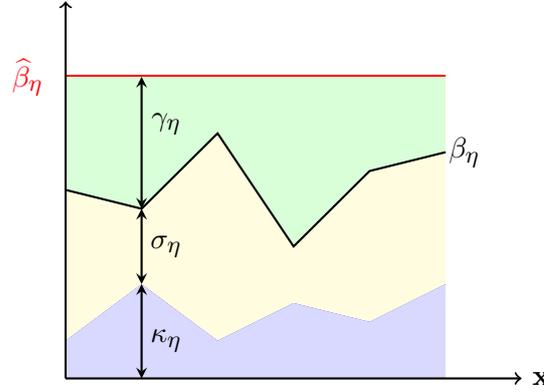


Figure 2.7 – Ajout d'un champ de coefficient de collision nulle γ_η pour rendre le champ d'extinction global $\widehat{\beta}_\eta$ uniforme.

L'introduction des collisions nulles permet d'écrire l'ETR sous la forme locale suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \nabla L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = & -\widehat{\beta}_\eta L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \gamma_\eta(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \kappa_\eta(\mathbf{x}) B_\eta(T(\mathbf{x})) \\ & + \sigma_\eta(\mathbf{x}) \int_{4\pi} P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}', \mathbf{u}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \end{aligned} \quad (2.18)$$

Dans l'équation 2.18, les collisions nulles ne modifient pas la formulation différentielle de l'ETR et n'introduisent aucun biais (addition et soustraction du terme $\gamma(\mathbf{x})L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$). Tout l'intérêt de cette méthode réside dans le calcul intégral et dans l'échantillonnage des chemins optiques.

Une manière de visualiser les collisions nulles serait de les assimiler à des événements de diffusion vers l'avant (aucun changement de direction n'a lieu après une collision nulle), dont la fonction de phase est une fonction de Dirac notée δ :

$$\gamma_\eta(\mathbf{x}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \gamma_\eta(\mathbf{x}) \int_{4\pi} \delta(\mathbf{u}' - \mathbf{u}) L_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{u}') d\mathbf{u}' \quad (2.19)$$

L'ajout de collisions fictives ne joue aucun rôle dans la physique du transport. Au lieu de définir un coefficient de collision nulle γ_η , il est commun [13–15, 18, 19] de définir un coefficient d'extinction global $\widehat{\beta}_\eta$, majorant de $\kappa_\eta + \sigma_\eta$, et de déduire le coefficient de collision nulle par soustraction :

$$\gamma_\eta(\mathbf{x}) = \widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta(\mathbf{x}) - \sigma_\eta(\mathbf{x}) \quad (2.20)$$

Reprenons le cas d'étude décrit dans la sous-section 1.3.1. Sans collisions nulles, la luminance partante du point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 pour un milieu homogène, absorbant, émettant,

diffusant et anisotherme, donnée dans l'équation 2.12, est rappelée ici :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left((1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \omega_\eta \int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right)$$

En introduisant les collisions nulles dans la formulation intégrale de la luminance sortante, celle-ci devient :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left(\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0) \right) \quad (2.21)$$

où $\widehat{\beta}_\eta$ est le coefficient d'extinction global qui inclut les collisions nulles. La formulation intégrale de l'ETR donnée par l'équation 2.21 ressemble à la formulation sans collisions nulles donnée par l'équation 2.12. La seule différence algorithmique consiste en la présence du terme de collisions nulles qui correspondent à des événements de diffusion vers l'avant. La résolution de cette intégrale par une méthode Monte Carlo classique peut se faire par une approche standard ou une approche *energy partitioning*.

1.4.1 Approche standard

De la même manière que pour l'algorithme Monte Carlo sans collisions nulles, l'approche standard considère les rapports $\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$, $\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ et $\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ comme des probabilités discrètes d'émission, de diffusion et de collision nulle.

Pour le i -ème échantillonnage, la génération des libres parcours d'extinction débute à la position \mathbf{x}_0 . Une longueur d'extinction $l_{1,i}$ est générée selon la loi de Beer $\widehat{p}_L(l) = \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l)$. Cette longueur d'extinction permet d'obtenir une nouvelle position $\mathbf{x}_{1,i} = \mathbf{x}_0 - l_{1,i} \mathbf{u}_0$. Si la position $\mathbf{x}_{1,i}$ est dans le milieu Δ , il faut tester aléatoirement le type de collision. Ce test est réalisé grâce aux probabilités $\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ pour l'émission, $\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ pour la diffusion et $\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ pour les collisions nulles. Pour cela, un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 est uniformément généré puis comparé à $\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ et $\frac{\kappa_\eta + \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$.

- Si ce nombre est inférieur à $\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$, alors une émission a eu lieu et l'algorithme s'arrête. Le poids de Monte Carlo retenu correspond à la luminance de Planck à la position $\mathbf{x}_{1,i}$ et le i -ème échantillonnage s'arrête.
- Si le nombre aléatoire est compris entre $\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ et $\frac{\kappa_\eta + \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$, alors une diffusion a lieu. Une nouvelle direction $\mathbf{u}_{1,i}$ est générée selon la fonction de phase $P_{\text{sca},\eta}$. L'algorithme se poursuit en générant aléatoirement une longueur d'extinction $l_{2,i}$ selon la loi de Beer, puis une position d'émission $\mathbf{x}_{2,i} = \mathbf{x}_{1,i} - l_{2,i} \mathbf{u}_{1,i}$.

- Enfin, si ce nombre est supérieur à $\frac{\kappa_\eta + \sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$, alors une collision nulle a lieu. L'algorithme se poursuit en générant aléatoirement une longueur d'extinction $l_{2,i}$ selon la loi de Beer, puis une position d'émission $\mathbf{x}_{2,i} = \mathbf{x}_{1,i} - l_{2,i}\mathbf{u}_{1,i}$ avec $\mathbf{u}_{1,i} = \mathbf{u}_0$.

Le i -ème échantillonnage s'arrête lorsque la position $\mathbf{x}_{N_{\text{tot}}+1,i}$ est en dehors du milieu Δ ou lorsqu'il y a eu une émission à la position $\mathbf{x}_{N_{\text{tot}},i}$ où N_{tot} est le nombre total de collisions nulles et de diffusions. L'algorithme Monte Carlo standard avec collisions nulles est donné figure 2.8.

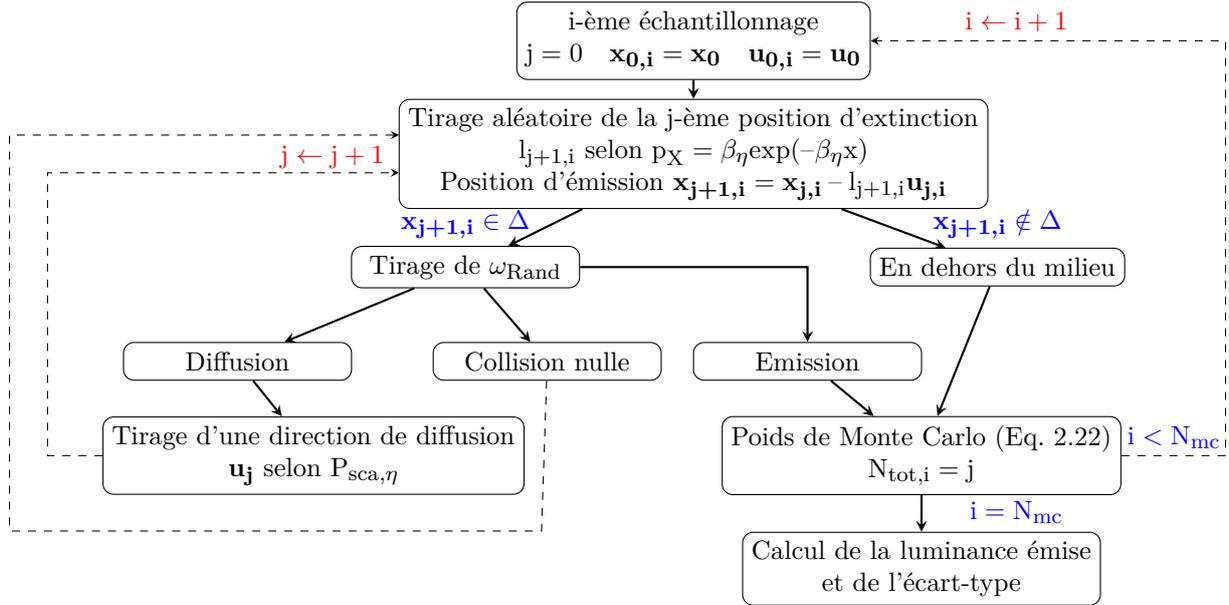


Figure 2.8 – Algorithme MCC avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant diffusant à haute température". Approche standard. Toutes les propriétés radiatives sont connues. On note $\omega_{\text{abs}} = \frac{\kappa_\eta}{\beta_\eta}$ et $\omega_{\text{sca}} = \frac{\sigma_\eta}{\beta_\eta}$.

En connaissant le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion, la fonction de phase et le champ de température, la luminance sortante du point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 est estimée en moyennant les poids de Monte Carlo suivants :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i \quad \text{avec} \quad w_i = \begin{cases} B_\eta(T(\mathbf{x}_{N_{\text{tot}}+1,i})) & \text{si } \mathbf{x}_{N_{\text{tot}}+1,i} \in \Delta \\ 0 & \text{si } \mathbf{x}_{N_{\text{tot}}+1,i} \notin \Delta \end{cases} \quad (2.22)$$

$$s(\tilde{I}) \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{\text{mc}} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}}$$

où $\mathbf{x}_{N_{\text{tot}}+1,i}$ est la position d'émission obtenue lors du i -ème échantillonnage après N_{tot} collisions nulles et diffusions. Avec les collisions nulles, nous retrouvons rigoureusement le même poids de Monte Carlo que celui donné par l'équation 2.13. La seule différence pour l'approche standard entre un algorithme avec ou sans collisions nulles, c'est la manière avec laquelle les chemins optiques ont été échantillonnés.

1.4.2 Approche *energy partitioning*

L'approche *energy partitioning* consiste à traiter les probabilités discrètes $\frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$, $\frac{\sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$ et $\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$ de manière déterministe. A chaque diffusion ou collision nulle, la contribution liée à l'émission est toujours prise en compte. Pour le i -ème échantillonnage, à une position $\mathbf{x}_{N_j+1,i}$, nous ne testons plus aléatoirement si une émission ou une diffusion ou une collision nulle ont eu lieu, mais l'émission et la diffusion et la collision nulle sont simultanément prises en compte.

Cependant, il existe dans l'équation 2.21 deux termes récurrents : le premier lié à un chemin de diffusion, le second lié à un chemin de collision nulle. Dans cette approche *energy partitioning*, il est compliqué de suivre simultanément le chemin de diffusion et le chemin de collision nulle. Un choix peut être fait pour pouvoir suivre soit un chemin de diffusion, soit un chemin de collision nulle. Pour faire ce choix, l'équation 2.21 est modifiée en y introduisant une probabilité de diffusion $P_{s,\eta}$ et une probabilité de collision nulle $P_{n,\eta}$ telles que $P_{s,\eta} + P_{n,\eta} = 1$:

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \int_0^\infty \hat{\beta}_\eta \exp(-\hat{\beta}_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \\ & \left(\frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + P_{s,\eta} \frac{\sigma_\eta}{P_{s,\eta} \hat{\beta}_\eta} \int_{4\pi} P_{sca,\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right. \\ & \left. + (1 - P_{s,\eta}) \frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{(1 - P_{s,\eta}) \hat{\beta}_\eta} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0) \right) \end{aligned} \quad (2.23)$$

La probabilité de diffusion $P_{s,\eta}$ est choisie de telle sorte à respecter le ratio de diffusions sur le nombre total de collisions (sauf l'émission) :

$$\begin{aligned} P_{s,\eta} &= \frac{\sigma_\eta}{\sigma_\eta + \gamma_\eta} = \frac{\sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta} \\ P_{n,\eta} &= 1 - P_{s,\eta} = \frac{\gamma_\eta}{\sigma_\eta + \gamma_\eta} = \frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta} \end{aligned} \quad (2.24)$$

Avec cette définition de $P_{s,\eta}$, l'équation 2.23 devient :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = & \int_0^\infty \hat{\beta}_\eta \exp(-\hat{\beta}_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \\ & \left(\frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + P_{s,\eta} \frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \int_{4\pi} P_{sca,\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right. \\ & \left. + (1 - P_{s,\eta}) \frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0) \right) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Pour chaque i -ème échantillonnage, l'algorithme débute à la position \mathbf{x}_0 . Une longueur d'extinction $l_{1,i}$ est générée selon la loi de Beer $\hat{p}_L(l) = \hat{\beta}_\eta \exp(-\hat{\beta}_\eta l)$. Une nouvelle position d'émission est obtenue : $\mathbf{x}_{1,i} = \mathbf{x}_0, i - l_{1,i} \mathbf{u}_0$. A cette position, comme nous ne testons plus de manière statistique si une émission ou une diffusion ou une collision nulle a eu lieu, la contribution de chaque évènement est incluse dans le poids à travers un coefficient multiplicatif : $\frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$ pour l'émission et

$\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ pour la diffusion et la collision nulle. Le poids de Monte Carlo peut dès à présent être implémenté en prenant la fraction de rayonnement émis :

$$w_i \leftarrow \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i}))$$

En $\mathbf{x}_{1,i}$, il y a soit une diffusion, soit une collision nulle. Pour suivre un chemin de diffusion ou un chemin de collision nulle, un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 est comparé à $P_{s,\eta}$:

- Si ce nombre est compris entre 0 et $P_{s,\eta}$ alors il y a diffusion et une nouvelle direction de propagation $\mathbf{u}_{1,i}$ est générée selon la fonction de phase.
- S'il est compris entre $P_{s,\eta}$ et 1 alors il y a collision nulle et le libre parcours poursuit son chemin dans la même direction (une collision nulle correspond à la diffusion vers l'avant).

Dans les deux cas, le poids est multiplié par le même coefficient $\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$. Le libre parcours poursuit son chemin en générant une nouvelle position d'émission selon la loi de Beer, puis le poids de Monte Carlo est mis à jour :

$$w_i \leftarrow \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{2,i}))$$

Le poids se met à jour continuellement jusqu'à ce que le chemin optique quitte le milieu Δ . De manière générale, pour le i -ème échantillonnage, le poids de Monte Carlo s'écrit de manière récursive :

$$\begin{aligned} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) &= \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{u}_{1,i})) \\ w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{u}_{1,i})) &= \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{2,i})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{2,i}, \mathbf{u}_{2,i})) \\ &\vdots \\ w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{N_{\text{tot}}-1,i}, \mathbf{u}_{N_{\text{tot}}-1,i})) &= \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{N_{\text{tot}},i})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \times 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

avec $N_{\text{tot},i}$ le nombre total de diffusions et de collisions nulles qu'il y a eu le long du i -ème échantillonnage. La forme récursive du poids de Monte Carlo fait apparaître un coefficient multiplicatif constant qui vaut $\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$. Le poids de Monte Carlo peut se réécrire sous la forme générale suivante :

$$w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) = \sum_{j=1}^{j=N_{\text{tot},i}} \left\{ \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^{j-1} \right\} \quad (2.27)$$

La luminance sortante est approximée par l'espérance des poids de Monte Carlo :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \left\{ \sum_{j=1}^{j=N_{\text{tot},i}} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^{j-1} \right\} \\ s(\tilde{I}) &\simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{\text{mc}} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}} \end{aligned} \quad (2.28)$$

L'algorithme Monte Carlo à collisions nulles correspondant à l'approche *energy partitioning* est résumé dans la figure 2.9.

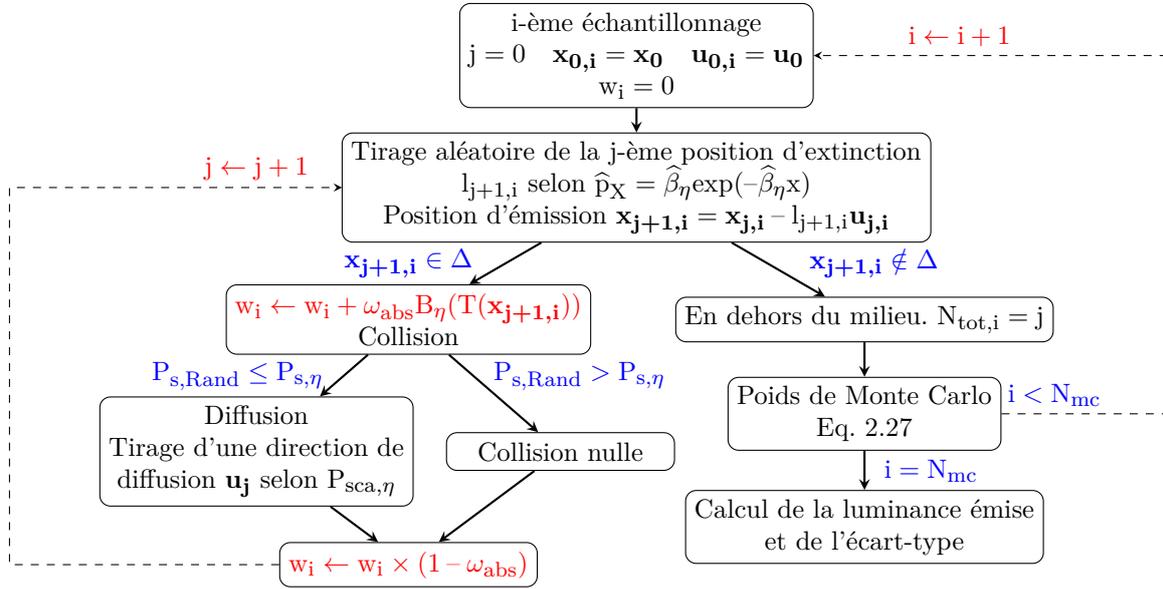


Figure 2.9 – Algorithme MCC avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant et diffusant à haute température". Approche *energy partitioning*. Toutes les propriétés radiatives sont connues. On note $\omega_{\text{abs}} = \frac{\kappa_\eta}{\beta_\eta}$.

Sans collisions nulles, le terme multiplicatif lié à la récursivité est l'albédo ω_η défini par $\frac{\sigma_\eta}{\kappa_\eta + \sigma_\eta}$. En présence de collisions nulle, le terme multiplicatif est constant indépendamment des événements de diffusion ou de collision nulle. Ce terme vaut

$$\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} = \frac{\sigma_\eta + \gamma_\eta}{\kappa_\eta + \sigma_\eta + \gamma_\eta} = \frac{\text{diffusion}}{\text{absorption} + \text{diffusion}}$$

et peut être vu comme un albédo de diffusion qui inclut la diffusion "réelle" (σ_η) et la diffusion vers l'avant induite par les collisions nulles (γ_η).

Cette section a été l'occasion de présenter les algorithmes Monte Carlo classiques pour la résolution de l'ETR. Les algorithmes classiques supposent la connaissance de toutes les propriétés radiatives du milieu étudié afin de fournir une estimation de la grandeur radiative d'intérêt et de son incertitude numérique sous forme scalaire.

Nous avons introduit les algorithmes à collisions nulles et présenté leur intérêt pour étudier le transfert radiatif dans un milieu hétérogène. Les collisions nulles ne jouent aucun rôle dans la physique de transport associée à l'ETR et n'introduisent aucun biais. Elles peuvent être vues comme une astuce numérique qui modifie seulement les chemins de diffusion. Galtier *et. al.* [79]

ont montré que pour l'approche *energy partitioning*, lorsque le coefficient de collisions nulles γ_η augmente, l'écart-type estimé par Monte Carlo diminue. Ce gain en précision numérique s'accompagne d'une augmentation des temps de calculs. En effet, pour un même milieu Δ , lorsque le coefficient d'extinction global $\widehat{\beta}_\eta$ est élevé, les libres parcours d'extinction générés selon la loi de Beer $\widehat{p}_L(l) = \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l)$ sont très faibles et les chemins optiques subissent un nombre important de collisions avant de quitter le milieu.

Nous avons à présent tous les outils méthodologiques et algorithmiques pour étudier les méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS).

2 Méthodes Monte Carlo Symbolique pour la résolution de l'ETR

Tous les algorithmes présentés jusqu'ici ont considéré que les propriétés radiatives et/ou le champ de température étaient connus. Dans une démarche d'inversion, le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion, la fonction de phase ou encore le champ de température sont souvent inconnus, et nous cherchons à les identifier à partir de mesures appropriées de grandeurs radiatives et à partir de simulations basées sur une modélisation de ces mêmes grandeurs. Nous nous intéressons ici aux méthodes MCS pour la résolution de l'ETR afin de calculer ces grandeurs radiatives. Les méthodes MCS peuvent s'appliquer à d'autres types d'équations. Par exemple, Léa Pénazzi développe dans ses travaux de thèse des méthodes MCS appliquées à l'équation de la chaleur [85].

La différence entre les méthodes MCS et les méthodes MCC réside dans l'utilisation de certains paramètres sous forme symbolique dans les méthodes MCS au lieu de leur affecter une valeur scalaire comme dans les méthodes MCC. Le résultat d'une simulation MCS est une fonction faisant apparaître les variables symboliques de manière explicite. A l'origine, les méthodes MCS, introduites par William Dunn [16] étaient appelées *inverse Monte Carlo* avant d'être renommées *symbolic Monte Carlo* par le même auteur [17]. MCS n'est pourtant pas une méthode inverse, mais un calcul direct de l'ETR. L'intérêt d'utiliser MCS est de pouvoir "transformer" une équation intégral-différentielle en un polynôme dans lequel les propriétés radiatives symboliques apparaissent explicitement. L'avantage d'écrire l'ETR sous la forme d'un polynôme est de l'utiliser comme un outil d'analyse préliminaire pour une meilleure identification de propriétés radiatives [13–15, 18, 19].

2.1 Température comme symbole

Afin d'illustrer l'utilisation d'un algorithme MCS, considérons deux milieux M_1 et M_2 tels que définis dans le schéma ci-après. Chacun des milieux est isotherme de température T_1 et T_2 . Les deux milieux sont purement absorbants et ont le même coefficient d'absorption κ_η .

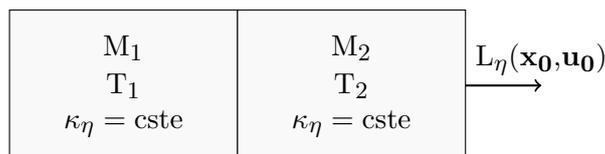


Figure 2.10 – Deux milieux homogènes et isothermes.

La luminance émise au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 s'écrit :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \kappa_\eta \exp(-\kappa_\eta l_1) dl_1 \left(H(\mathbf{x}_1 \in M_1) B_\eta(T_1) + H(\mathbf{x}_1 \in M_2) B_\eta(T_2) + H(\mathbf{x}_1 \notin \{M_1, M_2\}) \times 0 \right)$$

Algorithme standard. L'application d'un algorithme MCC permet d'obtenir la luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ sous forme scalaire : pour chaque κ_η , T_1 et T_2 , un calcul Monte Carlo permet d'obtenir une seule valeur de la luminance et l'incertitude numérique associée. Pour le i -ème échantillonnage, une position d'émission est générée depuis la position \mathbf{x}_0 en inversant la fonction densité de probabilité basée sur la loi d'extinction de Beer. La longueur d'extinction $l_{1,i}$ permet d'obtenir une nouvelle position $\mathbf{x}_{1,i} = \mathbf{x}_0 - l_{1,i} \mathbf{u}_0$. Si la position appartient au milieu M_1 (respectivement M_2) alors le poids de Monte Carlo retenu est la luminance de Planck à la température T_1 (respectivement T_2). Si la position n'appartient à aucun des milieux M_1 et M_2 alors le poids retenu est nul car il n'y a aucune luminance incidente sur le milieu d'intérêt.

Pour chaque position d'émission \mathbf{x}_i , le poids retenu dans un algorithme MCC est la luminance de Planck à la température T_1 ou la luminance de Planck du milieu 2 ou la luminance incidente qui vaut 0 ici. De manière générale, le poids de l'algorithme MCC s'écrit :

$$w_i = H(\mathbf{x}_i \in M_1) \times B_\eta(T_1) + H(\mathbf{x}_i \in M_2) \times B_\eta(T_2) + H(\mathbf{x}_i \notin \{M_1, M_2\}) \times 0$$

En développant, cela peut donner par exemple :

$$w_1 = B_\eta(T_1) \quad w_2 = B_\eta(T_2) \quad w_3 = 0 \quad \dots \quad w_{N_{mc}} = B_\eta(T_1)$$

Pour N_{mc} échantillonnages, la luminance émise est approximée par la grandeur scalaire suivante avec l'incertitude numérique associée :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i \quad \text{avec} \quad w_i = B_\eta(T_1) \text{ ou } B_\eta(T_2) \text{ ou } 0$$

$$s(\tilde{I}) \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}}$$

Algorithme symbolique. Supposons que les températures T_1 et T_2 sont inconnues et conservées sous forme symbolique. Contrairement à l'algorithme standard, le poids de Monte Carlo n'est plus constitué de la luminance de Planck à la température T_1 ou de la luminance de Planck

à la température T_2 , mais à la fois de la luminance de Planck à la température T_1 et de la luminance de Planck à la température T_2 . Pour chaque position d'émission \mathbf{x}_i , le poids retenu dans un algorithme symbolique n'est plus scalaire, mais dépend des deux températures T_1 et T_2 :

$$w_i = \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_1)B_\eta(T_1) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_2)B_\eta(T_2) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \notin \{M_1, M_2\}) \times 0$$

Pour l'exemple précédent, les poids s'écrivent :

$$\begin{aligned} - w_1(T_1, T_2) &= \mathbf{1} \times B_\eta(T_1) + \mathbf{0} \times B_\eta(T_2) + \mathbf{0} \times 0 \\ - w_2(T_1, T_2) &= \mathbf{0} \times B_\eta(T_1) + \mathbf{1} \times B_\eta(T_2) + \mathbf{0} \times 0 \\ - w_3(T_1, T_2) &= \mathbf{0} \times B_\eta(T_1) + \mathbf{0} \times B_\eta(T_2) + \mathbf{1} \times 0 \\ - \vdots \\ - w_{N_{mc}}(T_1, T_2) &= \mathbf{1} \times B_\eta(T_1) + \mathbf{0} \times B_\eta(T_2) + \mathbf{0} \times 0 \end{aligned}$$

Pour N_{mc} échantillonnages, la luminance émise est approximée par la **fonction** suivante :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\simeq \tilde{I}(T_1, T_2) = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(\mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_1)B_\eta(T_1) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_2)B_\eta(T_2) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \notin \{M_1, M_2\}) \times 0 \right) \\ &= B_\eta(T_1) \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_1) + B_\eta(T_2) \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_2) \\ &= \bar{a}B_\eta(T_1) + \bar{b}B_\eta(T_2) \end{aligned}$$

La luminance ne s'exprime plus sous la forme d'un scalaire, mais d'une combinaison linéaire de la loi de Planck qui dépend directement de la température. En un seul calcul, nous avons exprimé la luminance sortante comme une fonction des températures T_1 et T_2 . L'écart-type de l'estimation de la luminance par MCS est :

$$\begin{aligned} s(\tilde{I}) &\simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}} \\ &\simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(\mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_1)B_\eta(T_1) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_i \in M_2)B_\eta(T_2) \right)^2 - \left(\bar{a}B_\eta(T_1) + \bar{b}B_\eta(T_2) \right)^2 \right\}} \\ &\simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \left\{ (\bar{a} - \bar{a}^2)B_\eta^2(T_1) + (\bar{b} - \bar{b}^2)B_\eta^2(T_2) - 2\bar{a}\bar{b}B_\eta(T_1)B_\eta(T_2) \right\}} \end{aligned}$$

De la même manière que pour la luminance, l'écart-type associé au calcul MCS s'exprime comme une fonction des paramètres symboliques T_1 et T_2 . Une seule et unique simulation a permis d'estimer la luminance et son incertitude numérique dans l'espace des paramètres T_1 et T_2 .

Pour illustrer un exemple de fonction que l'on peut obtenir, reprenons le cas de deux milieux M_1 et M_2 homogènes, isothermes (de températures T_1 et T_2 inconnues) et d'épaisseurs $L_{x,1}$ et $L_{x,2}$. Les deux milieux sont purement absorbants et ont le même coefficient d'absorption κ_η supposé connu.

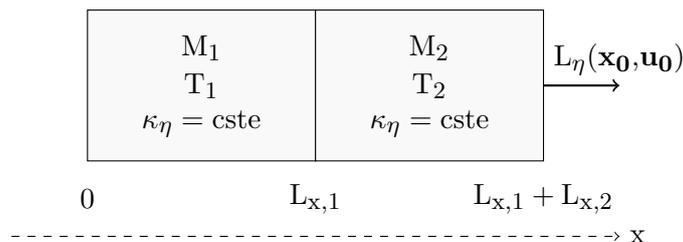


Figure 2.11 – Deux milieux homogènes et isothermes.

Nous venons de montrer que la luminance sortante $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ s'écrit sous la forme d'une fonction des émissions de Planck :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \bar{a}B_\eta(T_1) + \bar{b}B_\eta(T_2)$$

Prenons par exemple $L_{x,1} = L_{x,2} = 0,1$ cm et $\kappa_\eta = 10$ cm⁻¹, puis réalisons $N_{mc} = 10^5$ échantillonnages. Avec ces paramètres, les coefficients \bar{a} et \bar{b} valent 0,2312 et 0,6334. Ces coefficients \bar{a} et \bar{b} dépendent uniquement de la géométrie et du coefficient d'absorption κ_η . En un seul calcul symbolique, la luminance sortante a été définie dans l'espace des températures T_1 et T_2 .

Supposons maintenant que nous sommes capables de mesurer la luminance sortante $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ pour différents nombres d'onde. Est-il possible d'avoir de l'information sur l'identification des températures T_1 et T_2 à partir des mesures de luminance à différents nombres d'onde ? Pour cela, générons des pseudo-mesures (mesures simulées par calcul Monte Carlo classique) de luminance sortante en considérant les températures suivantes : $T_1 = 1800$ K et $T_2 = 1200$ K. Aussi, considérons que nous avons une pseudo-mesure à $\eta = 5000$ cm⁻¹ ($\lambda = 2$ μm) et à $\eta \simeq 1660$ cm⁻¹ ($\lambda \simeq 6$ μm). Nous avons à disposition deux pseudo-mesures de luminance sortante à deux nombres d'onde différents, ainsi qu'un modèle simple qui exprime la luminance sortante en fonction des températures que cherchons à identifier. Il est donc possible d'évaluer toutes les valeurs de la luminance sortante en un seul calcul, de les comparer aux valeurs mesurées (les pseudo-mesures) et en déduire si l'identification des températures est possible. Cette analyse peut se faire de manière graphique comme illustrée sur la figure 2.12.

Sur la figure 2.12a sont représentées les iso-valeurs de la luminance sortante dans l'espace des paramètres $(T_1; T_2)$. Une iso-valeur (ou iso-ligne) correspond à tous les couples $(T_1; T_2)$ qui donnent une valeur donnée de luminance sortante selon la fonction obtenue par MCS. En faisant le lien avec la grandeur mesurée, l'iso-ligne en rouge correspond à tous les couples $(T_1; T_2)$ qui donnent une pseudo-mesure de luminance à $\eta = 5000$ cm⁻¹. L'iso-ligne en vert correspond quant à elle à une pseudo-mesure de luminance à $\eta \simeq 1660$ cm⁻¹. Nous pouvons d'abord remarquer que les deux iso-lignes admettent deux intersections qui donnent simultanément les pseudo-mesures de luminance sortante à $\eta = 5000$ et à $\eta \simeq 1660$ cm⁻¹. Ces intersections correspondent aux couples $(T_1; T_2) \simeq (845$ K; 1530 K) et $(T_1; T_2) \simeq (1800$ K; 1200 K). Pour choisir la bonne solution, il faut ajouter de l'information *a priori*. Par exemple, dans le cas présenté ici, nous savons que la température du milieu 1 est supérieure à celle du milieu 2. L'unique solution est alors le couple $(T_1; T_2) \simeq (1800$ K; 1200 K). En l'absence d'information *a priori*, il faudrait une

voire plusieurs mesures supplémentaires, par exemple une mesure par pyrométrie ou une mesure de luminance à d'autres nombres d'onde.

Supposons maintenant que notre mesure de luminance sortante admette 5% d'erreur relative (erreur "expérimentale" sur la pseudo-mesure). Il est possible grâce à la fonction obtenue par MCS de représenter cette incertitude sur l'espace des paramètres, comme illustré sur la figure 2.12b. Ainsi, les iso-valeurs de $L \pm 5\%L$ sont représentées par des iso-surfaces, rouge pour la pseudo-mesure de luminance à $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ et verte pour la pseudo-mesure de luminance à $\eta \simeq 1660 \text{ cm}^{-1}$. L'intersection des deux iso-surfaces, représentée par les surfaces bornées bleues, correspond à tous les couples $(T_1; T_2)$ solutions de l'identification à partir des deux mesures avec 5% d'incertitude. Si l'erreur expérimentale relative est de 10% (figure 2.12c), l'intersection des deux iso-surfaces donne une infinité de solutions, signe que pour le cas illustré ici, il n'est pas possible d'identifier simultanément les température T_1 et T_2 à partir d'une mesure de luminance à deux nombres d'onde.

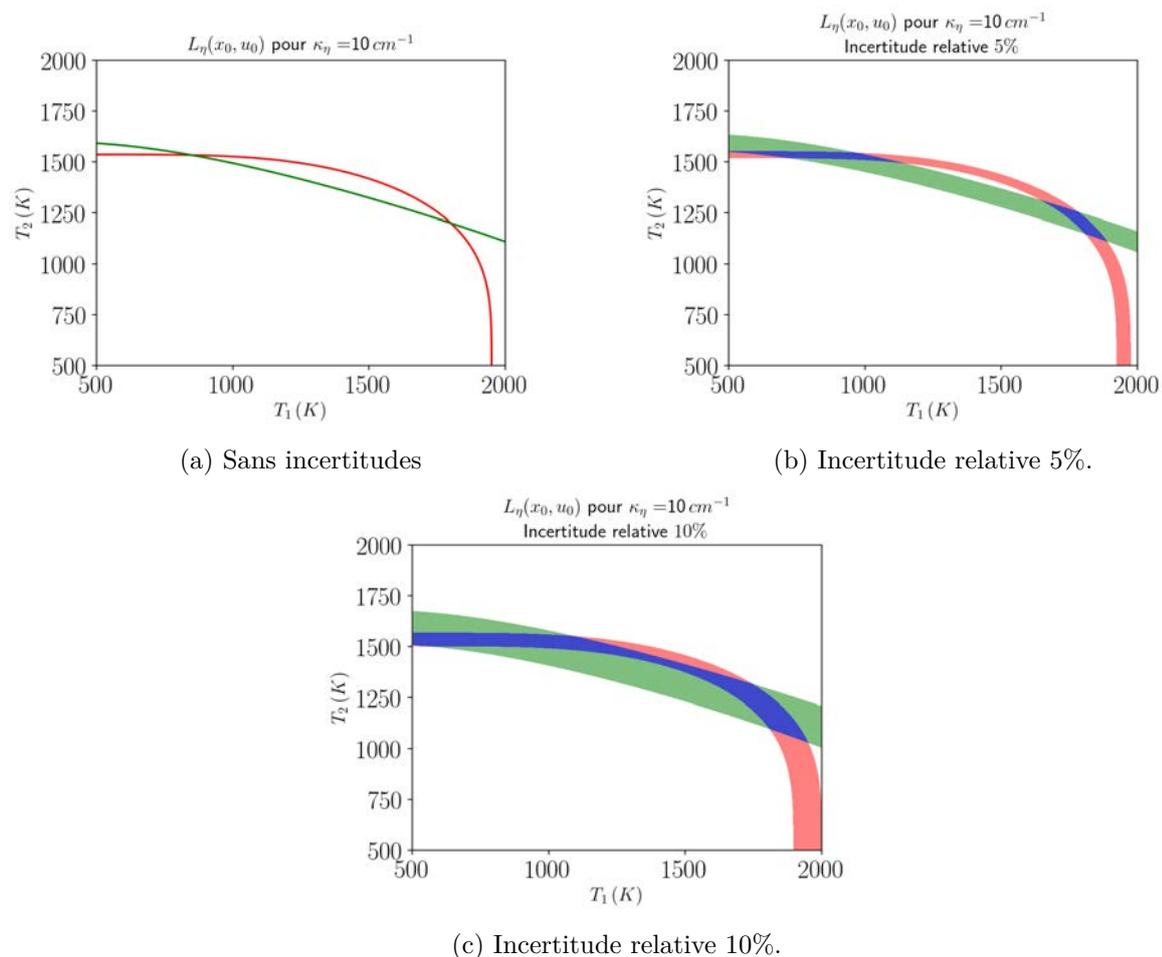


Figure 2.12 – Exemple d'analyse d'identification permises par MCS. Application à l'identification de la température.

Cet exemple illustre le potentiel des méthodes Monte Carlo Symbolique dans une démarche d'inversion. Au lieu de réaliser plusieurs simulations Monte Carlo pour différentes valeurs de la température, une seule simulation symbolique a permis d'écrire la luminance sortante comme une combinaison linéaire simple et surtout pratique à mettre en oeuvre, ne faisant intervenir que la loi de Planck qui dépend du nombre d'onde et de la température. De plus, l'intégration des incertitudes (numériques et expérimentales) dans notre analyse inverse est aisée et les fonctions obtenues par MCS ont permis de déterminer si le problème inverse est bien-posé, *i.e.*, la solution existe, est unique et stable.

L'approche symbolique n'est pas restrictive aux températures et peut être utilisée pour garder par exemple les coefficients d'absorption et de diffusion comme symboles.

2.2 Coefficient d'absorption comme symbole

Reprenons le cas d'étude décrit dans la sous-section 1.3.1 en négligeant la diffusion ($\sigma_\eta = 0$). La luminance partante du point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 pour un milieu homogène, absorbant, émettant, non-diffusant et anisotherme s'écrit :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \kappa_\eta \exp(-\kappa_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) \quad (2.29)$$

Si le coefficient d'absorption est inconnu, il est impossible de calculer la cumulée de la fonction densité de probabilité basée sur la loi de Beer et de l'inverser pour générer des libres parcours d'absorption puisque la loi de Beer dépend du coefficient d'absorption. La connaissance de l'épaisseur optique est en conséquence nécessaire pour générer des libres parcours d'absorption. Dunn [16] a utilisé l'approche symbolique pour exprimer l'albédo comme grandeur symbolique mais en supposant connue l'épaisseur optique. Subramaniam et Menguc [92] ont étendu l'approche à l'albédo et au paramètre d'asymétrie d'une fonction de phase linéaire anisotrope. C'est probablement à cause de la connaissance préalable de l'épaisseur optique que les méthodes MCS ont peu été utilisées après les travaux de Dunn [16] et de Subramaniam et Menguc [92].

Une première piste pour contourner la difficulté liée à la connaissance *a priori* de l'épaisseur optique serait d'introduire une fonction densité de probabilité arbitraire \widetilde{p}_L indépendante du coefficient d'absorption, telle que $\int_0^\infty \widetilde{p}_L(l) dl = 1$:

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \widetilde{p}_L(l_1) \frac{\kappa_\eta \exp(-\kappa_\eta l_1)}{\widetilde{p}_L(l_1)} dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) \quad (2.30)$$

Les libres parcours d'absorption sont dans ce cas générés selon la probabilité arbitraire \widetilde{p}_L et non la loi de Beer. Le poids de Monte Carlo correspondant à ce calcul intégral est :

$$w_i = \frac{\kappa_\eta \exp(-\kappa_\eta l_i)}{\widetilde{p}_L(l_i)} H(\mathbf{x}_i \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_i)) \quad (2.31)$$

En moyennant ces poids, la luminance est approximée par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0) \simeq \widetilde{I} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{i=N_{mc}} \frac{\kappa_\eta \exp(-\kappa_\eta l_i)}{\widetilde{p}_L(l_i)} B_\eta(T(\mathbf{x}_i)) \quad (2.32)$$

Cette expression est constituée d'autant d'exponentielles que d'échantillonnages Monte Carlo, et n'est donc pas pratique à utiliser pour de l'analyse en inversion. L'introduction d'une fonction densité de probabilité arbitraire pour générer des libres parcours d'absorption ne résout pas le problème lié à la non-linéarité de la loi de Beer.

Une seconde solution consiste à utiliser les algorithmes à collisions nulles (ACN) dont une description est donnée dans la sous-section 1.4. Pour rappel, l'introduction des collisions nulles permet d'écrire la luminance sous la forme suivante :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left(\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0) \right)$$

Dans un ACN, les libres parcours d'extinction sont échantillonnés selon le coefficient d'extinction $\widehat{\beta}_\eta$ qui cette fois est connu. Pour l'approche symbolique, supposons que le coefficient d'absorption est inconnu. Cette grandeur restera sous sa forme symbolique tout au long des échantillonnages Monte Carlo. Lorsque κ_η est inconnu, il n'est pas possible d'utiliser la probabilité discrète $\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta}$ pour tester aléatoirement le type de collision. Cette approche standard est donc inadéquate pour conserver le coefficient d'absorption comme grandeur inconnue. Pour remédier à cette difficulté, l'approche dite *energy partitioning* sera utilisée. Le poids de Monte Carlo (collisions nulles + *energy partitioning*) dans le cas d'un milieu absorbant non-diffusant est :

$$\begin{aligned} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) &= \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,i})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{u}_0)) \\ w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{u}_0)) &= \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{2,i})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{2,i}, \mathbf{u}_0)) \\ &\vdots \\ w_i(L_\eta(\mathbf{x}_{N_{cn,i}-1,i}, \mathbf{u}_0)) &= \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{N_{cn,i}})) + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \times 0 \end{aligned} \quad (2.33)$$

avec $N_{cn,i}$ le nombre de collisions qu'il y a eu le long du i -ème échantillonnage. La forme récursive du poids permet de l'écrire sous la forme suivante :

$$w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) = \sum_{j=1}^{j=N_{cn,i}} \left\{ H(\mathbf{x}_{j,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^{j-1} \right\} \quad (2.34)$$

Tout le travail de l'approche Symbolique consiste à reformuler le poids de Monte Carlo pour que la moyenne des poids donne une fonction du coefficient d'absorption assez simple à utiliser (par exemple un polynôme). Pour cela, nous allons rendre la somme de 1 à $N_{cn,i}$ indépendante du i -ème échantillonnage en la transformant en une somme de 0 à ∞ avec une fonction Heaviside :

$$\begin{aligned} w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) &= \sum_{j=1}^{j=N_{cn,i}} H(\mathbf{x}_{j,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^{j-1} \\ &= \sum_{j=0}^{j=\infty} H(j < N_{cn,i}) H(\mathbf{x}_{j+1,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^j \end{aligned} \quad (2.35)$$

Pour appliquer l'opérateur de moyenne, il faut avoir une grandeur qui dépend du i -ème échantillonnage et non du paramètre symbolique inconnu. Ici, c'est le coefficient $H(j < N_{cn,i})H(\mathbf{x}_{j+1,i} \in \Delta)B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,i}))$, indépendant de κ_η , qui sera moyenné. Ainsi, la luminance sortante est approximée par l'espérance des poids de Monte Carlo associés à ces coefficients :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left\{ \sum_{j=0}^{j=\infty} H(j < N_{cn,i})H(\mathbf{x}_{j+1,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,i})) \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j \right\} \\ &= \sum_{j=0}^{j=\infty} \left\{ \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} H(j < N_{cn,i})H(\mathbf{x}_{j+1,i} \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,i})) \right\} \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \sum_{j=0}^{j=\infty} \bar{a}_j \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j$$

où :

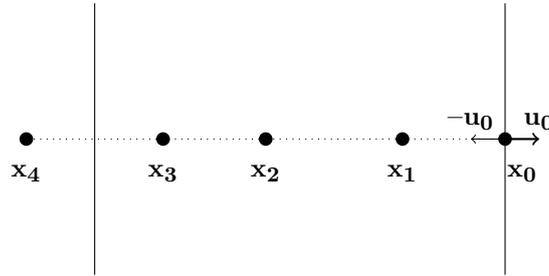
$$\bar{a}_j = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} H(j < N_{cn,i})H(\mathbf{x}_{j+1,i} \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,i})) \quad (2.37)$$

Ainsi, lors d'un algorithme MCS, l'objectif sera de calculer tous les coefficients \bar{a}_j en utilisant l'équation 2.37.

NOTE : Exemple de construction du polynôme en κ_η

Afin d'illustrer la construction du polynôme en κ_η , prenons l'exemple des réalisations suivantes :

- $i = 1$: 3 collisions nulles puis le libre parcours quitte le milieu.



Dans ce cas, le poids de Monte Carlo (approche *energy partitioning*) est :

$$w_1 = \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{1,1})) + \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right) \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{2,1})) + \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^2 \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{3,1}))$$

Ce poids peut être réécrit sous la forme :

$$w_1 = \sum_{j=0}^{N_{cn,1}-1=2} a_{j,1} \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j$$

où $N_{cn,1} = 3$ le nombre de collisions nulles et $a_{j,1} = B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,1}))$.

- $i = 2$: 5 collisions nulles puis le libre parcours quitte le milieu. Dans ce cas, $N_{cn,2} = 5$.

$$w_2 = \sum_{j=0}^{N_{cn,2}-1=4} a_{j,2} \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j$$

où $a_{j,2} = B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,2}))$ et ainsi de suite jusqu'à $i = N_{mc}$. Pour chaque i -ème échantillonnage, nous retiendrons le nombre de collisions nulles $N_{nc,i}$. Lorsque tous les échantillonnages Monte Carlo ont été réalisés, nous définissons j_{max} comme étant le nombre maximal de collisions nulles qu'il y a eu pour tous les i échantillonnages. Pour un i -ème échantillonnage quelconque, le poids peut se réécrire sous la forme :

$$w_i = \sum_{j=0}^{j_{max}-1} a_{j,i} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^j$$

avec $a_{j,i} = 0 \forall j > N_{nc,i}$.

- A présent, estimons la luminance sortante $L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)$ en moyennant les poids de Monte Carlo :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0) &\simeq \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i \\ &\simeq \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(a_{0,i} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} + a_{1,i} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right) + a_{2,i} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^2 \dots \right) \\ &\simeq \left[\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{0,i} \right] \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} + \left[\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{1,i} \right] \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right) + \left[\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{2,i} \right] \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^2 + \dots \\ &\simeq \overline{a_0} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} + \overline{a_1} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right) + \overline{a_2} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^2 + \dots \\ &\simeq \sum_{j=0}^{j_{max}-1} \overline{a_j} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^j \end{aligned}$$

En un seul calcul et grâce aux collisions nulles et à l'approche *energy partitioning*, il a été possible d'exprimer la grandeur radiative d'intérêt sous la forme d'un polynôme du coefficient d'absorption resté inconnu tout le long des échantillonnages Monte Carlo. Le coefficient d'absorption apparaît explicitement dans le polynôme. Ce polynôme est valable pour tout $\kappa_\eta \leq \widehat{\beta}_\eta$. Il convient de noter ici qu'à aucun moment le polynôme n'a été tronqué et qu'aucun biais n'a été introduit, c'est l'algorithme qui fait émerger la somme infinie. Le calcul symbolique de l'écart-type sur l'estimation de $L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)$ en fonction de κ_η est donné en annexe A.

Le schéma de la figure 2.13 résume le fonctionnement de l'algorithme MCS dans le cas d'un milieu homogène absorbant, émettant, non-diffusant, en conservant le coefficient d'absorption comme grandeur symbolique. Pour chaque i -ème échantillonnage, l'algorithme symbolique consiste à compter le nombre de collisions nulles jusqu'à ce que le chemin optique quitte le milieu. A la fin des N_{mc} échantillonnages, les coefficients $\overline{a_j}$ (et $\overline{a_j a_j'}$ pour l'écart-type) sont estimés grâce à l'équation 2.37.

Grâce à l'algorithme Symbolique, nous pouvons estimer $L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)$ ainsi que son incertitude numérique sous la forme d'un polynôme dans lequel le coefficient d'absorption apparaît explicitement. Ainsi, en un seul calcul symbolique, $L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)$ est exprimée dans l'espace κ_η .

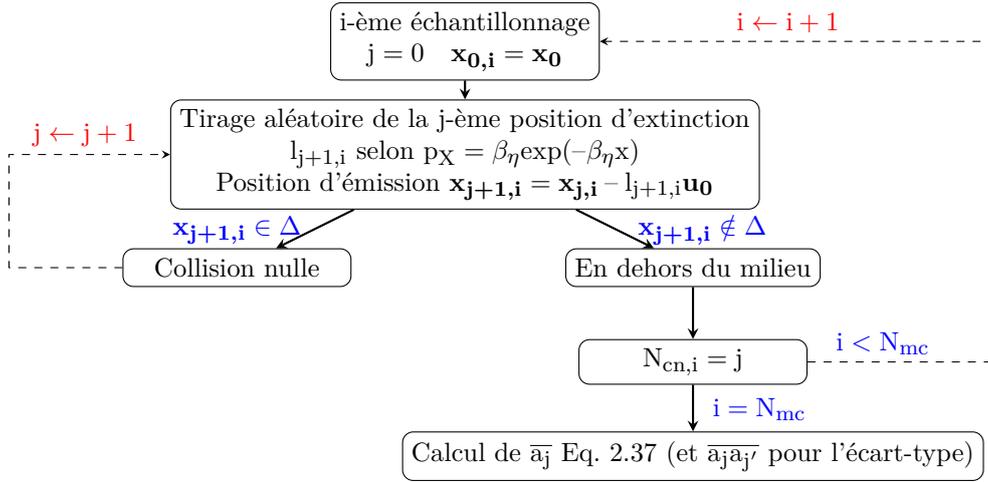


Figure 2.13 – Algorithme MCS avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant non-diffusant à haute température". Le coefficient d'absorption est conservé comme grandeur symbolique.

Les coefficients \bar{a}_j du polynôme obtenu par MCS pour modéliser la grandeur radiative d'intérêt dépendent des dimensions du milieu étudié, du choix du coefficient d'extinction global $\hat{\beta}_\eta$ et de la loi de Planck B_η .

- Si $\hat{\beta}_\eta$ est défini comme majorant de κ_η pour chaque nombre d'onde alors les coefficients \bar{a}_j dépendent aussi du nombre d'onde. Nous aurions dans ce cas autant de polynômes que de nombres d'onde. A un nombre d'onde η donné, un seul calcul symbolique est réalisé pour construire le polynôme défini pour ce nombre d'onde.
- Il est également possible de définir un coefficient d'extinction global $\hat{\beta}$ comme majorant de κ_η pour tous les nombres d'onde. Deux cas sont possibles :
 - Si le milieu est anisotherme, le poids de Monte Carlo retenu pour le calcul des coefficients \bar{a}_j est :

$$w_i = \sum_{j=0}^{j_{\max}-1} a_{j,i} \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}} \left(\frac{\hat{\beta} - \kappa_\eta}{\hat{\beta}} \right)^j$$

avec $a_{j,i} = B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+1,i}))$. Les coefficients $a_{j,i}$ font intervenir la loi de Planck qui dépend du nombre d'onde. En conséquence, les coefficients \bar{a}_j du polynôme en κ_η dépendent également de η .

- Si le milieu est isotherme à la température T , le poids de Monte Carlo retenu pour le calcul des coefficients \bar{a}_j est :

$$w_i = \sum_{j=0}^{j_{\max}-1} a_{j,i} B_\eta(T) \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}} \left(\frac{\hat{\beta} - \kappa_\eta}{\hat{\beta}} \right)^j$$

avec $a_{j,i} = 1$ ou 0 . Les coefficients $a_{j,i}$ ne dépendant pas de η , en conséquence les coefficients \bar{a}_j du polynôme en κ_η ne dépendent pas de η . Dans ce cas, un seul calcul

symbolique est réalisé pour construire un polynôme en κ_η défini pour tous les nombres d'onde.

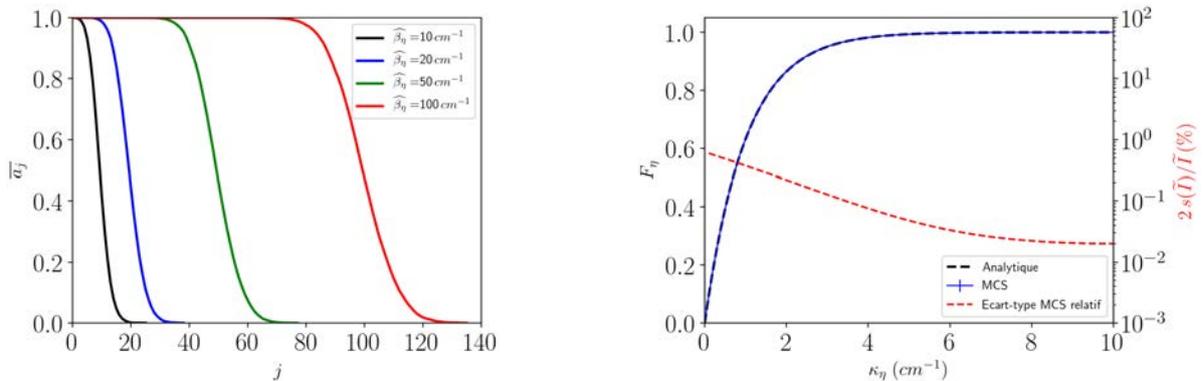
Pour rappel, si $\widehat{\beta}_\eta$ est choisi trop grand (milieu optiquement épais), les libres parcours d'extinction deviennent très petits et le nombre de collisions nulles N_{cn} devient important, le degré du polynôme obtenu devient en conséquence élevé. Aussi, les temps de calculs s'allongent.

Reprenons le cas d'étude décrit dans la sous-section 1.3.1 en négligeant la diffusion ($\sigma_\eta = 0$) et en considérant un milieu isotherme à la température T . Nous cherchons à estimer le facteur d'émission $F_\eta(\kappa_\eta) = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0; \kappa_\eta)}{B_\eta(T)}$ en fonction du coefficient d'absorption κ_η (le paramètre symbolique de MCS). Pour cela, une valeur de $\widehat{\beta}_\eta$ sera fixée puis **une** seule simulation sera réalisée en gardant κ_η inconnu en prenant $N_{mc} = 10^4$. La direction \mathbf{u}_0 sera la normale à la surface $x = L_x$ et le milieu aura pour épaisseur $L_x = 1$ cm.

Dans un premier temps, prenons $\widehat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$. Dans la configuration d'étude, le nombre maximal de collisions nulles pour tous les N_{mc} échantillonnages est de 25. L'ordre du polynôme obtenu est donc 24. La forme du polynôme modélisant $F_\eta(\kappa_\eta)$ est donnée dans l'équation 2.38 pour $\widehat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$:

$$\forall \kappa_\eta \in [0; 10] \text{ cm}^{-1} : \quad F_\eta(\kappa_\eta) \simeq \frac{\kappa_\eta}{10} \left\{ 0,9999 + 0,9994 \left(1 - \frac{\kappa_\eta}{10}\right) + 0,9973 \left(1 - \frac{\kappa_\eta}{10}\right)^2 + 0,9894 \left(1 - \frac{\kappa_\eta}{10}\right)^3 + \dots \right\} \quad (2.38)$$

Lorsque $\widehat{\beta}_\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$, le nombre maximal de collisions nulles est de 38. Si $\widehat{\beta}_\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$, l'ordre du polynôme obtenu est de 135. Une représentation graphique des coefficients du polynômes pour ces valeurs de $\widehat{\beta}_\eta$ est donnée dans la figure 2.14a.



(a) Exemple de coefficients obtenus pour différentes valeurs de $\widehat{\beta}_\eta$.

(b) Facteur d'émission estimé par MCS avec $\widehat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ et $N_{mc} = 10^4$.

Figure 2.14 – (a) Exemple de coefficients polynomiaux obtenus grâce à MCS et (b) Facteur d'émission modélisé par le polynôme MCS pour $\widehat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$.

Nous pouvons également comparer sur la figure 2.14b le facteur d'émission modélisé par le polynôme obtenu par MCS pour $\hat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ et le facteur d'émission analytique. Le polynôme reproduit parfaitement le facteur d'émission pour $\kappa_\eta \in [0; 10] \text{ cm}^{-1}$. L'écart-type relatif maximal observé (avec un indice de confiance à 95%) augmente jusqu'à 1% lorsque le coefficient d'absorption tend vers 0 (lorsque κ_η s'éloigne de $\hat{\beta}_\eta$).

Choix de l'expression polynomiale

Nous venons de montrer que dans le cas d'un milieu absorbant homogène et isotherme, MCS permet d'écrire le facteur d'émission sous la forme d'un polynôme de $\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$:

$$F_\eta \simeq \sum_{j=0}^{j_{\max}-1} \bar{a}_j \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j$$

Comme $\hat{\beta}_\eta$ est connu, il est possible de développer à nouveau $\left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j$ en un polynôme de κ_η :

$$\begin{aligned} F_\eta &\simeq \sum_{j=0}^{j_{\max}-1} \bar{a}_j \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(1 - \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j \\ &\simeq \sum_{j=0}^{j_{\max}-1} \bar{a}_j \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \sum_{k=0}^j \frac{j!}{k! (j-k)!} \left(\frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^k (-1)^{j-k} \\ &\simeq \sum_{j=0}^{j_{\max}-1} a'_j \kappa_\eta^{j+1} \end{aligned}$$

Soit $c(k,j) = \frac{j!}{k! (j-k)!}$. Le nouveau coefficient a'_j est donné par :

$$a'_j = (-1)^j \left(\frac{1}{\hat{\beta}_\eta} \right)^{j+1} \sum_{k=j}^{j_{\max}-1} \bar{a}_k c(j,k)$$

Pour des raisons de stabilité numérique, nous avons constaté qu'il ne fallait pas développer $\left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)^j$ en un polynôme de κ_η . Le polynôme $\sum_{j=0} a'_j \kappa_\eta^j$ est constitué de coefficients a'_j positifs et négatifs et très petits devant 1. Le polynôme est également constitué du coefficient d'absorption κ_η élevé à la puissance j . Cette manoeuvre numérique peut vite poser problème si κ_η est supérieur à 1 (unités arbitraires) et si le degré du polynôme est élevé. Aussi, il faudra à un moment donné du calcul estimer la factorielle de j_{\max} qui peut vite s'avérer impossible.

Si le rapport $\left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)$ n'est pas développé en un polynôme de κ_η , il reste tout le temps compris entre 0 et 1 comme $\hat{\beta}_\eta$ est un majorant de κ_η . Elevé à la puissance j , ce rapport reste toujours compris entre 0 et 1. Les coefficients \bar{a}_j sont également des nombres compris entre 0 et 1. Exprimer le facteur d'émission comme une fonction de $\left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \right)$ et non de κ_η implique la manipulation de nombres compris entre 0 et 1 et évite ces problèmes de dépassement de capacité numérique.

2.3 Coefficients d'absorption et de diffusion comme symboles

Nous venons de voir comment conserver le coefficient d'absorption comme symbole en utilisant les algorithmes à collisions nulles et l'approche *energy partitioning*. A présent, nous utilisons ces mêmes approches pour conserver à la fois les coefficients d'absorption et de diffusion comme symboles. Ces paramètres resteront sous leur forme symbolique tout au long des échantillonnages Monte Carlo.

Reprenons le cas d'étude décrit dans la sous-section 1.3.1. En utilisant les collisions nulles, la luminance sortante, donnée par l'équation 2.21, est rappelée ci-après :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left(\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 + \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0) \right)$$

De la même manière que pour le cas du milieu non-diffusant présenté dans la sous-section 2.2, nous utilisons l'approche *energy partitioning* pour prendre en compte tous les phénomènes (ici l'émission, la diffusion et les collisions nulles) dans l'estimation de la grandeur intégrale.

Avec les ACN et l'approche *energy partitioning*, nous avons montré dans la sous-section 1.4.2 qu'il existe dans l'équation 2.21 deux termes récursifs : le premier lié à un chemin de diffusion, le second lié à un chemin de collision nulle. Dans l'approche *energy partitioning*, il est difficile de suivre simultanément le chemin de diffusion et le chemin de collision nulle. Un choix peut être fait pour pouvoir suivre soit un chemin de diffusion, soit un chemin de collision nulle. Pour faire ce choix, nous avons introduit dans la sous-section 1.4.2 une probabilité de diffusion notée $P_{s,\eta}$ qui dépend des coefficients d'absorption et de diffusion. Dans l'approche symbolique, ces coefficients sont inconnus et nous ne pouvons plus utiliser la probabilité $P_{s,\eta}$. La probabilité de diffusion à introduire ne doit donc pas dépendre de κ_η ni de σ_η . Galtier *et. al.* [13] ont alors proposé de prendre la probabilité de diffusion de manière arbitraire notée $\widetilde{P}_{s\eta}$. En introduisant une telle probabilité arbitraire, l'équation 2.21 devient :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left(\frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \widetilde{P}_{s\eta} \frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s\eta}} \int_{4\pi} P_{\text{sca},\eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 + (1 - \widetilde{P}_{s\eta}) \frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta (1 - \widetilde{P}_{s\eta})} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0) \right) \quad (2.39)$$

Pour le i -ème échantillonnage, la génération des libres parcours d'extinction débute à la position \mathbf{x}_0 . La longueur d'extinction $l_{1,i}$ est générée selon la loi de Beer $\widehat{p}_L(l) = \widehat{\beta}_\eta \exp(-\widehat{\beta}_\eta l)$ et permet d'obtenir une nouvelle position $\mathbf{x}_{1,i} = \mathbf{x}_0 - l_{1,i} \mathbf{u}_0$. Si la position $\mathbf{x}_{1,i}$ est dans le milieu Δ , il faut prendre en compte simultanément {une émission et une diffusion} ou {une émission et une collision nulle}. Ce test aléatoire est réalisé grâce à la probabilité arbitraire $\widetilde{P}_{s\eta}$ introduite précédemment. Un nombre aléatoire tiré uniformément entre 0 et 1 est doit être comparé à $\widetilde{P}_{s\eta}$:

- Si ce nombre est compris entre 0 et $\widetilde{P}_{s\eta}$, alors une diffusion a lieu. Une nouvelle direction $\mathbf{u}_{1,i}$ est générée selon $P_{sca,\eta}$ et le poids de Monte Carlo est multiplié par $\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s\eta}}$. L'algorithme se poursuit en générant aléatoirement une longueur d'extinction $l_{2,i}$ selon la loi de Beer, puis une position d'émission $\mathbf{x}_{2,i} = \mathbf{x}_{1,i} - l_{2,i} \mathbf{u}_{1,i}$.
- Si ce nombre est compris entre $\widetilde{P}_{s\eta}$ et 1, alors une collision a lieu et le poids de Monte Carlo est multiplié par $\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta (1 - \widetilde{P}_{s\eta})}$. L'algorithme se poursuit en générant aléatoirement une longueur d'extinction $l_{2,i}$ selon la loi de Beer, puis une position d'émission $\mathbf{x}_{2,i} = \mathbf{x}_{1,i} - l_{2,i} \mathbf{u}_{1,i}$ avec $\mathbf{u}_{1,i} = \mathbf{u}_0$.

Le i -ème échantillonnage s'arrête dès que le libre parcours quitte le milieu Δ après $N_{sca,i}$ diffusions et $N_{cn,i}$ collisions nulles. Nous désignons par l'indice j (respectivement k) le compteur de collisions nulles (respectivement de diffusions). A chaque collision nulle (respectivement diffusion), le compteur noté j (respectivement k) est incrémenté. Sur la figure 2.15 est représenté un exemple de chemin optique ayant subi 2 diffusions ($N_{sca,i} = 2$) et 3 collisions nulles ($N_{cn,i} = 3$) avant de quitter le milieu.

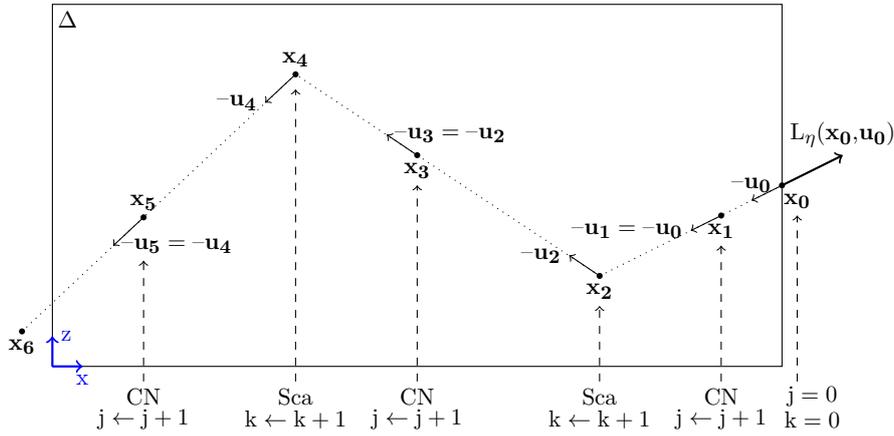


Figure 2.15 – Notations utilisées pour l'algorithme Monte Carlo (vue 2D). "CN" et "Sca" représentent les collisions nulles et les diffusions.

Le poids de Monte Carlo de l'équation 2.39 s'écrit sous la forme suivante :

$$w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) = \sum_{\substack{j+k=N_{cn,i}+N_{sca,i}-1 \\ j+k=0 \\ 0 \leq j \leq N_{cn,i} \\ 0 \leq k \leq N_{sca,i}}} H(\mathbf{x}_{j+k+1,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\beta_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+k+1,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta (1 - \widetilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s\eta}} \right)^k \quad (2.40)$$

Nous allons à présent reformuler le poids de Monte Carlo pour obtenir une fonction assez simple à utiliser (par exemple un polynôme) des coefficients d'absorption et de diffusion. Pour cela, nous allons rendre la double somme de 0 à $N_{cn,i} + N_{sca,i} - 1$ indépendante du i -ème échantillonnage en la transformant en une somme de 0 à ∞ avec une fonction Heaviside :

$$w_i(L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} H(j+k < N_{cn,i} + N_{sca,i}) H(\mathbf{x}_{j+k+1,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\beta_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+k+1,i})) \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta (1 - \widetilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s\eta}} \right)^k \quad (2.41)$$

La luminance sortante est approximée par la moyenne des poids de Monte Carlo :

$$\begin{aligned}
L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\simeq \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} H(j+k < N_{\text{cn},i} + N_{\text{sca},i}) H(\mathbf{x}_{j+k+1,i} \in \Delta) \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+k+1,i})) \\
&\quad \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta(1 - \tilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta \tilde{P}_{s\eta}} \right)^k \\
&\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} H(j+k < N_{\text{cn},i} + N_{\text{sca},i}) H(\mathbf{x}_{j+k+1,i} \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+k+1,i})) \right\} \\
&\quad \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta(1 - \tilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta \tilde{P}_{s\eta}} \right)^k \\
\boxed{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)} &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \bar{a}_{j,k} \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta(1 - \tilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta \tilde{P}_{s\eta}} \right)^k
\end{aligned} \tag{2.42}$$

où :

$$\bar{a}_{j,k} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} H(j+k < N_{\text{cn},i} + N_{\text{sca},i}) H(\mathbf{x}_{j+k+1,i} \in \Delta) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+k+1,i})) \tag{2.43}$$

En un seul calcul et grâce aux collisions nulles et à l'approche *energy partitioning*, il a été possible d'exprimer la grandeur radiative d'intérêt sous la forme d'un polynôme des coefficients d'absorption et de diffusion restés inconnus tout le long des échantillonnages Monte Carlo. Les coefficients d'absorption et de diffusion apparaissent explicitement dans le polynôme. Ce polynôme est valable $\forall \kappa_\eta + \sigma_\eta \leq \hat{\beta}_\eta$.

Les coefficients $\bar{a}_{j,k}$ du polynôme obtenu par MCS dépendent du milieu étudié, du coefficient d'extinction global $\hat{\beta}_\eta$, de la probabilité arbitraire de diffusion $\tilde{P}_{s\eta}$ et de la loi de Planck. Si $\hat{\beta}$ est défini comme majorant de $\kappa_\eta + \sigma_\eta$ sur tout le spectre et si \tilde{P}_s est choisie indépendante du nombre d'onde et si le milieu est isotherme, alors les coefficients $\bar{a}_{j,k}$ ne dépendent pas du nombre d'onde. Une seule simulation MCS est réalisée pour obtenir un polynôme défini sur toute la partie du spectre où $\kappa_\eta + \sigma_\eta \leq \hat{\beta}$. Si l'une de ces conditions n'est pas respectée, les coefficients $\bar{a}_{j,k}$ dépendront de η et une simulation MCS devra être réalisée pour chaque nombre d'onde.

Le schéma de la figure 2.16 résume le fonctionnement de l'algorithme MCS dans le cas d'un milieu homogène absorbant, émettant, diffusant, en conservant les coefficients d'absorption et de diffusion comme grandeurs symboliques. Pour chaque i -ème échantillonnage, l'algorithme symbolique consiste à compter le nombre de collisions nulles $j \in \{0; \dots; N_{\text{cn},i}\}$ et le nombre de diffusions $k \in \{0; \dots; N_{\text{sca},i}\}$ jusqu'à ce que le chemin optique quitte le milieu. A la fin des N_{mc} échantillonnages, les coefficients $\bar{a}_{j,k}$ sont estimés grâce à l'équation 2.43.

Grâce à l'algorithme Symbolique, il est possible d'exprimer $L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)$ sous la forme d'un polynôme dans lesquels les coefficients d'absorption et de diffusion apparaissent explicitement. Nous pouvons ainsi calculer avec ce polynôme $L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)$ dans l'espace des paramètre κ_η et σ_η .

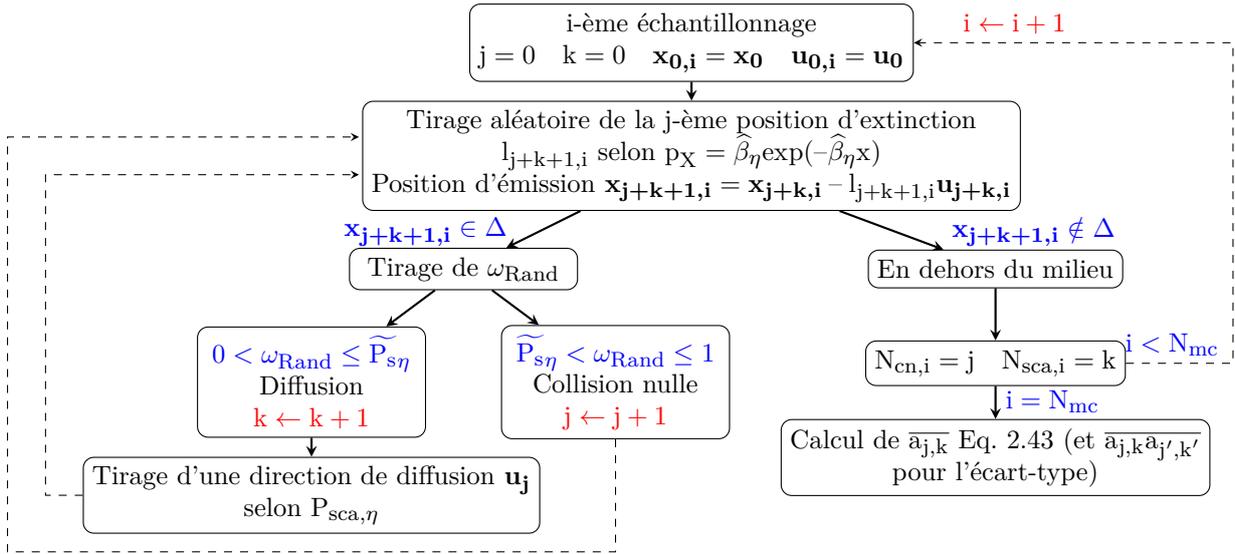


Figure 2.16 – Algorithme MCS avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant diffusant à haute température". Les coefficients d'absorption et de diffusion sont conservés comme grandeurs symboliques.

Pour illustrer un exemple de polynômes que nous pouvons obtenir grâce à MCS, reprenons le cas d'étude décrit dans la sous-section 1.3.1 en considérant le milieu isotherme. La luminance $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ dépend des coefficients d'absorption κ_η et de diffusion σ_η qui sont les paramètres symboliques de la simulation MCS. Le milieu étant isotherme à la température T , nous nous intéressons au facteur d'émission $F_\eta = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{B_\eta(T)}$. Le coefficient d'extinction global $\hat{\beta}_\eta$ sera fixé à 10 cm^{-1} et la probabilité arbitraire de diffusion $\tilde{P}_{s\eta} = 0,5$. **Une seule** simulation pour $N_{\text{mc}} = 10^5$ sera réalisée en gardant κ_η et σ_η inconnus. La fonction de phase est supposée isotrope. Le milieu a pour dimensions $L_x = 1 \text{ cm}$ et $L_y = L_z = 10 \text{ cm}$

Dans cette configuration, le nombre maximal de collisions nulles et de diffusions observé sur tous les i échantillonnages Monte Carlo est $j_{\text{max}} = 140$ pour les collisions nulles et $k_{\text{max}} = 154$ pour les diffusions. Un évènement de diffusion ou de collision nulle a eu lieu en comparant un nombre aléatoire tiré uniformément entre 0 et 1 avec la probabilité arbitraire $\tilde{P}_{s\eta}$ égale à 0,5 ici : il y a autant de chance d'avoir une collision nulle qu'une diffusion.

Les coefficients du polynôme obtenu avec cette configuration sont représentés en échelle logarithmique sur la figure 2.17. Ceux-ci sont compris entre 0 et 1. Une telle représentation graphique fournit une information sur la répartition des fortes contributions à l'estimation du facteur d'émission. Nous pouvons remarquer que les contributions sont réparties de manière quasi-symétrique par rapport à la diagonale $j = k$. Cette répartition est due au choix de la probabilité arbitraire de diffusion $\tilde{P}_{s\eta} = 0,5$: le libre parcours a autant de chance de subir une diffusion (contribution k) que de subir une collision nulle (contribution j).

Le polynôme obtenu par MCS pour modéliser le facteur d'émission du milieu étudié fait

apparaître les coefficients d'absorption et de diffusion de manière explicite. Dans une démarche d'inversion où nous cherchons à identifier κ_η et σ_η , une seule simulation a permis d'exprimer le facteur d'émission dans l'espace des paramètres. Il est alors possible de générer des iso-lignes (ou iso-valeurs) du facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma_\eta$ comme illustré sur la figure 2.18. Une iso-ligne correspond à tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma_\eta)$ qui reproduisent une valeur donnée du facteur d'émission. Sur la figure 2.18, une seule simulation MCS a permis de représenter toutes les iso-lignes en trait plein. A titre de comparaison, les résultats fournis par un algorithme MCC sont illustrés avec des croix où chaque croix correspond à une simulation MCC pour un couple $(\kappa_\eta; \sigma_\eta)$ donné.

Supposons que nous ayons à disposition une mesure du facteur d'émission à un nombre d'onde donnée, par exemple $F_{\eta, \text{mes}} = 0,5$. D'après l'ETR résolue par MCS en prenant $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,5$ et $\widehat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$, tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma_\eta)$ qui donnent $F_{\eta, \text{mes}} = 0,5$ sont représentés sur l'iso-ligne quasi-verticale en vert ayant pour abscisse $\kappa_\eta \simeq 0,5 \text{ cm}^{-1}$. Il est alors possible d'avoir de l'information sur l'identification du coefficient d'absorption κ_η . Aucune information ne peut être tirée sur l'identification du coefficient de diffusion car cette iso-ligne est quasi-verticale.

Supposons maintenant que la mesure du facteur d'émission donne 0,9. Tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma_\eta)$ qui donnent un facteur d'émission de 0,9 sont localisés sur l'iso-ligne en rouge, à savoir $\kappa_\eta \geq 2 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma_\eta \geq 0 \text{ cm}^{-1}$. Dans ce cas, peu d'informations sur l'identification de κ_η et σ_η peuvent être tirées.

Le polynôme obtenu en un seul calcul grâce à MCS fournit une représentation graphique qui peut être utilisée pour l'analyse de l'identification des propriétés radiatives. Les analyses inverses menées avec MCS seront reprises dans les chapitres 4 et 5.

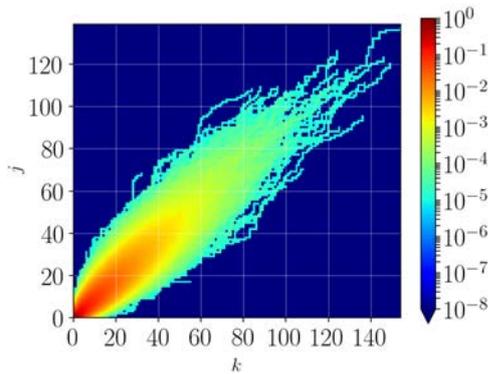


Figure 2.17 – Représentation graphique des coefficients $\overline{a_{jk}}$.

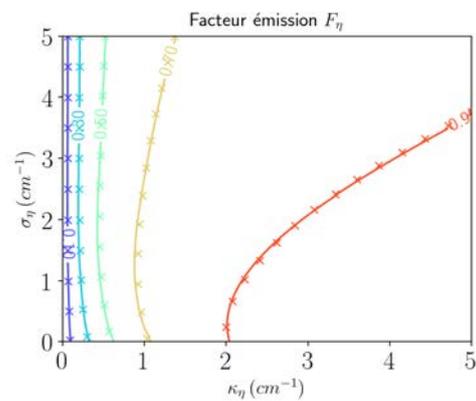


Figure 2.18 – Iso-lignes du facteur d'émission.

Le choix d'une probabilité arbitraire de diffusion $\widetilde{P}_{s\eta}$ doit être effectué pour suivre soit un chemin de diffusion, soit un chemin de collision nulle. Nous allons à présent évaluer l'impact de ce choix sur la construction du polynôme et l'estimation de la luminance.

Dans l'algorithme Monte Carlo Classique avec collisions nulles dans lequel les coefficients d'absorption et de diffusion sont connus, nous avons introduit dans l'approche *energy partitioning* une probabilité de diffusion $P_{s,\eta}$ qui respecte le ratio du nombre de diffusions sur le nombre total de collisions (équation 2.24) :

$$P_{s,\eta} = \frac{\sigma_\eta}{\sigma_\eta + \gamma_\eta} = \frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}$$

Dans l'algorithme symbolique présenté ici, le coefficient de diffusion étant inconnu, nous avons dû introduire une probabilité arbitraire de diffusion $\widetilde{P}_{s\eta}$ de telle sorte à pouvoir suivre un chemin de diffusion ou un chemin de collision nulle. La définition d'une telle probabilité n'introduit pas de biais à condition de réaliser une infinité d'échantillonnages Monte Carlo ($N_{mc} = \infty$). Le nombre d'échantillonnages N_{mc} prenant une valeur différente de l'infini, un mauvais choix de $\widetilde{P}_{s\eta}$ peut poser des problèmes de convergence et une incertitude numérique. Cette incertitude numérique peut être explorée via l'écart-type dont le calcul par MCS est détaillé dans l'annexe A. Pour être consistant avec les statistiques en jeu, il faudrait que la probabilité arbitraire de diffusion $\widetilde{P}_{s\eta}$ prenne une valeur différente selon le coefficient de diffusion σ_η comme proposé pour la probabilité P_s .

Illustrons à présent l'influence du choix de la probabilité arbitraire $\widetilde{P}_{s\eta}$ sur l'estimation du facteur d'émission. Le coefficient d'extinction $\widehat{\beta}_\eta$ est fixé à 10 cm^{-1} . Sur la figure 2.19, le facteur d'émission obtenu pour $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ est tracé en fonction de σ_η pour différentes valeurs de $\widetilde{P}_{s\eta}$. Le facteur d'émission et son incertitude numérique obtenus par un seul calcul MCS sont représentés en trait plein et en pointillés. A titre de comparaison, le facteur d'émission obtenu par un algorithme MCC est également représenté avec des points (un point correspond à une simulation MCC).

Sur la figure 2.19a, la probabilité arbitraire de diffusion est $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,1$. Le polynôme obtenu par MCS est précis tant que le coefficient de diffusion est inférieur à $2,5 \text{ cm}^{-1}$ environ. Lorsque σ_η est supérieur à $2,5 \text{ cm}^{-1}$, le polynôme estime mal le facteur d'émission parce que le nombre de diffusions simulées est sous-estimé pour des valeurs élevées du coefficient de diffusion σ_η . Il faudrait plus de contributions de diffusion k dans les coefficients $\overline{a_{jk}}$ du polynôme. La barre d'incertitude (écart-type MCS) est minimale lorsque $\sigma_\eta = 0,9 \text{ cm}^{-1}$; cette valeur correspond à une probabilité $P_{s,\eta} = 0,1$. Dès lors que σ_η diffère de $0,9 \text{ cm}^{-1}$, l'écart-type MCS augmente. Nous remarquons aussi que l'écart-type ne parvient pas à inclure les résultats obtenus avec MCC, ce qui montre l'existence d'évènements rares [17], non-captés par l'écart-type MCS et liés au mauvais choix de $\widetilde{P}_{s\eta}$. Dans une démarche d'inversion, si le coefficient de diffusion que nous cherchons à identifier est supérieur à $2,5 \text{ cm}^{-1}$, $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,1$ est un mauvais choix et peut poser des problèmes de convergence.

Sur la figure 2.19c, le comportement opposé est observé. Le polynôme s'avère précis pour modéliser le facteur d'émission pour des grandes épaisseurs optiques de diffusion (ici lorsque $\sigma_\eta \geq 6,5 \text{ cm}^{-1}$), mais l'estime mal pour des faibles épaisseurs optiques de diffusion. Pour $\sigma_\eta < 6,5 \text{ cm}^{-1}$, le polynôme sur-estime le nombre de diffusions et l'écart-type MCS augmente en conséquence. L'écart-type est minimal lorsque $\sigma_\eta = 8,1 \text{ cm}^{-1}$, correspondant à une probabilité

"idéale" $P_{s,\eta} = 0,9$. L'écart-type ne parvient pas à inclure les résultats à cause de la présence d'évènements rares.

Enfin, sur la figure 2.19b, il semble que le facteur d'émission modélisé par le polynôme est reproduit fidèlement lorsque $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,5$. L'écart-type prend des valeurs raisonnables sauf lorsque σ_η est à l'extérieur de $[2; 7] \text{ cm}^{-1}$. En dehors de cet intervalle, une autre valeur de $\widetilde{P}_{s\eta}$ aurait été plus judicieuse comme nous venons de le voir sur les figures 2.19a et 2.19c.

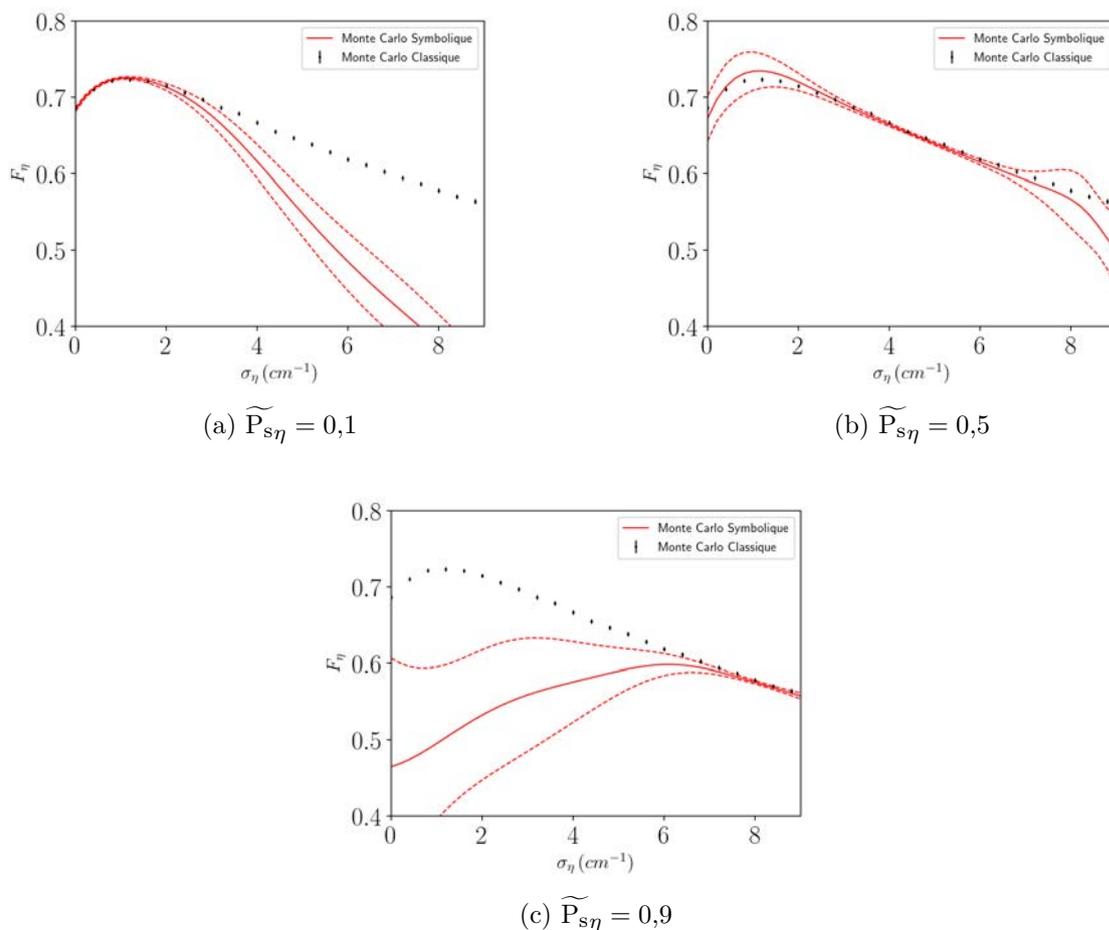


Figure 2.19 – Facteur d'émission estimé par MCS pour (a) $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,1$, (b) $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,5$ et (c) $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,9$. Les paramètres des simulations MCS sont $N_{\text{mc}} = 10^5$, $\widehat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ et $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$

La probabilité arbitraire $\widetilde{P}_{s\eta} = 0,5$ fournit des écarts-types satisfaisants et semble être un bon compromis entre les faibles et les grandes épaisseurs optiques de diffusion. Toutefois, une bonne convergence statistique n'est jamais garantie avec cette probabilité arbitraire, d'où l'intérêt de toujours étudier l'écart-type afin d'identifier les zones pour lesquelles le choix de $\widetilde{P}_{s\eta}$ est pertinent.

2.4 Fonction de phase comme symbole

Reprenons le cas d'étude décrit dans la sous-section 1.3.1. Les coefficients d'absorption et de diffusion ainsi que le champ de température sont supposés connus dans tout le milieu. La luminance partante du point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 pour un milieu homogène, absorbant, émettant, diffusant et anisotherme s'écrit (équation 2.12) :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0; g_\eta) = \int_0^\infty \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left((1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \omega_\eta \int_{4\pi} P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0; g_\eta) L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right)$$

Sans détailler à nouveau l'algorithme Monte Carlo correspondant à la résolution de cette équation, il convient de rappeler que la fonction de phase $P_{\text{sca}, \eta}$ est une fonction densité de probabilité utilisée dans l'algorithme pour générer des directions de diffusion \mathbf{u}_k . Lorsque la fonction de phase, dépendant du paramètre d'asymétrie g_η , est inconnue, il est impossible de générer des directions de diffusions quelque soit l'algorithme (classique ou symbolique) et quelle que soit l'approche (standard ou *energy partitioning*).

Pour pallier cette difficulté, introduisons une fonction de phase arbitraire \tilde{P}_η dans la formulation intégrale précédente comme Subramaniam et Menguc [92] l'ont proposé :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) = \int_0^\infty \beta_\eta \exp(-\beta_\eta l_1) dl_1 H(\mathbf{x}_1 \in \Delta) \left((1 - \omega_\eta) B_\eta(T(\mathbf{x}_1)) + \omega_\eta \left(\int_{4\pi} \tilde{P}_\eta(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0) \frac{P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0)}{\tilde{P}_\eta(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_0)} L_\eta(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1) d\mathbf{u}_1 \right) \right)$$

Quelle que soit l'approche utilisée (standard ou *energy partitioning*), les directions de diffusions \mathbf{u}_k sont tirées aléatoirement grâce à la probabilité arbitraire \tilde{P}_η . Dans le même principe que les échantillonnages préférentiels [17], le poids est multiplié par le terme $\frac{P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})}{\tilde{P}_\eta(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})}$ du fait de la récursivité due à la diffusion. Pour $N_{\text{sca}, i}$ diffusions lors du i -ème échantillonnage, le poids de Monte Carlo s'écrit ainsi :

$$w_i = H(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}, i}} \in \Delta) B(T(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}, i}})) \prod_{k=1}^{N_{\text{sca}, i}-1} \frac{P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})}{\tilde{P}_\eta(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})} \quad (2.44)$$

En moyennant ces poids pour tous les $i \in \{1, \dots, N_{\text{mc}}\}$ échantillonnages, la luminance est estimée par :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \left(H(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}, i}} \in \Delta) B(T(\mathbf{x}_{N_{\text{sca}, i}})) \prod_{k=1}^{N_{\text{sca}, i}-1} \frac{P_{\text{sca}, \eta}(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})}{\tilde{P}_\eta(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})} \right) \quad (2.45)$$

A ce niveau, l'expression de la luminance est constituée d'autant de termes que d'échantillonnages Monte Carlo. Toute la difficulté actuelle est de pouvoir exprimer $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$ comme une fonction ou un polynôme de $P_{\text{sca}, \eta}$. Cette fonction doit pouvoir être simple et pratique à mettre en oeuvre.

Fonction de phase linéaire anisotrope

Prenons dans un premier temps une fonction de phase linéaire anisotrope comme dans les travaux de Subramaniam et Menguc [92]. Pour rappel, cette fonction de phase est définie par :

$$P_{\text{sca,LA},\eta}(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k-1}) = \frac{1}{4\pi} (1 + A_\eta \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{u}_{k-1})$$

où $A_\eta = 3g_\eta$. En injectant la définition de la fonction de phase linéaire anisotrope dans l'expression générale du poids de Monte Carlo, l'équation 2.44 devient :

$$w_i = H(\mathbf{x}_{N_{\text{sca},i}} \in \Delta) B(T(\mathbf{x}_{N_{\text{sca},i}})) \prod_{k=1}^{N_{\text{sca},i}-1} \frac{1 + A_\eta \mathbf{u}_{k,i} \cdot \mathbf{u}_{k-1,i}}{\tilde{P}_\eta(\mathbf{u}_{k,i}, \mathbf{u}_{k-1,i})}$$

Le facteur $\frac{1}{4\pi}$ de la fonction de phase linéaire anisotrope a volontairement été omis puisque la fonction de phase arbitraire est également normalisée et admet un facteur multiplicatif $\frac{1}{4\pi}$. Comme son nom l'indique, la fonction de phase linéaire anisotrope est **linéaire** par rapport au facteur d'asymétrie A_η . Il est donc possible de ré-exprimer le poids w_i sous la forme d'un polynôme de A_η :

$$w_i = \sum_{k=0}^{N_{\text{sca},i}-1} a_{k,i} A_\eta^k \quad (2.46)$$

En moyennant les poids de Monte Carlo, la luminance sortante s'écrit :

$$\begin{aligned} L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) &\simeq \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \sum_{k=0}^{N_{\text{sca},i}-1} a_{k,i} A_\eta^k \\ &\simeq \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \sum_{k=0}^{k=\infty} H(k < N_{\text{sca},i}) a_{k,i} A_\eta^k \\ &\simeq \sum_{k=0}^{k=\infty} \left(\frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} a_{k,i} H(k < N_{\text{sca},i}) \right) A_\eta^k \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\boxed{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \sum_{k=0}^{k=\infty} \bar{a}_k A_\eta^k}$$

où :

$$\bar{a}_k = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} a_{k,i} H(k < N_{\text{sca},i}) \quad (2.48)$$

La luminance sortante s'écrit sous la forme d'un polynôme du paramètre d'asymétrie $A_\eta = 3g_\eta$. Un seul et unique calcul MCS a permis de calculer tous les coefficients \bar{a}_k (et $\overline{a_k a_k'}$ pour l'écart-type).

Afin d'illustrer un exemple de polynôme en A_η , reprenons le milieu décrit dans la sous-section 1.3.1 que nous supposons isotherme. Nous cherchons à exprimer le facteur d'émission

$F_\eta = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)}{B_\eta(T)}$ en fonction du paramètre d'asymétrie $A_\eta = 3g_\eta$ de la fonction de phase linéaire anisotrope. Nous venons de montrer que pour une fonction de phase normalisée arbitraire quelconque, il est possible d'exprimer la luminance sortante (et donc le facteur d'émission) sous la forme d'un polynôme du paramètre d'asymétrie :

$$F_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0; g_\eta) \simeq \sum_{k=0}^{k=\infty} \bar{a}_k A_\eta^k$$

Supposons que le milieu étudié est semi-infini d'épaisseur $L_x = 1$ cm, puis réalisons une seule simulation MCS afin d'exprimer le facteur d'émission en fonction de A_η . Nous fixons $N_{\text{MC}} = 10^5$, $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ et nous prendrons une direction \mathbf{u}_0 normale à la surface $x = L_x$. Enfin, la fonction de phase arbitraire que nous avons introduite, notée \tilde{P}_η , sera prise isotrope.

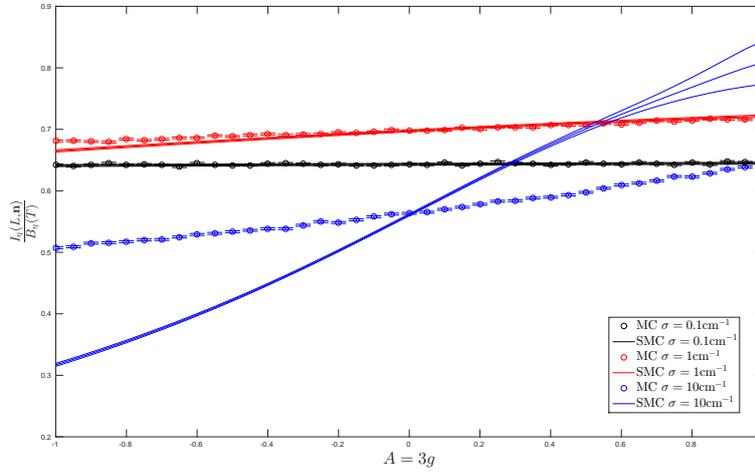


Figure 2.20 – Evolution du facteur d'émission en fonction du paramètre d'asymétrie de la fonction de phase linéaire anisotrope. Un trait plein correspond à une simulation MCS pour un couple $(\kappa_\eta; \sigma_\eta)$, tandis que chaque cercle a été obtenu avec un calcul MCC pour un triplet $(\kappa_\eta, \sigma_\eta; A_\eta)$ donné.

Une comparaison entre le facteur d'émission modélisé par le polynôme obtenu par MCS et les résultats d'une simulation Monte Carlo classique est illustrée sur la figure 2.20 en fonction du paramètre d'asymétrie A_η . Ici, trois simulations MCS ont été réalisées pour exprimer le facteur d'émission en fonction de A_η en prenant $\sigma_\eta = 0,1, 1$ et 10 cm^{-1} . Pour des faibles épaisseurs optiques de diffusion ($\sigma_\eta L_x = 0,1$), le polynôme obtenu par MCS est capable de reproduire fidèlement l'évolution du facteur d'émission en fonction de A_η . Pour des épaisseurs optiques de diffusion intermédiaires ($\sigma_\eta L_x = 1$), dès lors que $|A_\eta|$ devient grand (s'éloigne de 0), le polynôme obtenu par MCS reproduit mal l'évolution du facteur d'émission en fonction de A_η . L'erreur commise est plus accentuée pour des épaisseurs optiques de diffusion élevées ($\sigma_\eta L_x = 10$). De plus, les écarts-types MCS ne sont pas fiables en raison d'événements rares induits par un mauvais choix de la fonction de phase arbitraire (ici $\tilde{P}_\eta = \frac{1}{4\pi}$). En effet, lorsque $|A_\eta|$ devient grand et s'éloigne de 0, la probabilité arbitraire de diffusion obtenue avec $A_\eta = 0$ (isotrope) n'est plus adaptée.

Fonction de phase de Henyey-Greenstein

Prenons le cas de la fonction de phase de Henyey-Greenstein qui, pour rappel, est définie par :

$$P_{\text{sca,HG},\eta}(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k-1}) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g_\eta^2}{\left(1 + g_\eta^2 - 2g_\eta \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{u}_{k-1}\right)^{3/2}}$$

Dans ce cas, la fonction de phase de Henyey-Greenstein n'étant pas linéaire par rapport au paramètre d'asymétrie, il n'est plus possible de développer le produit des fonctions de phase de l'équation 2.45 en un polynôme de g_η . La fonction obtenue par MCS est constituée d'autant de termes non-linéaires que d'échantillonnages, et n'est en conséquence d'aucune utilité car trop compliquée pour être utilisée.

3 Développement d'une nouvelle approche Monte Carlo Symbolique basée sur les séries de polynômes orthogonaux

Nous venons de voir que les approches symboliques usuelles peuvent s'appliquer pour exprimer une grandeur radiative en fonction du coefficient d'absorption, du coefficient de diffusion ou du paramètre d'asymétrie de la fonction de phase si celle-ci est linéaire anisotrope. En revanche, ces approches ne s'appliquent pas à des fonctions de phase plus complexes ni à des paramètres dont le domaine d'intégration est dépendant (par exemple les paramètres géométriques). Pour surmonter cette impossibilité, nous proposons une nouvelle approche MCS [19] qui ouvre un champ large des possibilités. En effet, plusieurs paramètres symboliques peuvent être envisagés : des paramètres de fonction de phase plus complexes, des indices de réfraction ou même des paramètres géométriques. Dans cette section, nous illustrons cette nouvelle approche dans le cas des fonctions de phase.

Dans le cas d'une fonction de phase linéaire anisotrope (ou dans un cas plus général d'un polynôme en g de degré supérieur ou égal à 1), il est aisé d'obtenir une grandeur radiative sous la forme d'un polynôme du paramètre d'asymétrie (voir sous-section 2.4). Cependant, l'application des méthodes MCS à des fonctions de phase plus complexes impliquant des ordres élevés de g est compliquée à cause de problèmes numériques :

- L'introduction d'une probabilité arbitraire dans un algorithme MCS peut induire des problèmes de convergence numérique ;
- Les méthodes MCS revêtent un intérêt uniquement si l'expression de la grandeur radiative est pratique à mettre en oeuvre dans une démarche d'inversion ou d'analyse du problème physique.

Pour pallier cette difficulté, nous avons proposé nouvelle approche symbolique basée sur un développement en série de polynômes orthogonaux [19]. Dans cette approche, le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase est considéré comme une variable aléatoire définie dans

l'intervalle $[-1; 1]$ dont la fonction densité de probabilité sera notée $p_G(g_\eta)$ (également appelée "mesure").

3.1 Démonstration générale

Considérons un milieu diffusant quelconque de fonction de phase $P_{sca,\eta}$ ayant g_η comme paramètre d'asymétrie. Nous cherchons à exprimer une grandeur radiative L_η qui peut être une luminance, une transmittance, une réflectance, une densité de flux, etc., en fonction du paramètre d'asymétrie g_η qui sera le paramètre symbolique. La valeur que prend cette grandeur dépend du paramètre d'asymétrie g_η . De manière générale, cette grandeur s'écrit sous une forme intégrale :

$$L_\eta(g_\eta) = \int_{\Delta_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}; g_\eta) d\mathbf{x}$$

où f est une fonction qui se déduit de l'ETR. Cette grandeur radiative admet une valeur finie réelle $\forall g_\eta \in [-1; 1]$. Le processus aléatoire qui pour tout g_η associe la grandeur radiative $L_\eta(g_\eta)$ admet une variance réelle finie telle que :

$$\left| \int_{-1}^1 L_\eta(g') dg' \right| < \infty \quad \& \quad \left| \left(\int_{-1}^1 L_\eta(g') \right)^2 p_G(g') dg' \right| < \infty \quad (2.49)$$

où $p_G(g)$ est une mesure normée sur le domaine de définition de $g_\eta \in [-1; 1]$:

$$\int_{-1}^1 p_G(g') dg' = 1$$

D'après le théorème de Cameron-Martin [93], il est possible d'exprimer $L_\eta(g_\eta)$ en développement de séries :

$$L_\eta(g_\eta) = \sum_{n=0}^{n=\infty} a_n \Psi_n(g_\eta) \quad (2.50)$$

où $\Psi_n(g_\eta)$ sont des polynômes orthogonaux et a_n sont les coefficients associés. Avant de détailler la construction du polynôme, rappelons une définition qui sera utile aux prochains développements. Un polynôme orthonormé par rapport à une mesure f respecte le produit scalaire suivant :

$$\langle \Psi_n \Psi_m \rangle = \int_{-1}^1 \Psi_n(g') \Psi_m(g') p_G(g') dg' = h_n \delta_{nm} = \begin{cases} 0 & \text{si } n \neq m \\ h_n & \text{si } n = m \end{cases} \quad (2.51)$$

où $h_n = \langle \Psi_n \Psi_n \rangle$ est un coefficient normatif et δ_{nm} est le symbole de Kronecker. Les polynômes orthogonaux Ψ_n , la mesure associée f et les coefficients normatifs h_n sont connus, il reste juste à déterminer les coefficients a_n . Dans la suite, nous avons fait le choix de tronquer la série infinie de coefficients a_n à l'ordre N_p , d'où l'approximation :

$$L_\eta(g_\eta) \simeq \sum_{n=0}^{n=N_p} a_n \Psi_n(g_\eta) \quad (2.52)$$

N_p doit être choisi en trouvant le bon compromis entre la précision de l'approximation polynomiale et le coût de calcul lié à l'estimation des coefficients a_n .

Approche séquentielle. De manière générale, les coefficients associés a_n s'obtiennent en réalisant le produit scalaire de la grandeur radiative d'intérêt par le polynôme orthogonal associé :

$$\langle L_\eta \Psi_n \rangle = \int_{-1}^1 L_\eta(g') \Psi_n(g') p_G(g') dg' \quad (2.53)$$

La grandeur $L_\eta(g')$ est ensuite remplacée par son approximation polynomiale afin de faire apparaître la définition d'un produit scalaire :

$$\begin{aligned} \langle L_\eta \Psi_n \rangle &\simeq \int_{-1}^1 \sum_{m=0}^{m=N_p} a_m \Psi_m(g') \Psi_n(g') p_G(g') dg' \\ &\simeq \sum_{m=0}^{m=N_p} a_m \int_{-1}^1 \Psi_m(g') \Psi_n(g') p_G(g') dg' \\ &\simeq \sum_{m=0}^{m=N_p} a_m \langle \Psi_n \Psi_m \rangle \\ &\simeq \sum_{m=0}^{m=N_p} a_m h_n \delta_{nm} \\ &= a_n h_n \end{aligned} \quad (2.54)$$

Les coefficients a_n sont alors estimés à partir de l'intégrale suivante :

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{h_n} \int_{-1}^1 L_\eta(g') \Psi_n(g') p_G(g') dg' \\ &= \int_{-1}^1 p_G(g') \left(\int_{\Delta_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}; g') d\mathbf{x} \right) \frac{1}{h_n} \Psi_n(g') dg' \end{aligned} \quad (2.55)$$

Il est possible d'appliquer un algorithme Monte Carlo pour estimer chaque coefficient a_n à partir de l'équation 2.55. Pour cela, au i -ème échantillonnage, un paramètre d'asymétrie g'_i compris entre -1 et 1 est tiré aléatoirement selon la fonction densité de probabilité f . Ce paramètre d'asymétrie g'_i est utilisé pour l'estimation de la grandeur $L_\eta(g'_i)$ par le même algorithme Monte Carlo. Nous retenons ensuite le poids de l'estimation de la grandeur L_η avec le paramètre d'asymétrie g'_i noté

$$w(L_\eta(g'_i))$$

Enfin, le poids de Monte Carlo correspondant à l'estimation du coefficient a_n est donné par :

$$w_i(a_n) = \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) w(L_\eta(g'_i)) \quad (2.56)$$

Une estimation des coefficients a_n est donnée par :

$$a_n \simeq \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i(a_n) \simeq \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) w(L_\eta(g'_i)) \quad (2.57)$$

Cette approche dite séquentielle permet d'estimer chaque coefficient a_n par une méthode Monte Carlo. Elle nécessite la réalisation de $N_p + 1$ algorithmes Monte Carlo afin d'estimer tous les coefficients a_n pour $n \in [0; N_p]$.

Approche symbolique. Une seconde approche permet d'estimer tous les coefficients a_n en un seul calcul. Il suffit pour cela de retravailler l'expression de a_n donnée par l'équation 2.55 pour inclure la somme sur n dans le calcul intégral. L'astuce consiste à injecter l'expression de a_n (équation 2.55) dans le développement en séries de polynômes orthogonaux (équation 2.52) :

$$\begin{aligned} L_\eta(g_\eta) &\simeq \sum_{n=0}^{n=N_p} a_n \Psi_n(g_\eta) \\ &\simeq \sum_{n=0}^{n=N_p} \left\{ \int_{-1}^1 p_G(g') \left(\int_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}; g') d\mathbf{x} \right) \frac{1}{h_n} \Psi_n(g') dg' \right\} \Psi_n(g_\eta) \\ &\simeq \int_{-1}^1 p_G(g') dg' \left\{ \left(\int_{\Delta_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}; g') d\mathbf{x} \right) \sum_{n=0}^{n=N_p} \frac{1}{h_n} \Psi_n(g') \Psi_n(g_\eta) \right\} \end{aligned} \quad (2.58)$$

L'algorithme MCS correspondant à l'estimation de la grandeur radiative $L_\eta(g_\eta)$ consiste à générer N_{mc} paramètres d'asymétrie notés g'_i selon la fonction densité de probabilité p_G , puis à retenir pour chaque i -ème échantillon le poids suivant :

$$w_i = w \left(L_\eta(g'_i) \right) \sum_{n=0}^{n=N_p} \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) \Psi_n(g_\eta) \quad (2.59)$$

avec $w \left(L_\eta(g'_i) \right)$ le poids de l'intégrale qui permet d'estimer la grandeur radiative d'intérêt $L_\eta(g'_i)$ ayant g'_i comme paramètre d'asymétrie. Ce poids intermédiaire est facile à calculer car le paramètre d'asymétrie g'_i est connu puisqu'il a été généré de manière aléatoire selon p_G . Nous pouvons alors exprimer L_η en fonction de g_η :

$$\begin{aligned} L_\eta(g_\eta) &\simeq \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w \left(L_\eta(g'_i) \right) \sum_{n=0}^{n=N_p} \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) \Psi_n(g_\eta) \\ &\simeq \sum_{n=0}^{n=N_p} \left(\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w \left(L_\eta(g'_i) \right) \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) \right) \Psi_n(g_\eta) \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\boxed{L_\eta(g_\eta) \simeq \sum_{n=0}^{n=N_p} \bar{a}_n \Psi_n(g_\eta)}$$

où :

$$\bar{a}_n = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w \left(L_\eta(g'_i) \right) \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) \quad (2.61)$$

est une estimation par Monte Carlo du coefficient a_n associé au polynôme orthogonal Ψ_n . Nous avons démontré ici qu'il est possible de calculer tous les coefficients associés a_n (et donc une grandeur radiative comme une fonction du paramètre d'asymétrie g_η) en un seul calcul MCS : pour chaque i -ème échantillonnage, un paramètre d'asymétrie g'_i est généré aléatoirement selon la fonction densité de probabilité $p_G(g'_i)$. Pour ce paramètre d'asymétrie, nous retenons le poids de Monte Carlo correspondant à l'estimation de la grandeur radiative d'intérêt $L_\eta(g'_i)$. Ce poids est ensuite multiplié par

$$\sum_{n=0}^{N_p} \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i)$$

Enfin, en moyennant les poids de Monte Carlo pour tous les N_{mc} échantillonnages et en changeant l'ordre des sommes, nous obtenons une estimation \bar{a}_n de tous les coefficients a_n du développement en série de polynômes orthogonaux, et donc nous pouvons exprimer $L_\eta(g_\eta)$ sous la forme d'un polynôme de g_η .

L'algorithme MCS qui permet de définir une grandeur radiative quelconque en un développement de série de polynômes orthogonaux est résumé sur la figure 2.21. Cet algorithme est particulièrement simple puisqu'en comparaison avec un algorithme Monte Carlo classique (pas symbolique), nous n'avons fait qu'ajouter un tirage aléatoire de la variable symbolique.

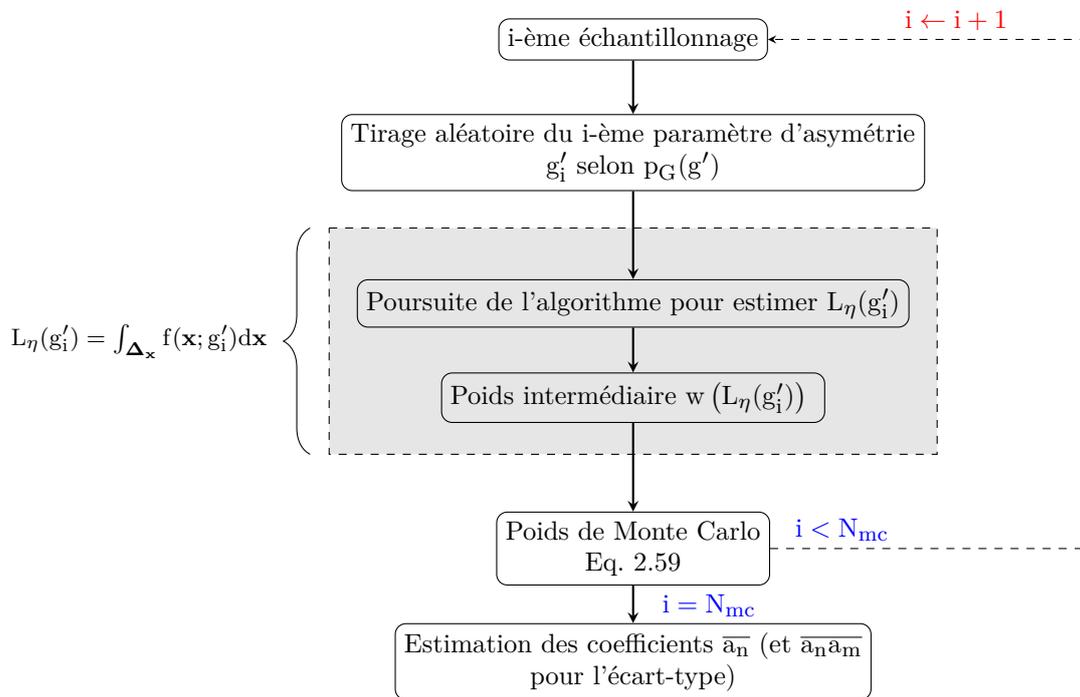


Figure 2.21 – Algorithme MCS générique correspondant au développement d'une grandeur radiative quelconque en une série de polynômes orthogonaux. Le paramètre d'asymétrie g_η est conservé comme grandeur symbolique. Un algorithme Monte Carlo classique est utilisé pour générer aléatoirement les chemins dans la partie colorée.

Les démonstrations ci-dessus sont générales et peuvent être appliquées pour modéliser n'importe quelle grandeur radiative en fonction du paramètre d'asymétrie g_η d'une fonction de phase $P_{sca,\eta}$ quelconque. Différentes familles de polynômes orthogonaux définis sur $[-1; 1]$ peuvent être utilisées, comme les polynômes de Legendre ou les polynômes de Tchebychev de première ou de seconde espèce. Le choix d'une famille de polynômes orthogonaux repose essentiellement sur la définition d'une mesure f et du coefficient de normalisation h_n . Le tableau 2.4 donne des exemples de mesure et de coefficient de normalisation pour les polynômes de Legendre et de Tchebychev.

Polynôme	Notation	p	h_n
Legendre	P	1/2	$\frac{1}{2n+1}$
Tchebychev 1 ^{ère} espèce	T	$\frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}$	1 si $n = 0$, 1/2 sinon
Tchebychev 2 ^{nde} espèce	U	$\frac{2\sqrt{1-x^2}}{\pi}$	1

Tableau 2.4 – Mesure p et coefficient normatif h_n de différentes familles de polynômes orthogonaux

3.2 Illustration avec les polynômes de Legendre

Pour illustrer quelques résultats que nous pouvons obtenir avec un développement en série de polynômes orthogonaux, considérons à nouveau le cas décrit dans la sous-section 1.3.1. Le milieu est supposé isotherme à la température T. Les coefficients d'absorption et de diffusion sont supposés connus dans tout le milieu. Seule la fonction de phase, représentée par son paramètre d'asymétrie g_η , est inconnue.

Fonction de phase de Henyey-Greenstein Pour ce cas d'étude, considérons la fonction de phase de Henyey-Greenstein de paramètre d'asymétrie g_η dont l'expression est rappelée ci-après :

$$P_{\text{sca,HG},\eta}(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k-1}, g_\eta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g_\eta^2}{(1 + g_\eta^2 - 2g_\eta \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{u}_{k-1})^{3/2}}$$

Nous cherchons à exprimer la luminance sortante $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0; g_\eta)$ comme une fonction du paramètre d'asymétrie g_η en utilisant le développement en série de polynômes orthogonaux. Prenons l'exemple des polynômes de Legendre notés P_n que nous tronquons à l'ordre N_p . Les polynômes de Legendre admettent comme mesure $p_G = \frac{1}{2}$ (fonction densité de probabilité uniforme sur $[-1; 1]$). Le coefficient normatif est $h_n = \frac{1}{2n+1}$. Avec la démonstration générale présentée ci-dessus, la luminance est donnée par le polynôme suivant :

$$L(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0; g_\eta) \simeq \sum_{n=0}^{n=N_p} a_n P_n(g_\eta) \tag{2.62}$$

Pour tous les résultats qui vont suivre, N_{mc} sera fixé à 10^5 . Pour construire le facteur d'émission en un développement en série de polynômes orthogonaux, nous réalisons **une** seule simulation en gardant g_η inconnu.

La première question qui se pose à ce niveau concerne le choix de l'ordre N_p du développement en série de polynômes orthogonaux. Pour évaluer l'impact du choix de N_p sur l'estimation du facteur d'émission, fixons dans un premier temps $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma_\eta = 5 \text{ cm}^{-1}$, correspondant à des épaisseurs optiques d'absorption $\tau_a = 1$ et de diffusion de $\tau_s = 5$. Pour le couple $(\kappa_\eta; \sigma_\eta)$

donné, nous réalisons 1 simulation MCS pour construire une fonction en g_η en prenant $N_p = 5, 10$ et 20 puis nous évaluons le facteur d'émission ainsi que son écart-type. Sur la figure 2.22 sont représentés les facteurs d'émission pour 3 ordres N_p du développement en série de polynômes de Legendre. Un trait plein est le résultat d'une seule simulation MCS tandis que chaque point a été obtenu en réalisant une simulation MC classique pour un paramètre d'asymétrie g_η donné. Les intervalles de confiance à 95% sont également représentés sur la figure 2.22. Les résultats montrent que l'approche symbolique basée sur le développement en série de polynômes de Legendre est capable de reproduire avec précision l'évolution du facteur d'émission en fonction du paramètre d'asymétrie quelque soit l'ordre N_p choisi. Cependant, lorsque l'ordre N_p devient grand, des phénomènes oscillatoires sont observés (figure 2.22c). Pour le problème radiatif présenté ici, un ordre N_p compris entre 5 et 10 semble être un bon compromis.

Les paramètres qui peuvent avoir une influence sur l'estimation du facteur d'émission à partir du développement en série de polynômes de Legendre sont l'ordre N_p des polynômes et les épaisseurs optiques d'absorption et de diffusion. Nous venons d'évaluer l'impact du choix de N_p . Intéressons nous à présent aux épaisseurs optiques d'absorption et de diffusion. Pour cela, nous fixons $N_p = 10$ puis nous faisons varier κ_η et σ_η . Premièrement, σ_η est pris égal à 5 cm^{-1} et nous réalisons 3 simulations MCS avec g_η comme paramètre symbolique, en prenant $\kappa_\eta \in \{0,1; 1; 5\} \text{ cm}^{-1}$ qui correspondent à des épaisseurs optiques $\tau_a \in \{0,1; 1; 5\}$. Sur la figure 2.23 sont représentés les facteurs d'émission pour les trois κ_η choisis. Pour les trois épaisseurs optiques d'absorption, le facteur d'émission modélisé par la série des polynômes de Legendre est reproduit fidèlement quel que soit le paramètre d'asymétrie g_η . Enfin, pour $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$, 3 polynômes en g_η ont été construits en faisant varier le coefficient de diffusion $\sigma_\eta \in \{1; 5; 50\} \text{ cm}^{-1}$ correspondant à des épaisseurs optiques de diffusion $\tau_s \in \{1; 5; 50\}$ (figure 2.24). Le facteur d'émission modélisé par la série des polynômes de Legendre est reproduit avec précision quel que soit le paramètre d'asymétrie g_η et ce pour toutes les épaisseurs optiques de diffusion considérées.

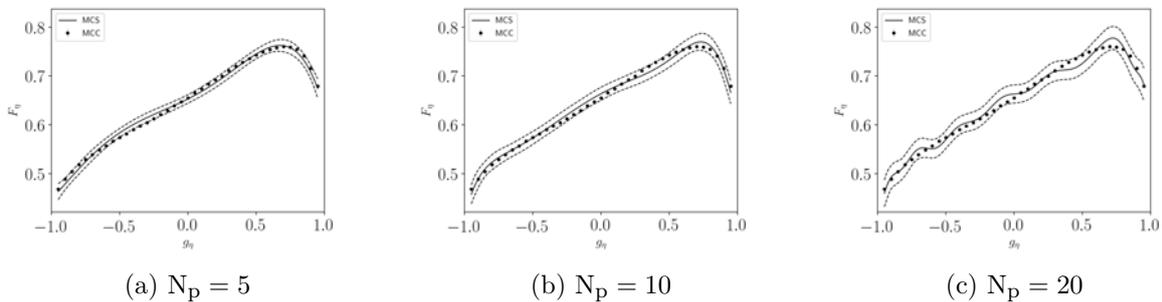


Figure 2.22 – Facteur d'émission estimé par MCS pour (a) $N_p = 5$, (b) $N_p = 10$ et (c) $N_p = 20$. Paramètres fixés : $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma_\eta = 5 \text{ cm}^{-1}$.

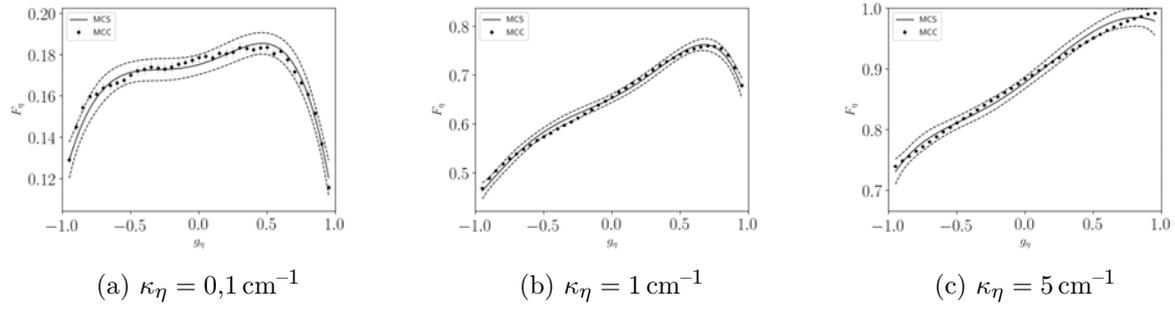


Figure 2.23 – Facteur d’émission estimé par MCS pour (a) $\kappa_\eta = 0,1 \text{ cm}^{-1}$, (b) $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ et (c) $\kappa_\eta = 5 \text{ cm}^{-1}$. Paramètres fixés : $\sigma_\eta = 5 \text{ cm}^{-1}$ et $N_p = 10$.

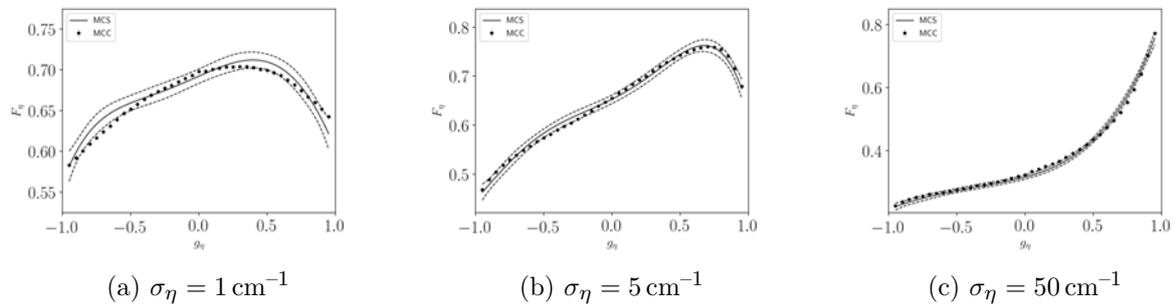


Figure 2.24 – Facteur d’émission estimé par MCS pour (a) $\sigma_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$, (b) $\sigma_\eta = 5 \text{ cm}^{-1}$ et (c) $\sigma_\eta = 50 \text{ cm}^{-1}$. Paramètres fixés : $\kappa_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $N_p = 10$.

La méthode MCS basée sur un développement en série de polynômes orthogonaux permet de pallier les possibles difficultés pour lesquelles aucune fonction simple des paramètres symboliques ne peut être obtenue avec les approches MCS usuelles. L’implémentation numérique et algorithmique d’une telle approche est directe, comparable aux méthodes Monte Carlo usuelles et n’introduit aucune difficulté supplémentaire car seules deux étapes sont ajoutées : une génération aléatoire du paramètre symbolique et un terme multiplicatif dans le poids de Monte Carlo.

Cette approche a été mise en oeuvre pour exprimer par exemple le facteur d’émission en fonction du paramètre d’asymétrie de la fonction de phase. Les résultats des figures 2.22, 2.23 et 2.24 montrent que dans le cas d’un développement en série de polynômes de Legendre en prenant g_η comme paramètre d’asymétrie, la méthode proposée prédit avec précision le facteur d’émission quelque soit g_η et quelles que soient les épaisseurs optiques d’absorption et de diffusion.

Extensions aux coefficients d’absorption, de diffusion et au paramètre d’asymétrie

Il est possible d’étendre la méthode MCS basée sur un développement en série de polynômes orthogonaux pour exprimer une grandeur radiative en fonction des coefficients d’absorption et de diffusion ainsi que le paramètre d’asymétrie de la fonction de phase. Lorsque κ_η , σ_η et g_η sont

les paramètres symboliques, la luminance sortante est approximée par le polynôme suivant :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \simeq \sum_{j=0}^{j=\infty} \sum_{k=0}^{k=\infty} \sum_{n=0}^{n=N_p} \overline{a_{j,k,n}} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta(1 - \widehat{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widehat{P}_{s\eta}} \right)^k \Psi_n(g_\eta) \quad (2.63)$$

où :

$$\overline{a_{j,k,n}} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} H(j+k < N_{cn,i} + N_{sca,i}) B_\eta(T(\mathbf{x}_{j+k+1,i})) \frac{1}{h_n} \Psi_n(g'_i) \quad (2.64)$$

Conclusions du chapitre

Nous avons présenté dans ce chapitre les différents développements MCS possibles pour résoudre l'ETR, tout en conservant certaines propriétés radiatives ou le champ de température comme inconnues. Lorsque le paramètre symbolique est le coefficient d'absorption et/ou de diffusion, l'utilisation des algorithmes à collisions nulles est primordiale pour s'affranchir de la nécessaire connaissance de l'épaisseur optique du milieu considéré (dans une démarche d'inversion, c'est justement l'épaisseur optique que nous cherchons à identifier à partir de mesures appropriées). Aussi, l'approche dite *energy partitioning* permet de construire une grandeur radiative comme un polynôme dans lequel les coefficients d'absorption et/ou de diffusion apparaissent explicitement.

Les approches MCS usuelles ne sont plus adaptées si le but est de conserver le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase comme grandeur symbolique, surtout si la fonction de phase est fortement non-linéaire. La fonction du paramètre d'asymétrie obtenue est constituée d'autant de termes non-linéaires que d'échantillonnages Monte Carlo et n'est donc d'aucune utilité car difficile à mettre en oeuvre. Pour pallier cette difficulté, nous avons proposé une nouvelle approche MCS basée sur un développement en série de polynômes orthogonaux qui permet d'exprimer une grandeur radiative quelconque en fonction du paramètre d'asymétrie g_η . Nous avons montré qu'une seule simulation MCS permet d'estimer tous les coefficients du développement polynomial, pour ainsi obtenir une grandeur radiative définie dans l'espace du paramètre g_η . Cette nouvelle approche est directe et facile à implémenter car elle n'introduit aucune difficulté supplémentaire comparée aux méthodes Monte Carlo usuelles. Cette nouvelle approche a été étendue pour exprimer en un seul calcul, une grandeur radiative en fonction des trois propriétés radiatives qui interviennent dans l'ETR (κ_η , σ_η et g_η). En raison du formalisme polyvalent donné ici, cette nouvelle approche MCS basée sur le développement en série de polynômes orthogonaux n'est pas limitée aux propriétés radiatives de l'ETR contrairement aux méthodes MCS habituelles. Par conséquent, il est possible de conserver certains paramètres (par exemple les paramètres de la fonction de phase de Mie ou l'indice de réfraction, paramètre de taille) ou certains paramètres géométriques comme grandeurs symboliques, et feront l'objet de futurs travaux.

L'intérêt d'utiliser MCS est de pouvoir "transformer" une équation intégro-différentielle en un polynôme dans lequel les propriétés radiatives symboliques apparaissent explicitement. Les différentes formes polynomiales que nous pouvons obtenir sont résumées dans le tableau 2.5. Il convient de rappeler que MCS n'est pas une méthode inverse, mais un calcul direct de l'ETR. L'avantage d'écrire l'ETR sous la forme d'un polynôme est de l'utiliser comme un outil d'analyse utile pour l'inversion. Dans une optique d'identification, MCS présente différents atouts dont :

1. La méthode MCS évite d'effectuer plusieurs simulations Monte Carlo puisqu'un seul calcul suffit pour définir une grandeur radiative dans tout l'espace des paramètres.
2. S'il est difficile voire impossible d'identifier les propriétés radiatives, MCS permet d'analyser et d'explorer les informations supplémentaires dont nous pouvons avoir besoin pour une meilleure identification (par exemple, quels types de mesure, quelles tables de mesures, quelles corrélations, etc.).
3. En sortie d'algorithme MCS, nous obtenons une fonction simple des paramètres à identifier que nous pouvons utiliser dans un algorithme d'inversion.

Nous montrerons dans les chapitres 4 et 5 comment utiliser les polynômes obtenus par MCS pour mener une analyse inverse complète afin d'identifier les coefficients d'absorption et de diffusion à partir de mesures appropriées.

Symbole	Approches	Polynômes
κ_η	<i>Energy partitioning</i> Collisions nulles	$\sum_{j=0}^{j=\infty} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \right)^j$
κ_η et σ_η	<i>Energy partitioning</i> Collisions nulles Probabilité arbitraire	$\sum_{j=0}^{j=\infty} \sum_{k=0}^{k=\infty} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta(1 - \widetilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s\eta}} \right)^k$
g_η	Polynômes orthogonaux	$\sum_{n=0}^{n=N_p} \overline{a}_n \Psi_n(g_\eta)$
κ_η , σ_η et g_η	<i>Energy partitioning</i> Collisions nulles Probabilité arbitraire Polynômes orthogonaux	$\sum_{j=0}^{j=\infty} \sum_{k=0}^{k=\infty} \sum_{n=0}^{n=N_p} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}_\eta} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta(1 - \widetilde{P}_{s\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s\eta}} \right)^k \Psi_n(g_\eta)$

Tableau 2.5 – Résumé des différentes formes polynomiales obtenues.

Chapitre 3

Etude expérimentale et mesures spectrométriques

Pour identifier les propriétés radiatives, il est nécessaire de mesurer une ou plusieurs grandeurs radiatives. Dans le cas d'un matériau à température ambiante, les grandeurs d'intérêt sont la transmittance et la réflectance, qui sont le rapport entre le flux radiatif transmis ou réfléchi sur un flux radiatif incident (référence). La mise en oeuvre de mesures de transmittance et de réflectance dans le cas d'échantillons portés à haute température est plus délicate car le flux radiatif émis par l'échantillon n'est plus négligeable, il est alors difficile de distinguer les flux radiatifs transmis ou réfléchis du flux radiatif émis. C'est la raison pour laquelle, dans le cadre de ce travail, la grandeur d'intérêt pour un matériau porté à haute température est le flux radiatif émis.

Rappelons ici que nous cherchons à développer une méthode d'identification basée sur les méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS) et à l'appliquer pour identifier les propriétés radiatives de matériaux hétérogènes. Ici, nous avons fait le choix de l'appliquer au Quartzel, famille de matériaux hétérogènes à base de fibres de Quartz produits et commercialisés par Saint-Gobain Quartz. Le Quartzel constitue un exemple d'application de la méthode MCS, l'objectif n'étant pas de fournir une banque de données de propriétés radiatives, mais de proposer un cas test pour illustrer le potentiel des méthodes MCS dans une démarche d'inversion à partir de mesures spectrométriques. L'application au Quartzel est intéressante à cause de son comportement spectral semi-transparent avec des zones du spectre dans lesquelles il est optiquement épais et dans lesquelles l'identification risque d'être difficile.

Ce chapitre décrit le principe d'une mesure directionnelle-hémisphérique à température ambiante puis présente les mesures réalisées sur deux isolants à base de fibres de Quartz (feutre faible densité et céramique). Le banc d'émission haute température développé au CETHIL [2, 12] fait l'objet d'une description dans la section 2 puis les principales mesures d'émission réalisées sur une céramique fibreuse sont présentées.

1 Mesure de transmittance et de réflectance spectrales directionnelles-hémisphériques à température ambiante

1.1 Principe des mesures

La réflectance (respectivement la transmittance) correspond au rapport entre le flux radiatif réfléchi (respectivement transmis) sur le flux incident dit de référence. Ce sont des grandeurs adimensionnées et extensives qui dépendent de l'épaisseur du matériau. La mesure d'une grandeur directionnelle-hémisphérique nécessite l'utilisation d'une sphère intégrante (figure 3.1) dont le principe de fonctionnement est décrit ci-après. Le rayonnement incident collimaté (directionnel) provenant de la source interne au spectromètre parvient directement sur l'échantillon dans le cas de la transmittance ou après une réflexion dans le cas d'une réflectance. Le rayonnement quittant l'échantillon dans toutes les directions subit de multiples réflexions à l'intérieur de la sphère pour finalement parvenir sur le détecteur.

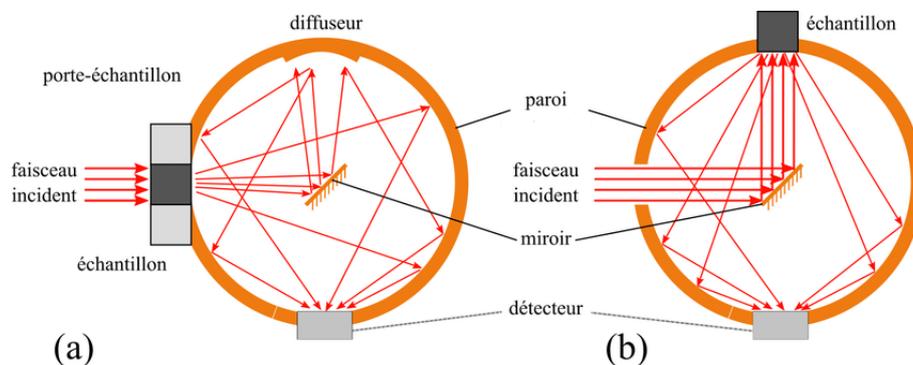


Figure 3.1 – Schéma de principe d'une sphère intégrante [6]. (a) Transmittance. (b) Réflectance.

La mesure de la transmittance directionnelle-hémisphérique est réalisée en plaçant l'échantillon sur le port d'entrée de la sphère. Le flux radiatif parvenant à l'intérieur de la sphère correspond donc au flux transmis par l'échantillon. Le faisceau transmis est ensuite redirigé vers un diffuseur à l'aide d'un miroir placé au centre de la sphère, ayant pour rôle de diffuser le rayonnement de manière isotrope. La réflectance directionnelle-hémisphérique est mesurée selon une configuration différente. Le faisceau incident pénètre librement dans la sphère puis est réfléchi par le miroir afin d'être redirigé vers l'échantillon. Le flux radiatif au sein de la sphère correspond donc au flux réfléchi par l'échantillon. Le revêtement intérieur diffusant de la sphère intégrante et du diffuseur présente une réflectivité très élevée dans l'infrarouge (supérieure à 99%) et permet d'obtenir une réflexion isotrope. Le flux reçu par le détecteur sous un angle solide restreint est ainsi représentatif du flux total transmis ou réfléchi par l'échantillon (la mesure sous un autre angle solide donnerait le même flux transmis ou réfléchi).

La sphère utilisée au CETHIL est commercialisée par Bruker sous la référence A562G avec un diamètre interne de 75 mm. Elle est revêtue d'*infragold* qui réfléchit plus de 99% du rayonnement infrarouge incident de manière diffuse. Elle est munie d'un détecteur DTGS (Sulfate de Tri-Glycine Deutériée) qui permet des mesures dans la gamme $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 5000 \text{ cm}^{-1}]$

($\lambda \in [2 \mu\text{m}; 15 \mu\text{m}]$). La sphère se place dans le compartiment échantillon du spectromètre Bruker IFS66v/S. Avec ce matériel et dans la configuration actuelle, la mesure de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques nécessite de réaliser deux mesures consécutives : une mesure de flux incident dit de référence puis une mesure de transmittance ou de réflectance. Cette action nécessite l'ouverture du compartiment échantillon du spectromètre pour agir sur la sphère (positionnement de l'échantillon, modification de l'orientation du miroir de renvoi), et l'air ambiant pénètre donc à l'intérieur du spectromètre. Les mesures n'étant pas réalisées sous vide, l'ouverture du spectromètre introduit des perturbations atmosphériques qui se traduisent par des pics d'absorption sur les spectres de transmittance et de réflectance mesurés (absorption le long du trajet source interne - détecteur).

Pour pallier cette difficulté, la sphère a été équipée d'un système de purge à air comprimé traité et asséché (de faibles concentrations en vapeur d'eau et dioxyde de carbone). De plus, la purge assure une concentration constante d'absorbants atmosphériques malgré le temps écoulé entre la mesure de référence et la mesure de transmittance ou de réflectance, et malgré l'ouverture du compartiment échantillon. La figure 3.2 illustre l'effet de la purge à air comprimé sur le spectre d'émission de la source interne du spectromètre exprimé en unité arbitraire. Sans purge, nous voyons apparaître sur le spectre en noir des pics d'absorption liés à la présence de vapeur d'eau et de dioxyde de carbone dans les bandes spectrales $\eta \in [1284 \text{ cm}^{-1}; 1995 \text{ cm}^{-1}]$, $\eta \in [2282 \text{ cm}^{-1}; 2396 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [3494 \text{ cm}^{-1}; 3976 \text{ cm}^{-1}]$. Après seulement 5 minutes de mise en route de la purge, ces bandes d'absorption sont nettement réduites comme nous pouvons le constater sur le spectre en rouge. Ce système de purge nous permettra par la suite d'obtenir des spectres de transmittance et de réflectance dans lesquels les éventuels pics seraient caractéristiques de l'échantillon et non de l'absorption atmosphérique.

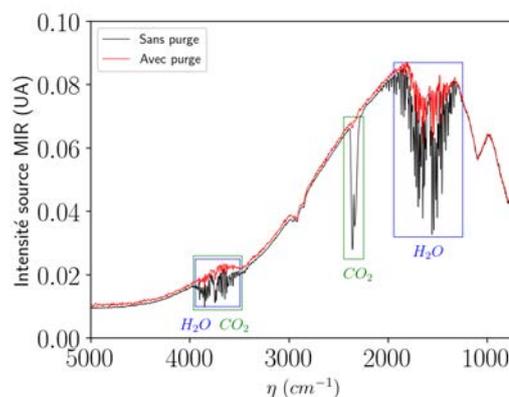


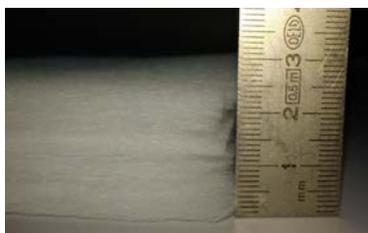
Figure 3.2 – Effet de la purge sur les spectres de la source interne du spectromètre mesurés par le détecteur DTGS de la sphère intégrante.

1.2 Matériau étudié : feutre fibreux faible densité

1.2.1 Description de l'échantillon

Le premier matériau caractérisé est un feutre faible densité Quartzel fabriqué et commercialisé par Saint-Gobain Quartz. Il s'agit d'un isolant performant pour des applications à haute température comme l'aérospatial, les fours ou les catalyseurs. Le feutre fourni par Saint-Gobain Recherche a une épaisseur approximative de 11 mm lorsqu'il n'est pas contraint. Un exemple de feutre Quartzel est présenté sur la figure 3.3. Selon la brochure des produits Saint-Gobain Quartz, le feutre a une masse surfacique de 100 g.m^{-2} et une masse volumique comprise entre 10 et 20 kg.m^{-3} . Les feutres sont produits à partir de fibres de Quartz de $9 \mu\text{m}$ de diamètre. Les fibres sont orientées aléatoirement dans des plans parallèles (voir figure 3.3b) et sont imprégnées avec un liant organique (alcool polyvinylique). La distribution des diamètres de fibre peut être représentée par une loi normale ayant $9 \mu\text{m}$ de moyenne et $2 \mu\text{m}$ de variance. La porosité de l'échantillon étudié est supérieure à 95% (fraction volumique de fibres inférieure à 5%).

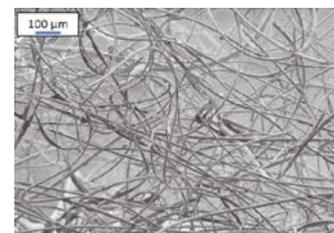
La difficulté majeure liée à la manipulation du feutre Quartzel est la détermination précise de son épaisseur. La solution retenue consiste à le comprimer entre deux fenêtres en ZnSe traitées avec un revêtement anti-réflexion dans la bande spectrale $\eta \in [830 \text{ cm}^{-1}; 3330 \text{ cm}^{-1}]$ ($\lambda \in [3 \mu\text{m}; 12 \mu\text{m}]$). L'épaisseur de l'échantillon est donc donnée par la distance qui sépare les deux fenêtres ZnSe. Les chemins optiques dans le spectromètre (de la source MIR jusqu'au détecteur DTGS de la sphère intégrante) imposent de positionner l'échantillon dans une fente à l'entrée de la sphère (configuration transmittance). Cette fente a une épaisseur de 8 mm. Le système qui doit contenir l'échantillon et les fenêtres ZnSe doit donc avoir une épaisseur maximale de 8 mm. Un porte échantillon polymère en acide polylactique (PLA) a été conçu et fabriqué au CETHIL par impression 3D spécialement pour pouvoir positionner un feutre Quartzel entre deux fenêtres ZnSe. Ce système est illustré figure 3.5. L'échantillon contraint ne peut donc avoir que 4 mm d'épaisseur au maximum. L'échantillon étudié est cylindrique de 24 mm de diamètre.



(a) Deux feutres Quartzel superposés.



(b) Feutre constitué de plans parallèles dans lesquels les fibres sont orientées aléatoirement.



(c) Micrographie (MEB Supra40) d'un feutre Quartzel [60].

Figure 3.3 – Exemple de feutres Quartzel fournis par Saint-Gobain Recherche.

1.2.2 Spectres de transmittance et de réflectance

Les mesures spectrométriques de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques ont été réalisées grâce à un spectromètre à transformée de Fourier et une sphère intégrante purgée avec de l'air comprimé ayant une faible concentration d'absorbants atmosphériques. Nous cherchons à mesurer la transmittance et la réflectance directionnelles-hémisphériques de l'échantillon Quartzel. Pour ce faire, il faut préalablement mesurer la transmittance et la réflectance du tri-couche (fenêtre-Quartzel-fenêtre) puis celles de chacune des fenêtres ZnSe séparément. Pour chaque face, les deux fenêtres ZnSe présentent les mêmes spectres de transmittance et de réflectance et aucune déviation n'a été constatée.

Pour remonter à la transmittance et à la réflectance de l'échantillon Quartzel contraint à partir des mesures sur le tri-couche et sur les fenêtres isolées, nous utilisons la méthode d'addition de couches proposée par Kubelka [94]. Soit la figure 3.4 qui représente le tri-couche fenêtre-Quartzel-fenêtre et qui servira de base pour les développements qui suivent. Notons "F₁" la fenêtre placée du côté du faisceau incident (source MIR), "Q" l'échantillon Quartzel et "F₂" la fenêtre placée du côté du faisceau transmis.

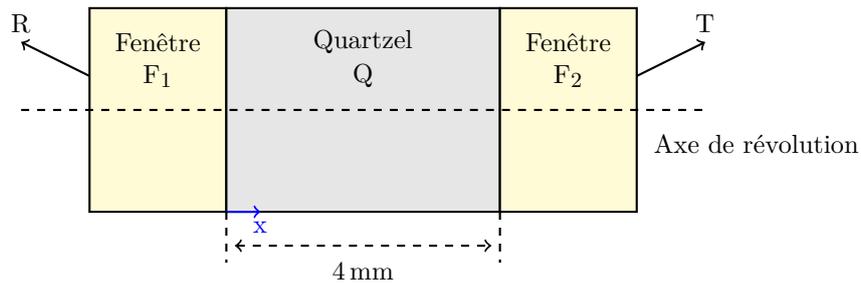


Figure 3.4 – Représentation schématique d'un système tri-couche.

La méthode d'addition de couches consiste, comme son nom l'indique, à agréger deux couches indicées 1 et 2 en prenant en compte l'interface. La transmittance $T_{1,2}$ et la réflectance $R_{1,2}$ d'un bi-couche s'écrivent :

$$T_{1,2} = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2} \quad \& \quad R_{1,2} = R_1 + \frac{T_1^2 R_2}{1 - R_1 R_2} \quad (3.1)$$

L'ajout d'une couche ne constitue aucune difficulté supplémentaire puisqu'il suffit d'additionner deux couches, puis d'agréger la troisième et dernière couche avec le premier bi-couche constitué. La transmittance $T_{1,2,3}$ et la réflectance $R_{1,2,3}$ d'un tri-couche sont :

$$T_{1,2,3} = \frac{T_1 T_{2,3}}{1 - R_1 R_{2,3}} \quad \& \quad R_{1,2,3} = R_1 + \frac{T_1^2 R_{2,3}}{1 - R_1 R_{2,3}} \quad (3.2)$$

En appliquant cette méthode au cas présenté ici, la transmittance et la réflectance du système tri-couche (fenêtre-Quartzel-fenêtre) sont :

$$T_{F_1,Q,F_2} = \frac{T_{F_1} T_{Q,F_2}}{1 - R_{F_1} R_{Q,F_2}} \quad \& \quad R_{F_1,Q,F_2} = R_{F_1} + \frac{T_{F_1}^2 R_{Q,F_2}}{1 - R_{F_1} R_{Q,F_2}} \quad (3.3)$$

où T_{Q,F_2} et R_{Q,F_2} sont déterminées en utilisant l'équation 3.1. Nous cherchons à déterminer la transmittance T_Q et la réflectance R_Q de l'échantillon Quartzel à partir des mesures de transmittance et de réflectance de chacune des fenêtres F_1 et F_2 et du système tri-couche $\{F_1,Q,F_2\}$. Il suffit donc de résoudre le système matriciel non-linéaire à deux inconnues et deux équations afin de déterminer T_Q et R_Q .

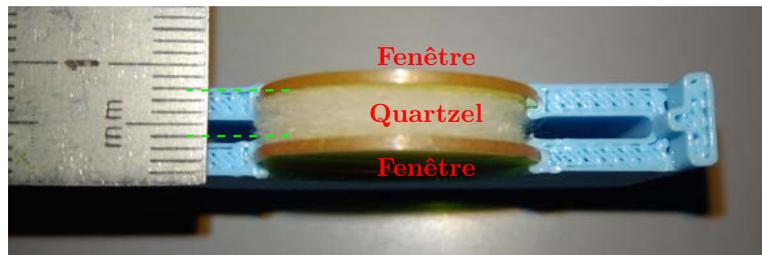


Figure 3.5 – Echantillon Quartzel contraint entre deux fenêtres ZnSe.

Les spectres de transmittance et de réflectance de l'échantillon décrit ci-dessus sont présentés figure 3.6 en fonction du nombre d'onde η [cm^{-1}] sur l'axe des abscisses inférieur et de la longueur d'onde $\lambda = 10^4/\eta$ [μm] sur l'axe des abscisses supérieur. Les spectres illustrés ont été obtenus en moyennant 100 mesures et sont donnés dans la gamme $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 3700 \text{ cm}^{-1}]$ ($\lambda \in [2,7 \mu\text{m}; 15 \mu\text{m}]$).

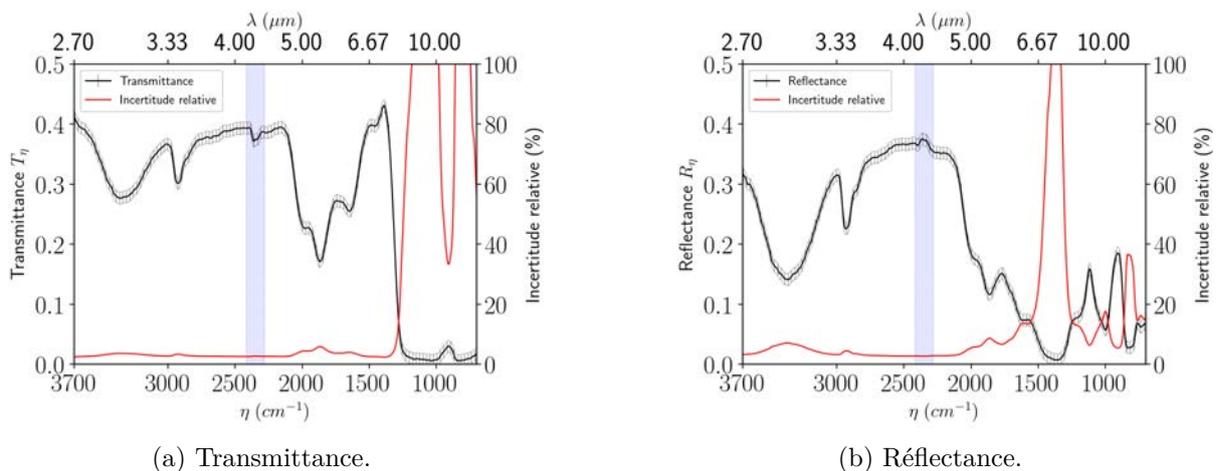


Figure 3.6 – Moyenne de 100 spectres de (a) transmittance et de (b) réflectance d'un échantillon de feutre Quartzel. La bande spectrale grisée correspond à la bande d'absorption du CO_2 entre $\eta \simeq 2220 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,5 \mu\text{m}$) et $\eta \simeq 2400 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,17 \mu\text{m}$).

Le spectre présente des zones où le comportement radiatif du matériau est différent. Le matériau est semi-transparent sur toute la gamme spectrale [$660 \text{ cm}^{-1}; 3700 \text{ cm}^{-1}$]. Pour des

nombres d'onde inférieurs à 1400 cm^{-1} , le matériau est optiquement épais et sa transmittance diminue pour tendre vers 0. Ce comportement spectral peut poser problème pour l'identification des propriétés radiatives (voir chapitre 4). Malgré toutes les précautions prises pour réduire les effets liés à l'absorption par la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone, un pic d'absorption centré sur $\eta \simeq 2350\text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,26\text{ }\mu\text{m}$) persiste et est caractéristique d'une variation de concentration de CO_2 entre la mesure de référence et la mesure en présence de l'échantillon. Les mesures de transmittance et de réflectance dans cette bande ne seront pas prises en compte dans le processus d'identification (chapitre 4). La détermination des incertitudes expérimentales est présentée ci-après.

1.2.3 Estimation des incertitudes de mesure

Pour déterminer les incertitudes liées aux mesures de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques à température ambiante, il faut dans la mesure du possible recenser toutes les sources d'erreurs liées aux mesures de spectres. Parmi ces sources d'erreurs, nous pouvons citer un changement de la température ambiante pendant la campagne de mesure, une variation de la concentration d'absorbants atmosphériques, un échauffement des optiques qui introduit un rayonnement parasite, etc. Ces erreurs induisent des incertitudes expérimentales sur la mesure.

La majorité des sources d'erreurs sont dépendantes et il est difficile d'estimer individuellement leurs incertitudes associées. Dans le cadre de ce travail, l'incertitude expérimentale est estimée de manière statistique à partir de la moyenne et de l'écart-type de 100 mesures et calculée pour chaque nombre d'onde. L'écart-type est ensuite multiplié par un facteur 2 afin d'avoir un intervalle de confiance de 95%. Ces mesures ont été réalisées sur une période s'étendant sur une semaine et à différents moments de la journée afin de prendre en compte la variation des conditions atmosphériques dans la salle. Nous considérons aussi que la moyenne de 100 spectres permet d'avoir une bonne estimation de l'incertitude de mesure et nous renseigne également sur la reproductibilité de la mesure de spectre. Une approche similaire a été proposée dans les travaux de Honnerová *et. al.* [95] pour évaluer l'émissivité de barrières thermiques à partir de mesures de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques à température ambiante.

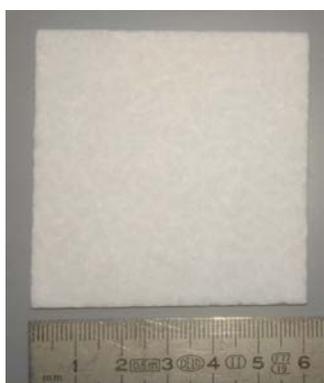
L'incertitude absolue étendue de l'échantillon Quartzel étudié a été estimée entre 0,006 et 0,01 suivant le nombre d'onde. Nous prendrons une incertitude absolue constante sur tout le spectre valant 0,01. L'incertitude relative sur les mesures de transmittance et de réflectance est représentée en rouge sur les figures 3.6a et 3.6b. Nous verrons dans le chapitre 4 comment prendre en compte ces incertitudes dans le processus d'identification.

1.3 Matériau étudié : céramique fibreuse faible densité

1.3.1 Description de l'échantillon

Le second échantillon fourni par Saint-Gobain Recherche et qui sera étudié dans cette thèse est une céramique rigide constituée de fibres de Quartz. Rappelons ici que la démarche consiste à conserver pour l'étude un matériau de la même famille que celui caractérisé à température ambiante précédemment mais qui permet des mesures à la fois à température ambiante et à haute température. La céramique Quartzel est un isolant performant pour des applications très haute température comme l'isolation des fours industriels ou la ré-entrée atmosphérique. Les plaques céramiques fournies par Saint-Gobain Recherche ont une épaisseur de 3 mm et une masse volumique d'environ $770 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ correspondant à une fraction volumique de fibres de 35% (porosité d'environ 65%). Les céramiques sont produites à partir du Quartz sous forme de fibres et de poudres frittées, conférant à la céramique un état de surface fragile et irrégulier (une précaution particulière doit être prise lors de sa manipulation pour éviter de détériorer l'échantillon). Une image d'une plaque de $60 \text{ mm} \times 60 \text{ mm}$ et de 3 mm d'épaisseur est donnée figure 3.7a.

Les plaques céramiques peuvent aisément être découpées et assemblées aux dimensions et aux applications visées. La difficulté majeure liée à la manipulation de la céramique Quartzel concerne la découpe de la plaque aux dimensions désirées car le matériau est fragile et la découpe peut altérer l'état de surface et les bords. Pour les échantillons étudiés dans la configuration de transmittance et réflectance directionnelles-hémisphériques, le faisceau incident fourni par la source interne du spectromètre est centré sur l'échantillon et a un diamètre de 12 mm. Le rapport de la section du faisceau incident sur la section carrée de l'échantillon est de 3% environ, nous pouvons négliger l'effet des états de surface à proximité des bords sur les mesures de transmittance et de réflectance.



(a) Exemple de plaque céramique Quartzel. Dimensions : $60 \times 60 \times 3 \text{ mm}^3$.



(b) Découpe d'échantillons de $11 \times 11 \times 3 \text{ mm}^3$ pour le chauffage au laser CO_2 .

Figure 3.7 – Photos illustratives de la céramique Quartzel.

1.3.2 Spectres de transmittance et de réflectance

Pour la céramique fibreuse, il n'y a aucune difficulté quant au contrôle de son épaisseur, sa rigidité est suffisante pour assurer un bon maintien : les fenêtres en ZnSe et le support mécanique ne sont donc pas nécessaire pour maintenir l'échantillon de céramique dans la sphère intégrante pour les mesures à température ambiante. Les spectres de transmittance et de réflectance d'un échantillon de 60 mm × 60 mm et de 3 mm d'épaisseur sont donnés figure 3.8. L'échantillon a été caractérisé systématiquement sur ses deux faces. Pour chaque face, des rotations autour de son axe de révolution ont été opérées pour mettre en évidence d'éventuels effets liés à l'orientation des fibres, et aucune dispersion sur les mesures de transmittance et de réflectance n'a été observée.

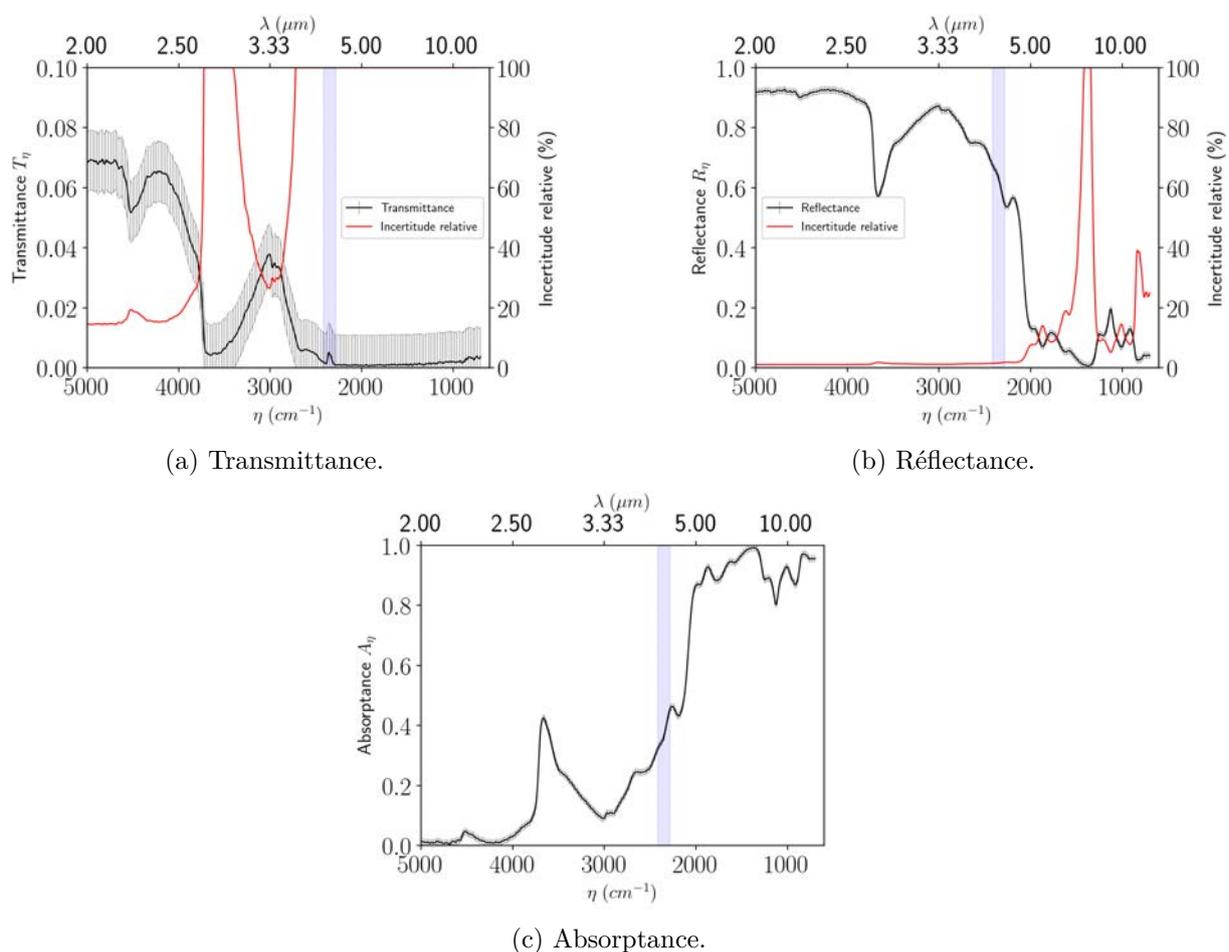


Figure 3.8 – Moyenne de 20 spectres de (a) transmittance et de (b) réflectance d'un échantillon de céramique Quartzel. (c) L'absorbance est calculée à partir de la Loi de Kirchhoff.

Les échantillons de céramique caractérisés sont optiquement épais dans la zone spectrale de caractérisation $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 5000 \text{ cm}^{-1}]$ ($\lambda \in [2 \text{ μm}; 15 \text{ μm}]$), la transmittance y est inférieure à 8%. Les échantillons ont une réflectance élevée pour des nombres d'onde supérieurs à 2000 cm^{-1} . Le caractère optiquement épais des échantillons peut éventuellement rendre difficile l'identification des propriétés radiatives de la céramique (voir chapitre 5). L'application de la

Loi de Kirchhoff permet d'obtenir l'absorptance directionnelle dont le spectre est donné figure 3.8c. L'échantillon de céramique Quartzel est très absorbant pour des nombres d'onde inférieurs à 1660 cm^{-1} . L'absorption est supérieure à 99% dans la bande $\eta \in [1347\text{ cm}^{-1}; 1407\text{ cm}^{-1}]$ ($\lambda \in [7,1\text{ }\mu\text{m}; 7,6\text{ }\mu\text{m}]$), avec un maximum à $\eta \simeq 1370\text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 7,3\text{ }\mu\text{m}$). Ce nombre d'onde, appelé nombre d'onde de Christiansen, est caractéristique du Quartz. Une attention particulière sera accordée à ce nombre d'onde dans la sous-section 2.3.

L'absorption élevée pour des nombres d'onde inférieurs à 1000 cm^{-1} sera exploitée pour permettre le chauffage des céramiques avec un laser CO_2 sur le banc d'émission spectrométrique développé au CETHIL. Le chauffage des céramiques Quartzel à haute température fera l'objet d'une description dans la section qui suit.

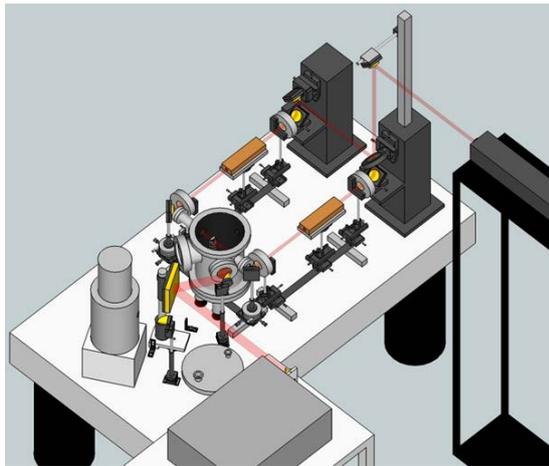
2 Mesures spectrales d'émission à haute température

Les deux matériaux (feutre et céramique) étudiés appartiennent à la même famille en termes de compositions en fibres de Quartz. Après les mesures préliminaires à température ambiante, la céramique est maintenant portée à haute température. Rappelons ici que la céramique a été sélectionnée dans le but de réaliser des mesures à haute température, ces mesures n'étant pas réalisables sur le feutre faible densité car fortement poreux (le laser CO_2 risque de le traverser). De plus, le liant organique (alcool polyvinylique) du feutre risque de brûler s'il est porté à haute température.

Nous présentons ci-dessous les différents éléments qui constituent le banc de mesure spectrométrique d'émission à haute température. Tous les calculs d'incertitudes de cette section sur la haute température sont détaillés dans l'annexe C.

2.1 Présentation du banc d'émission

Le banc d'émission du CETHIL a été initialement développé par Lopes [12] lors de ses travaux sur la mesure et la prédiction du facteur d'émission de matériaux semi-transparents à haute température. Ce premier pilote permettait des mesures directionnelles, mais ne comportait pas de spectromètre, seules des mesures à l'aide de filtres interférentiels étaient réalisées. Le banc a ensuite été repris et modifié par Le Foll [2] pour permettre le chauffage d'échantillons dans une enceinte sous-vide et éviter leur oxydation. Il a également introduit un spectromètre FTIR pour la mesure de spectres d'émission, perdant en revanche la possibilité de mesures directionnelles. Une photo et un schéma 3D du banc actuel sont donnés figure 3.9. Nous distinguons deux parties : un système optique permettant le chauffage d'échantillons (en amont de l'échantillon) et un système d'acquisition de spectres (en aval de l'échantillon).



(a) Représentation 3D du banc d'émission [2].



(b) Photo du banc d'émission.

Figure 3.9 – Banc d'émission du CETHIL : (a) schéma 3D et (b) photo.

2.1.1 Système de chauffage

Le chauffage des échantillons est assuré par un laser CO₂ pulsé et contrôlé par paliers de marque COHERENT modèle DIAMOND K300 d'une puissance maximale de 370 W. L'émission du laser est centrée autour du nombre d'onde $\eta_{\text{CO}_2} = 943,4 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda_{\text{CO}_2} = 10,6 \mu\text{m}$). Pour chauffer des échantillons dont la conductivité thermique est faible (inférieure à $0,3 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ pour la céramique Quartzel), un chauffage par rayonnement est plus judicieux comparé à un chauffage par contact conductif, d'autant que la céramique fibreuse Quartzel est optiquement épaisse et très absorbante au nombre d'onde du laser (voir figure 3.8c). Selon la nature des échantillons étudiés, leur température peut atteindre 2000 K. On peut s'approcher de l'isothermie de l'échantillon en le chauffant simultanément sur ses deux faces [12] grâce au schéma optique présenté sur la figure 3.10.

Une séparatrice 50/50 divise le faisceau laser en deux et permet d'obtenir la même puissance¹ sur chacune des voies. Les deux faisceaux sont redirigés vers l'échantillon à l'aide de deux systèmes comportant chacun deux miroirs plans (MP), deux lentilles convergentes en ZnSe (L) et un kaléidoscope (K). Toutes les optiques sont optimisées pour fonctionner au nombre d'onde du laser CO₂ : les lentilles (L1 à L4) sont traitées antireflet et les miroirs plans (MP1 à MP4) ont un revêtement de réflectivité d'environ 99% à $\eta_{\text{CO}_2} = 943,4 \text{ cm}^{-1}$.

Sur chaque voie, la lentille convergente L1 (respectivement L2) de distance focale 127 mm et de transmittance supérieure à 95% pour $\eta_{\text{CO}_2} = 943,4 \text{ cm}^{-1}$ permet de focaliser le faisceau à l'entrée du kaléidoscope K1 (respectivement K2). Le faisceau laser a une répartition Gaussienne de puissance en sortie de cavité (CL). Le kaléidoscope, guide d'onde à section carrée, a pour rôle

1. La puissance du faisceau laser du côté réfléchi de la séparatrice (numéros impairs) est légèrement inférieure en raison de la présence d'un miroir supplémentaire entre la séparatrice et le miroir plan MP1. Les calculs lors de la phase de conception du montage ont toutefois montré que ce léger déséquilibre n'entraîne pas de différence de température significative entre les deux faces de l'échantillon chauffé.

d'homogénéiser la répartition énergétique du faisceau laser par un processus de segmentation-recombinaison [96]. La section de sortie du kaléidoscope constitue l'objet, son image est ensuite imagée sur l'échantillon avec un grandissement de -1 grâce à une seconde lentille L3 (respectivement L4) de montage $2f + 2f = 4f$. L'inversion du sens de la tache est sans incidence sur le comportement optique puisque l'objet est carré avec une répartition homogène de la puissance.

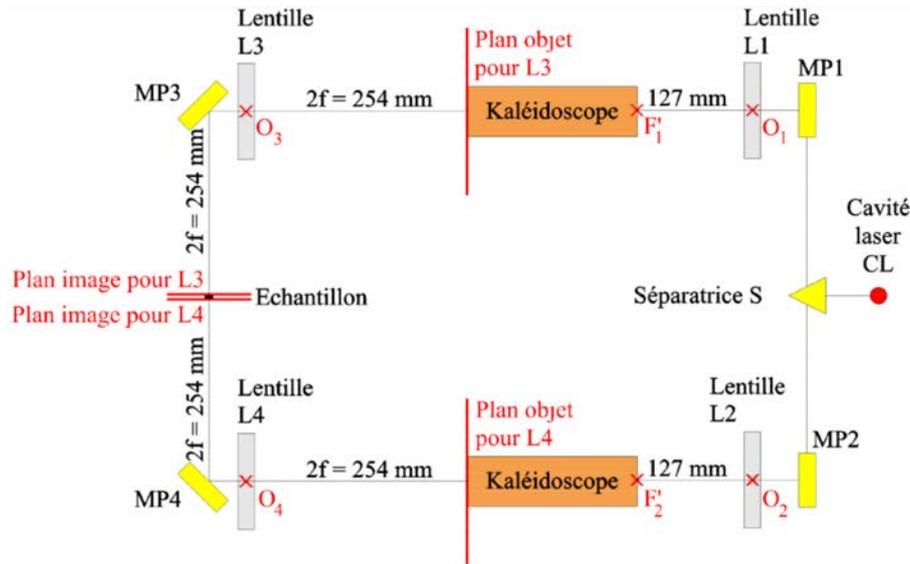


Figure 3.10 – Système optique de chauffage au laser CO₂ [2]. Vue de dessus.

Enfin, un porte-échantillon présenté sur la figure 3.11 a été spécialement conçu et réalisé au CETHIL afin de maintenir l'échantillon en place pendant son chauffage par le laser. Le porte-échantillon doit pouvoir assurer une garde thermique pour limiter les pertes par rayonnement par les faces qui ne sont pas soumises au laser CO₂. Pour cela, il doit avoir une conductivité thermique faible et une bonne tenue thermo-mécanique pour résister aux températures élevées de l'échantillon. La mullite (silicate d'aluminium) a été choisie car elle répond à ces deux critères. De plus, les échantillons de céramiques fibreuses ont une texture surfacique fragile (des grains de surface peuvent se détacher lors des manipulations). Il faut pouvoir les manipuler sans modifier leur état de surface par raclage ou par frottement. Pour pallier cette difficulté, le porte-échantillon conçu par l'atelier du CETHIL est constitué de deux pièces amovibles afin de positionner la céramique tout en limitant au maximum l'altération des surfaces soumises au faisceau laser.

Pour assurer un chauffage uniforme de l'échantillon, ce dernier doit avoir les mêmes dimensions que la section carrée en sortie du kaléidoscope (10 mm d'arête). Le porte échantillon illustré sur la figure 3.11 a été conçu de sorte à avoir une fente carrée de 10 mm × 10 mm. Pour pouvoir insérer l'échantillon dans son support en mullite, les échantillons caractérisés ont pour dimensions 11 mm × 11 mm × 3 mm (voir figure 3.7b). Pour les différentes puissances de chauffage laser, nous utiliserons des échantillons semblables issus et découpés de la même plaque afin d'être toujours dans les mêmes conditions opératoires. Pour chaque puissance de chauffage, un échantillon subit

un seul cycle thermique (une chauffe et un refroidissement).

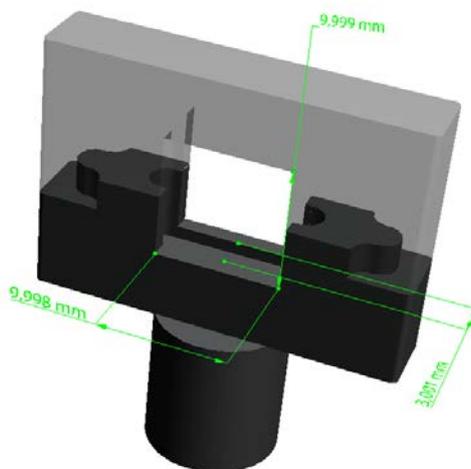


Figure 3.11 – Schéma de conception du porte échantillon en mullite.

2.1.2 Acquisition des spectres

Pour mesurer et exploiter le flux émis par l'échantillon porté à haute température, un système optique comportant un miroir plan (MP) et deux miroirs paraboliques hors-axe (MPOA) permet d'acheminer le rayonnement provenant de l'échantillon vers un spectromètre à transformée de Fourier (FTIR) muni d'un détecteur thermique DTGS (Sulfate de Triglycine) et d'un détecteur quantique MCT (alliage Mercure Cadmium Tellure). Le principe de fonctionnement d'un spectromètre FTIR est exposé en annexe B. Le bon fonctionnement du Michelson impose un faisceau collimaté à l'entrée de l'interféromètre. Un point au centre de l'échantillon est imagé à l'entrée du port d'émission du spectromètre comme illustré figure 3.12. Pour ce faire, un système comportant deux miroirs paraboliques hors axe (MPOA1-MPOA2) et un miroir plan (MP5) a été installé par Le Foll [2]. Le miroir MPOA1, avec un revêtement or et de distance focale 203,2 mm, est placé à une distance de 203,2 mm de l'échantillon afin de recueillir le rayonnement émis par une zone de 1 mm de diamètre sur l'échantillon. Le rayonnement émis par l'échantillon est ensuite réfléchi de manière collimatée vers le miroir MP5 qui à son tour le renvoie vers le miroir MPOA2 de distance focale 50,8 mm placé à l'entrée sur spectromètre. Le faisceau étant collimaté au niveau du miroir parabolique MPO2, ce dernier le focalise à l'entrée du spectromètre ce qui constitue l'image de la source (cible de quelques mm de diamètre à la surface de l'échantillon). L'utilité du miroir de renvoi MP5 sera présentée dans la sous-section 2.2.1.

Puisque le faisceau laser parvient en incidence normale sur l'échantillon, il n'est pas possible de réaliser une mesure d'émission dans la direction normale à l'échantillon. L'enceinte dans laquelle est placé l'échantillon permet d'effectuer une mesure à 30° de la normale à l'échantillon.

Les mesures d'émission d'un échantillon porté à haute température sont réalisées en régime permanent, le système de chauffage étant maintenu actif. Le régime permanent est atteint lorsque

la température affichée par un pyromètre monochromatique $1\ \mu\text{m}$ ne varie plus et lorsque le signal fourni par le détecteur du spectromètre est stabilisé. Lors du chauffage, nous souhaitons obtenir un échantillon isotherme en le chauffant par ses deux faces. Bien que celui-ci soit fortement absorbant au nombre d'onde du laser CO_2 , la réflexion du laser par l'échantillon peut être renvoyée vers l'interféromètre du spectromètre et perturber l'interférogramme et donc le spectre d'émission. C'est la raison pour laquelle deux hublots en CaF_2 traités pour ne pas transmettre le rayonnement pour des nombres d'onde inférieurs à $1000\ \text{cm}^{-1}$ ont été installés : l'un au niveau de l'enceinte à échantillon, le second sur le port d'entrée du spectromètre. Ainsi, la réflexion du laser sur l'échantillon est successivement filtrée par ces deux hublots. Toutefois, si l'interféromètre est perturbé par la réflexion laser malgré la présence des hublots en CaF_2 , un chauffage asymétrique par la face arrière (la face opposée à la face de mesure) sera préféré.

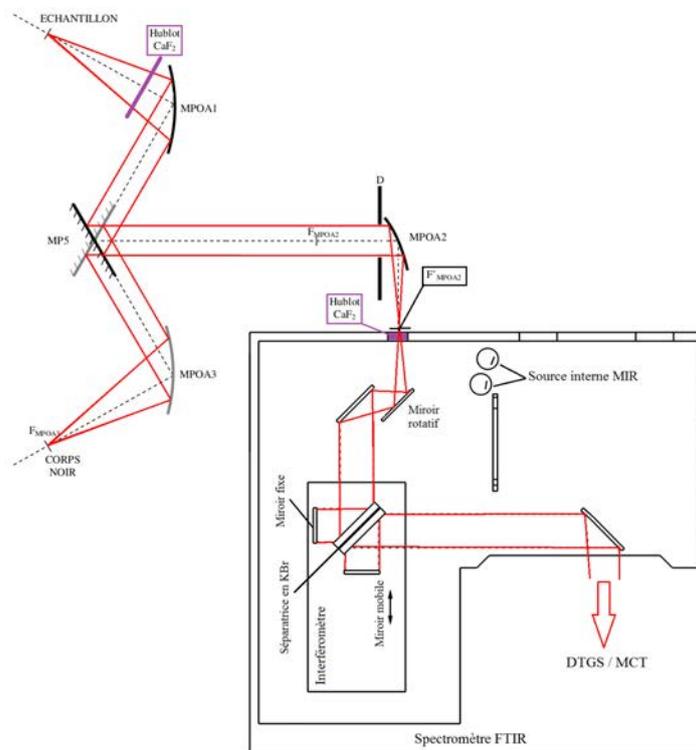


Figure 3.12 – Vue schématique des chemins optiques dans une configuration de mesure d'émission [2, 97]. Les échelles de longueur ne sont pas respectées.

2.2 Description du principe de la mesure d'émission

2.2.1 Etalonnage

Les spectres fournis par le FTIR sont exprimés en unité arbitraire, fonction du signal électrique délivré par les détecteurs. L'étalonnage consiste à déterminer la puissance spectrale (luminance) à partir du signal brut fourni par le détecteur et de la fonction d'appareil notée $H_{\text{app},\eta}$. La fonction d'appareil permet de convertir le signal S_η exprimé en unité arbitraire en une luminance

L_η exprimée en $\text{W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\text{cm}$:

$$L_\eta = \frac{S_{\text{ech},\eta}}{H_{\text{app,ech},\eta}} \quad (3.4)$$

La fonction d'appareil peut toutefois dépendre de la température. Par la suite, nous prendrons soin de vérifier qu'elle est indépendante de la température.

Le protocole d'étalonnage doit utiliser un signal connu dit de référence, qui dans le cas de mesures d'émission à haute température effectuées ici, est fourni par un corps noir de marque PYROX PY25 pouvant fonctionner jusqu'à 1650°C . Pour obtenir la fonction d'appareil de la voie échantillon, il faudrait positionner le corps noir à la place de l'échantillon puis mesurer le flux émis. Cela n'étant pas pratique à mettre en oeuvre, l'acquisition du flux émis par le corps noir est réalisée grâce au miroir plan MP5 qui, après rotation, permet de basculer entre les configurations "corps noir" et "échantillon" (voir figure 3.12). Puisque nous mesurons des flux émis par des échantillons et pour que l'étalonnage avec le corps noir soit cohérent, il faudrait que les chemins optiques "échantillon - spectromètre" et "corps noir - spectromètre" soient rigoureusement identiques. Cela se traduit par l'utilisation des miroirs paraboliques MPOA3 dans la voie "corps noir - spectromètre" et MPOA1 dans la voie "échantillon - spectromètre" qui doivent avoir les mêmes caractéristiques.

La fonction d'appareil intègre tout ce qui se trouve entre la source (échantillon porté à haute température ou corps noir) et le détecteur, à savoir la réponse spectrale de toutes les optiques internes et externes au spectromètre ainsi que l'atténuation par l'atmosphère. La fonction d'appareil utilisant la voie "corps noir - spectromètre" s'obtient en divisant le signal obtenu sur le corps noir à la température T_{CN} , noté $S_{\text{CN},\eta}(T_{\text{CN}})$, par la luminance théorique obtenue par la loi de Planck $B_\eta(T_{\text{CN}})$ à la même température T_{CN} :

$$H_{\text{app,CN},\eta} = \frac{S_{\text{CN},\eta}(T_{\text{CN}}) - S_{\text{parasite},\eta}}{B_\eta(T_{\text{CN}})} \quad (3.5)$$

où $S_{\text{CN},\eta}(T_{\text{CN}})$ est le signal réellement émis par le corps noir et $S_{\text{parasite},\eta}$ correspond à tous les signaux parasites qui ne proviennent pas directement du corps noir. La seule différence matérielle entre les voies "corps noir - spectromètre" et "échantillon - spectromètre" est la présence d'un hublot en CaF_2 au niveau de l'enceinte à échantillon. En conséquence, nous pouvons déduire la luminance émise par un échantillon en utilisant l'équation suivante :

$$\begin{aligned} H_{\text{app,ech},\eta} &= \text{Tr}_{\eta,\text{CaF}_2} H_{\text{app,CN},\eta} \\ L_\eta &= \frac{S_{\text{ech},\eta} - S_{\text{parasite},\eta}}{H_{\text{app,ech},\eta}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

2.2.2 Détermination de la fonction d'appareil

Pour obtenir la fonction d'étalonnage, nous réalisons des mesures de luminance sur le corps noir à différentes températures entre 800 et 1600°C comme présenté sur la figure 3.14a. La température du corps noir utilisée pour le calcul de la fonction d'appareil est fournie par un

pyromètre monochromatique $1\ \mu\text{m}$ (voir figure 3.13).

Une phase de mesures préliminaires a permis d'établir une correspondance entre les températures affichées par les deux thermocouples du corps noir et la température du pyromètre monochromatique $1\ \mu\text{m}$. Pour des températures allant de 800 à 1650 °C pour chacune des phases de chauffe et de refroidissement du corps noir, la température affichée par le thermocouple du régulateur (température de consigne) et celle déterminée par pyrométrie sont comparées. Le pyromètre monochromatique $1\ \mu\text{m}$ utilisé est de marque LAND modèle M1 étalonné par le LNE et optimisé pour déterminer la température de corps entre 600 et 1600 °C. Soient T_c la température affichée par les thermocouples du régulateur et T_{pyr} la température donnée par le pyromètre. La figure 3.13 illustre l'évolution de la température affichée par le pyromètre en fonction de la température de consigne donnée par le régulateur du corps noir. Pour calculer la fonction d'appareil, nous établissons une correspondance entre la température affichée par les thermocouples et la température obtenue par pyrométrie en utilisant la courbe de la figure 3.13. Pour s'assurer de la non-dispersion des mesures dans le temps, cette évolution a été comparée aux mesures réalisées dans la thèse de Le Foll [2] et on retrouve une excellente concordance entre les différentes mesures.

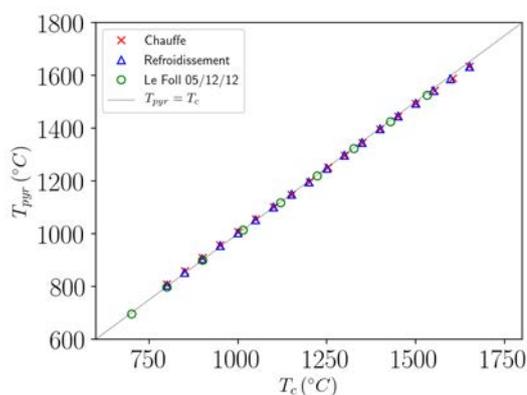


Figure 3.13 – Evolution de la température affichée par le pyromètre en fonction de la température de consigne du corps noir.

La seconde étape consiste à mesurer le signal parasite². Il correspond à tous les flux radiatifs émis, réfléchis et transmis par l'environnement et ne provenant pas directement du corps noir. Les mesures des signaux du corps noir et des signaux parasites sont ensuite comparées aux luminances théoriques données par la Loi de Planck. Enfin, en prenant en compte la transmittance du hublot en CaF_2 de l'enceinte à échantillon, l'application de l'équation 3.6 permet d'obtenir la fonction d'appareil de la voie échantillon pour différents niveaux de température (figure 3.14b).

2. Nous faisons l'hypothèse que les flux parasites dans les configurations corps noir et échantillon sont identiques.

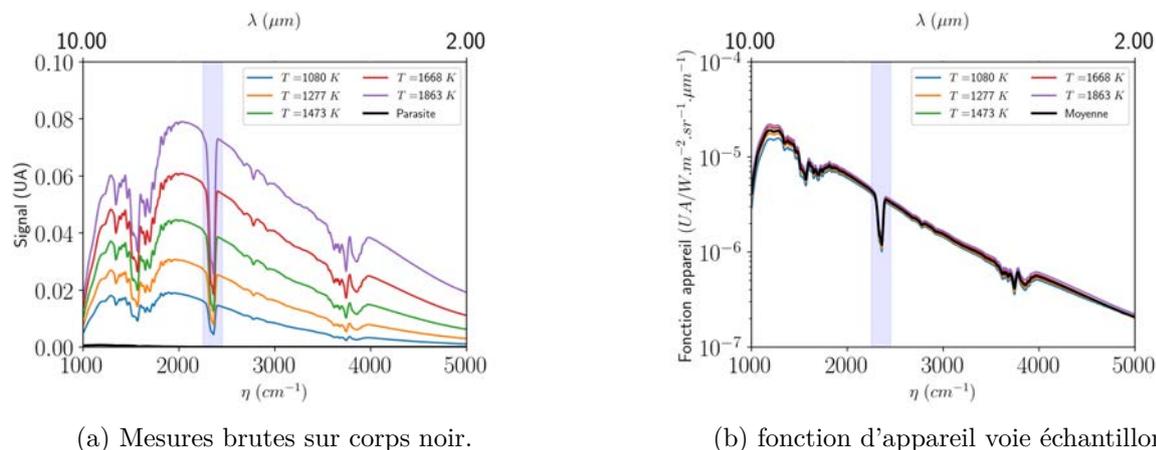


Figure 3.14 – (a) Mesures d'émission du corps noir et (b) fonction d'appareil de la voie échantillon incluant la transmittance du hublot en CaF_2 . Le détecteur utilisé est le DTGS.

A ce stade, il reste à vérifier que la fonction d'appareil est indépendante de la température. Nous constatons sur la figure 3.14b que la fonction d'appareil ne dépend que très légèrement de la température. Les écarts observés entre les fonctions d'appareil aux différentes températures sont dus à l'incertitude sur la température du corps noir : pour chaque nombre d'onde, l'écart maximal observé entre les fonctions d'appareil à différentes températures est de l'ordre de grandeur de la variation ΔH engendrée par l'incertitude ΔT_{CN} sur la température du corps noir. Nous pouvons alors considérer que la fonction d'appareil est indépendante de la température. Dans ce cas, nous pouvons utiliser la fonction d'appareil moyenne qui s'obtient en moyennant les fonctions d'appareil pour chaque température $T_i \forall i \in \{1; \dots; N\}$ où N est le nombre de mesures à la température T_i :

$$H_{\text{app,ech,moy},\eta} = \overline{H}_\eta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} H_{\text{app,ech},\eta}(T_{\text{CN},i}) \quad (3.7)$$

Les résultats présentés sur la figure 3.14 ont été obtenus avec le détecteur DTGS du spectromètre. Il s'agit d'un détecteur thermique qui a l'avantage d'être linéaire et ne nécessite pas d'être refroidi. Toutefois, les DTGS ont une détectivité plus faible que les détecteurs dits quantiques comme le MCT. Le détecteur MCT a une détectivité plus élevée et est capable de mesurer des signaux très faibles. Les inconvénients du détecteur MCT sont sa non-linéarité et la nécessité d'être refroidi par l'azote liquide (environ 77 K). Les mesures d'émission présentées dans ce chapitre ont également été réalisées avec le détecteur MCT. Les mesures brutes sur le corps noir et la fonction d'appareil de la voie échantillon obtenues avec le MCT sont données figure 3.15.

En raison de sa détectivité élevée, le MCT détecte un signal parasite important aux alentours de $\eta = 1000 \text{ cm}^{-1}$. Ce signal, mesuré en obstruant la cavité du corps noir, correspond à l'émission propre de l'environnement et/ou de la séparatrice de l'interféromètre à température ambiante (tout ce qui se trouve en amont de l'interféromètre sauf le corps noir). De plus, le détecteur MCT peut saturer au-delà d'une certaine valeur du flux incident. Enfin, nous pouvons remarquer que la fonction d'appareil obtenue avec le détecteur MCT dépend de la température³. Ces écarts ne sont

3. Pour l'étalonnage, une fonction d'appareil dépendant de la température n'est pas souhaitable.

pas dus aux incertitudes sur la mesure de la température du corps noir ni aux incertitudes sur le signal brut mesuré. Cette dépendance vis-à-vis de la température peut s'expliquer par la présence de sources radiatives (échauffement d'optiques) le long du trajet "corps noir - interféromètre" qui rayonnent et qui contribuent au signal mesuré. Or ce flux n'est pas détecté par le DTGS qui a une détectivité plus faible. Si la source radiative est intense, nous n'avons pas besoin d'utiliser un détecteur avec une détectivité élevée.

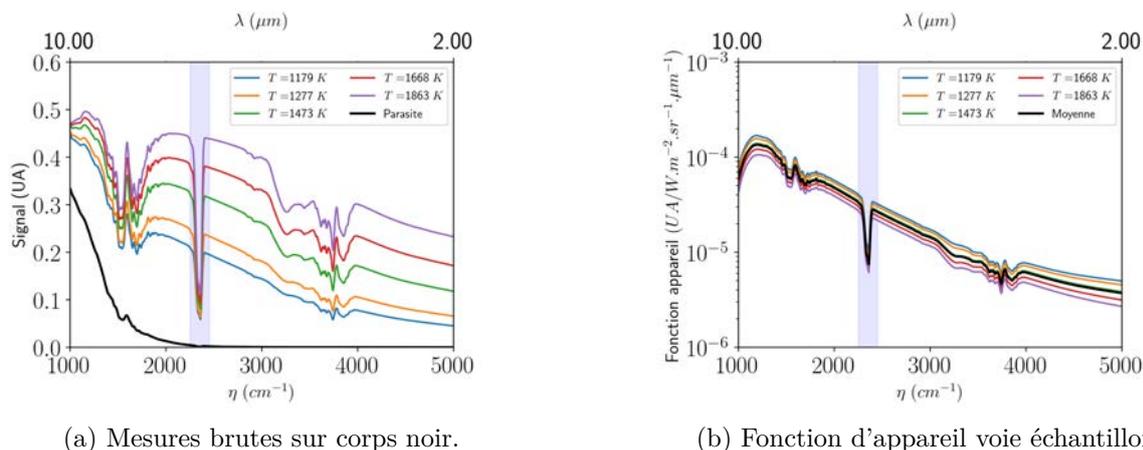


Figure 3.15 – (a) Mesures d'émission du corps noir et (b) fonction d'appareil de la voie échantillon incluant la transmittance du hublot en CaF_2 . Le détecteur utilisé est le MCT.

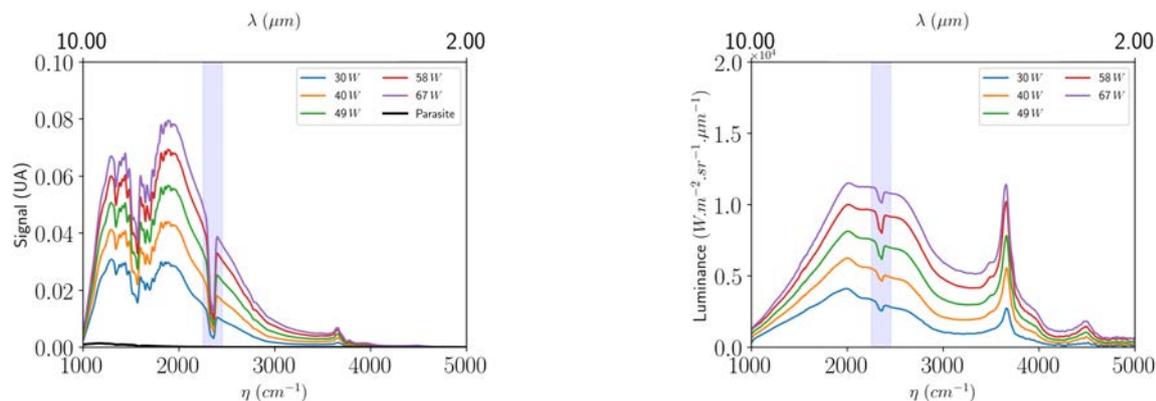
2.3 Mesures d'émission d'une céramique fibreuse en chauffage symétrique

Pour les différentes configurations de chauffage, nous adopterons les conventions suivantes. La face avant de l'échantillon correspond au côté sur lequel s'effectue la mesure du signal émis. Sur la figure 3.10, la face avant de l'échantillon est irradiée par le faisceau laser transmis par la séparatrice (optiques paires). La face arrière de l'échantillon correspond au côté opposé au spectromètre (optiques impaires). Pour chacune des configurations de chauffage avant ou arrière, l'échantillon est anisotherme. La face soumise au faisceau laser est à la température maximale. Enfin, le chauffage symétrique correspond au cas où l'échantillon est chauffé sur ses deux faces. Dans cette configuration, l'échantillon peut être considéré isotherme [12]. Lorsque l'échantillon est isotherme, il n'y a pas de transferts conductifs.

L'un des objectifs finaux étant d'identifier les propriétés radiatives d'un échantillon de céramique à haute température et de montrer que celles-ci peuvent dépendre de la température, la configuration qui nous intéressera ici est le chauffage symétrique car l'échantillon est isotherme. Le chauffage symétrique et le chauffage par la face avant imposent d'utiliser un hublot en CaF_2 . Toutefois, en fonction de la nature du matériau, nous pouvons être amenés à réaliser des mesures à des nombres d'onde inférieurs à 1000 cm^{-1} . Pour cela, il faut retirer le hublot en CaF_2 et seule la mesure d'émission en chauffage arrière est permise. Les différentes mesures réalisées sur la céramique Quartzel pour les différentes configurations de chauffage sont exposées ci-après.

2.3.1 Spectres d'émission

Pour cinq puissances de chauffage laser (30, 40, 49, 58 et 67 W en sortie de cavité laser), le flux émis par l'échantillon est collecté. Les niveaux du signal brut mesuré par le DTGS sont illustrés sur la figure 3.16a. Nous ne retenons ensuite que le signal réellement émis par l'échantillon en retirant le signal parasite. Enfin, le signal en unités arbitraires est converti en luminance par application de la fonction d'appareil moyenne. La luminance émise par les échantillons pour différentes puissances laser est illustrée sur la figure 3.16b. Nous remarquons sur la figure 3.16b le comportement spectral marqué de la céramique fibreuse avec deux pics d'émission situés, pour toutes les puissances aux alentours de $\eta = 3700 \text{ cm}^{-1}$ et de $\eta = 4500 \text{ cm}^{-1}$. Ces pics sont dus à la porosité de la céramique Quartzel qui induit la présence de groupes hydroxyles OH. En grande quantité, ces groupes OH contribuent aux phénomènes d'absorption pour des nombres d'onde supérieurs à 3000 cm^{-1} [36, 98]. En faible quantité (concentration inférieure à 20 ppm), ces pics ont un faible impact sur le spectre [99].



(a) Mesures brutes sur échantillon.

(b) Luminance émise calculée à partir de la fonction d'appareil moyenne.

Figure 3.16 – Emission d'une céramique Quartzel chauffée symétriquement.

2.3.2 Détermination de la température de l'échantillon

La céramique Quartzel est un matériau hétérogène constitué de fibres de Quartz avec une porosité d'environ 65% (fraction volumique de fibres d'environ 35%). Le cristal de Quartz (de structure cristalline α ou β) est un matériau diélectrique hétéropolaire qui a la particularité de présenter une fréquence dite de Christiansen à laquelle il se comporte comme un corps noir [100]. Bien que la fréquence de Christiansen soit une caractéristique du monocristal homogène, il est possible d'observer cette fréquence dans les matériaux hétérogènes constitués de fibres de Quartz. Il est alors possible d'obtenir la température de surface de l'échantillon par pyrométrie au point de Christiansen.

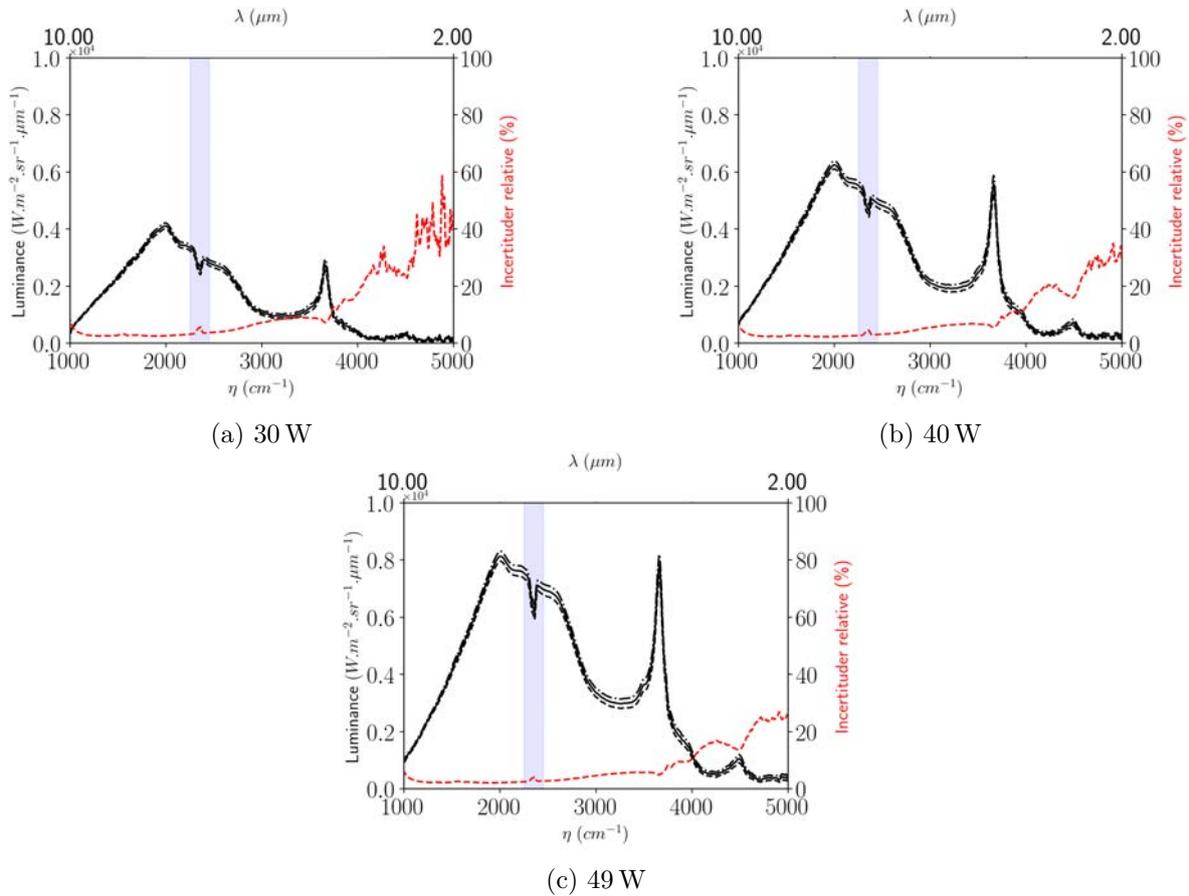


Figure 3.17 – Luminance d’une céramique Quartzel chauffée symétriquement pour différentes puissances de chauffage laser : (a) 30 W, (b) 40 W et (c) 49 W. Les courbes en pointillés noirs représentent $L_{\eta} \pm \Delta L_{\eta}$.

NOTE : Pyrométrie au point de Christiansen

La détermination de la température de surface est réalisée grâce à la pyrométrie à la fréquence de Christiansen en mesurant le flux sur la face avant. A cette fréquence, l’émission radiative du matériau est proche de celle du corps noir à la même température.

La pyrométrie au point de Christiansen est l’exploitation de l’effet Christiansen lorsqu’un des deux milieux est l’air ($n_1 = 1$ et $k_1 = 0$). L’interface optique entre deux milieux disparaît lorsque $m_1 = m_2$, c’est-à-dire $n_1 = n_2$ et $k_1 = k_2$. Dans le cas d’une interface séparant une céramique d’indice optique $m_{2,\nu}$ et l’air d’indice optique $m_{1,\nu} = 1$, le point de Christiansen d’une céramique correspond à la fréquence pour laquelle la partie réelle de l’indice optique de la céramique est proche de 1, et pour laquelle la partie imaginaire k_2 pour un diélectrique est suffisamment faible pour que la réflectivité à l’interface soit faible, mais suffisamment élevée pour que tout flux arrivant à la surface soit absorbé sur quelques centaines de microns comme pour un corps noir.

La particularité du point de Christiansen est qu’il dépend suffisamment peu de la température. Nous pouvons considérer dans nos applications que la fréquence de Christiansen

est indépendante de la température. L'effet Christiansen est directement lié aux mécanismes d'absorption dans l'infrarouge moyen [100]. La température de surface est calculée à partir de la luminance émise par l'échantillon à la fréquence de Christiansen notée $L_{\nu_{CH}}^{mes}$ en inversant la loi de Planck :

$$T = \frac{h\nu_{CH}}{k_B \ln \left(\frac{2h\nu_{CH}^3}{c^2 L_{\nu_{CH}}^{mes}} + 1 \right)} \quad (3.8)$$

où :

- $h = 6,6255 \cdot 10^{-34}$ J.s est la constante de Planck ;
- $k_B = 1,3805 \cdot 10^{-23}$ J.K⁻¹ est la constante de Boltzmann ;
- $c = \frac{c_0}{n}$ est la vitesse de propagation de la lumière dans le milieu.

A température ambiante, nous avons observé une plage de nombres d'onde dans laquelle l'absorption est supérieure à 99%. Au nombre d'onde de Christiansen, l'échantillon se comporte comme un corps noir. Autrement dit, le rapport entre la luminance émise et la loi de Planck à ce nombre d'onde doit être maximal et égal à 1. Ce rapport, appelé facteur d'émission, sera présenté et déterminé plus avant. En procédant ainsi, le nombre d'onde pour lequel l'émission de l'échantillon correspond à celle d'un corps noir est $\eta = 1244 \pm 31 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda = 8 \pm 0,2 \mu\text{m}$) où $\Delta\eta = 31 \text{ cm}^{-1}$ correspond à la demi-largeur de l'intervalle pour lequel l'absorptance est supérieure à 99% (voir figure 3.8c). Pour déterminer la température de la face avant de l'échantillon chauffé symétriquement, nous nous positionnons au nombre d'onde de Christiansen de notre échantillon de céramique Quartzel ($\eta = 1244 \text{ cm}^{-1}$). Pour chaque puissance de chauffage, la luminance émise au nombre d'onde de Christiansen est connue. L'application de l'équation 3.8 permet alors de retrouver la température. Pour les cinq puissances de chauffage, le tableau ci-après résume les différents niveaux de température de surface de la face avant ainsi que leurs incertitudes associées (voir annexe C pour le calcul des incertitudes).

Puissance CL (W)	Température face avant (°C)
30	1148 ± 68
40	1431 ± 92
49	1681 ± 114
58	1922 ± 136
67	2111 ± 154

Tableau 3.1 – Température de surface de la face avant au nombre d'onde de Christiansen $\eta = 1244 \text{ cm}^{-1}$. Configuration chauffage symétrique.

Pour des puissances supérieures à 50 W, la température de l'échantillon dépasse 1705°C, température théorique de fusion du Quartz (β -cristobalite) à pression atmosphérique. Après un chauffage de l'échantillon à une puissance supérieure à 50 W, nous avons observé une altération de son état de surface. Au-delà de 50 W, nous considérons que la structure de l'échantillon a

été modifiée et que nous sommes en présence d'un matériau différent de la céramique Quartzel initiale. Le lecteur se référera aux travaux de De Sousa Meneses *et. al.* [101] pour mieux appréhender l'effet de la température sur la structure cristalline de monocristaux de Quartz.

2.3.3 Facteur d'émission spectral - définition et détermination

Le facteur d'émission noté F_η est une grandeur extensive définie comme le rapport entre la luminance spectrale émise à partir d'une position \mathbf{x}_0 dans une direction \mathbf{u}_0 (notée L_η) sur la luminance du corps noir (loi de Planck) à la même température T (notée B_η) :

$$F_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0, T) = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0, T)}{B_\eta(T)} \quad (3.9)$$

Un échantillon chauffé symétriquement est considéré isotherme, et sa température est déterminée par pyrométrie au point de Christiansen. Par définition, le facteur d'émission doit toujours être inférieur ou égal à 1. Pour les matériaux diélectriques hétéropolaires, le maximum du facteur d'émission est localisé au nombre d'onde de Christiansen.

Le facteur d'émission calculé à partir de la température au point de Christiansen (température face avant donc température de l'échantillon si chauffé symétriquement) est illustré figure 3.18. Un pic caractéristique de groupes hydroxyles OH est présent aux alentours de $\eta \simeq 3700 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 2,7 \mu\text{m}$) [36, 98].

Nous venons de voir le protocole complet pour acquérir une mesure de luminance émise par un échantillon porté à haute température. Les mesures indirectes de luminance qui seront utilisées pour l'identification des propriétés radiatives s'obtiennent à partir de plusieurs mesures directes. Les différentes étapes supposent certaines hypothèses qui induisent des incertitudes sur les mesures indirectes (voir annexe C pour le calcul des incertitudes). Nous avons considéré que les deux voies optiques étaient équilibrées et nous avons vérifié que la fonction d'appareil est indépendante de la température. Cela nous a permis de déterminer la luminance émise par l'échantillon et sa température de face avant.

La difficulté majeure liée aux mesures d'émission est la détermination du champ de température interne à l'échantillon s'il n'est pas isotherme. Il est toujours possible de définir un facteur d'émission pour un matériau anisotherme, mais il faut l'utiliser avec précaution en raison du choix de la température pour son calcul. Pour les matériaux diélectriques hétéropolaires qui disposent d'un nombre d'onde de Christiansen, la température de surface peut être déterminée à partir de la luminance mesurée à cette fréquence et de la loi de Planck. Pour les matériaux qui ne disposent pas de point de Christiansen (feutres de carbone [2] par exemple), il faut développer une métrologie ou une méthode d'identification par méthode inverse afin d'avoir accès au champ de température.

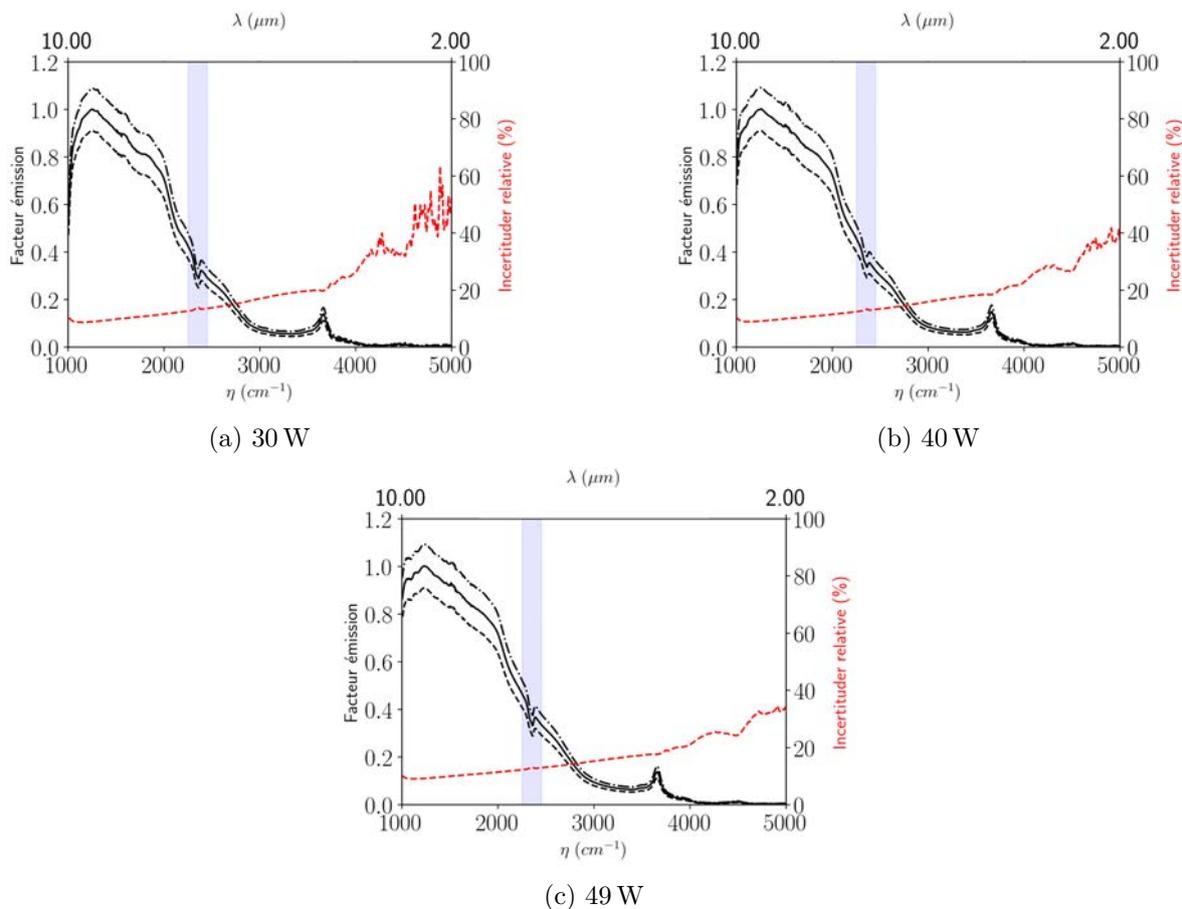


Figure 3.18 – Facteur d'émission d'une céramique Quartzel chauffée symétriquement pour différentes puissances de chauffage laser : (a) 30 W, (b) 40 W et (c) 49 W. Les courbes en pointillés noirs représentent $F_{\eta} \pm \Delta F_{\eta}$.

2.4 Mesures d'émission d'une céramique fibreuse en chauffage asymétrique

Dans la section précédente, la céramique Quartzel était chauffée de manière symétrique sur ses deux faces exposées au laser, les quatre autres faces étant au contact du porte échantillon et considérées adiabatiques. Nous nous intéressons maintenant au chauffage asymétrique, c'est-à-dire au chauffage de l'échantillon par l'une de ses deux faces libres, et nous allons porter une attention particulière à la détermination du champ de température au sein de l'échantillon.

Une représentation schématique des configurations de chauffage asymétrique est présentée sur les figures 3.19 et 3.20. La face $x = 3 \text{ mm}$ correspond au côté de l'échantillon par lequel s'effectue la mesure de la luminance L_{λ} . On note T_x la température de l'échantillon à l'abscisse x . Ainsi, T_0 correspond à la température de la face arrière et T_3 correspond à la température de la face avant.

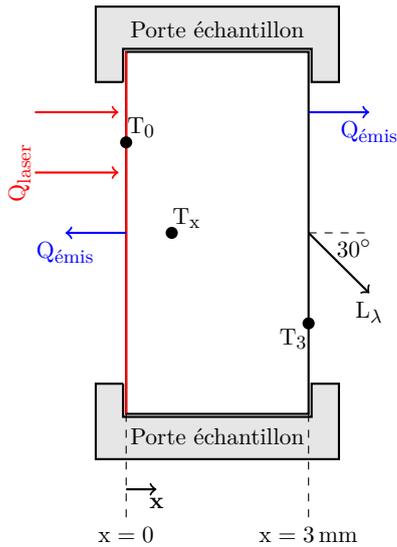


Figure 3.19 – Chauffage face arrière.

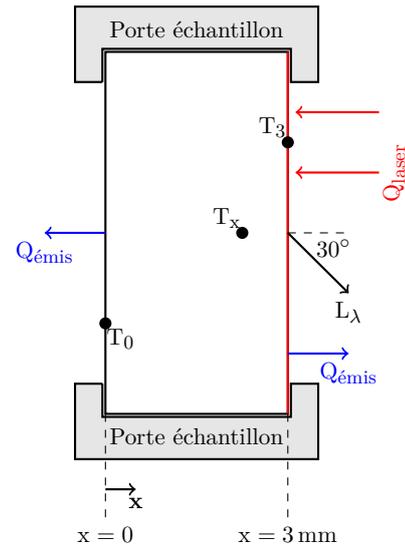


Figure 3.20 – Chauffage face avant.

Lorsque l'échantillon est chauffé de manière asymétrique, une différence de température s'établit à l'intérieur de l'échantillon, la face irradiée par le laser CO_2 étant à la température maximale. Dans les deux cas de chauffage, seule la température de face avant T_3 peut être déterminée par pyrométrie au point de Christiansen, la température de face arrière T_0 étant toujours inconnue.

Pour avoir accès au champ de température, il faut résoudre l'équation de la chaleur qui admet un terme source radiatif lorsqu'il y a couplage conduction-rayonnement. Ce terme source radiatif dépend du coefficient d'absorption de l'échantillon qui, à ce stade, est toujours inconnu. On se propose ici de combiner les informations obtenues dans les deux configurations de chauffage asymétrique (chauffage face avant et face arrière) afin de remonter à la différence de température entre les deux faces. Ainsi, la température T_0 en chauffage arrière correspond à la température T_3 en chauffage avant et réciproquement. Ce constat repose sur les hypothèses suivantes :

- Pas de dispersion des propriétés pour des échantillons issus de la même plaque céramique. Pour rappel, nous considérons qu'un échantillon ayant subi un cycle de chauffage-refroidissement est différent de l'échantillon originel. Cette précaution nous impose d'utiliser deux échantillons, l'un pour le chauffage face avant, l'autre pour le chauffage face arrière. Ainsi, deux échantillons découpés de la même plaque et soumis au même faisceau laser doivent avoir la même répartition des hétérogénéités, avoir le même comportement radiatif et émettre la même luminance aux incertitudes de mesure près. Cette hypothèse a été vérifiée en comparant l'émission de quatre échantillons pour une même puissance laser en configuration chauffage symétrique.
- Symétrie des voies. Pour une puissance donnée en sortie de cavité, les deux faisceaux en aval de la séparatrice ont la même puissance.
- Conditions aux frontières. En plus d'avoir la même puissance laser sur chacune des voies, il faut avoir les mêmes conditions sur les six frontières de chaque échantillon (quatre au contact du porte-échantillon en mullite, et deux en contact avec l'atmosphère). Les états

de surface des deux échantillons découpés de la même plaque doivent être identiques de telle sorte que le refroidissement par rayonnement soit similaire (comme si le même échantillon avait été retourné).

Pour une puissance en sortie de cavité de 49 W, les luminances émises par une céramique Quartzel dans les deux configurations de chauffage asymétrique sont données figure 3.21. Rappelons que la mesure est toujours réalisée sur la face avant de l'échantillon.

L'évolution spectrale de la luminance émise par l'échantillon chauffé en face avant est similaire à celle correspondant à la configuration chauffage symétrique (figure 3.17c). La face avant étant plus chaude que la face arrière, la puissance radiative perçue par le détecteur correspond essentiellement à l'émission thermique des tranches de l'échantillon à proximité de la face avant dans les zones spectrales où le matériau est optiquement épais. La face arrière étant plus froide, les flux radiatifs émis par les tranches du côté froid de l'échantillon sont plus faibles. Lorsque le milieu est optiquement épais, le flux émis par les tranches froides est rapidement absorbé dans l'échantillon. Lorsque l'épaisseur optique d'absorption est faible, comme c'est le cas pour des nombres d'onde supérieures à 3330 cm^{-1} , ce flux arrive tout de même au détecteur, mais avec une puissance moindre comparée au flux émis par la face avant.

Lorsque l'échantillon est chauffé par sa face arrière, la luminance émise par l'échantillon est nettement plus faible car elle correspond essentiellement à l'émission des tranches à proximité de la face avant qui, cette fois, est à la température minimale au sein de l'échantillon. Lorsque le milieu est optiquement épais, l'émission radiative des tranches chaudes à proximité de la face arrière est absorbée dans l'échantillon avant qu'elle ne parvienne au détecteur.

Ainsi, dans les deux configurations de chauffage asymétrique, le flux perçu par le détecteur dans la gamme $\eta \in [1000\text{ cm}^{-1}; 2000\text{ cm}^{-1}]$ provient essentiellement de la surface avant (surface de mesure).

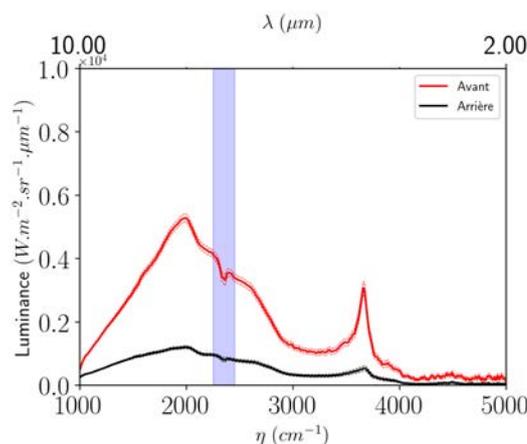


Figure 3.21 – Comparaison des luminances émises par la céramique Quartzel en configuration de chauffage symétrique, avant et arrière. La puissance en sortie de cavité laser est 49 W.

Concernant les champs de température, nous nous positionnons au nombre d'onde de Christiansen $\eta = 1244\text{ cm}^{-1}$ afin de calculer la température de la face avant T_3 . Pour une puissance de 49 W en sortie de cavité, la température de la face avant est $T_{3,\text{av}} = 1363 \pm 87^\circ\text{C}$ en chauff-

fage avant, et $T_{3,ar} = 627 \pm 30^\circ\text{C}$ en chauffage arrière. Avec les hypothèses mentionnées plus haut, la température de la face arrière en chauffage avant est $T_{0,av} = T_{3,ar} = 627 \pm 30^\circ\text{C}$. Lorsque l'échantillon est chauffé par sa face arrière, la température de sa face arrière est $T_{0,ar} = T_{3,av} = 1363 \pm 87^\circ\text{C}$. Nous observons une différence de température d'environ 735°C au sein d'un échantillon de 3 mm, d'où l'intérêt de ce type de matériaux pour l'isolation à haute température. Pour avoir le champ de température interne, il faut résoudre l'équation de la chaleur en prenant en compte le terme source radiatif et les conditions aux six frontières de l'échantillon.

Conclusions du chapitre

Nous avons présenté dans ce chapitre les différentes mesures réalisées et qui seront utilisées pour identifier les propriétés radiatives du feutre et de la céramique Quartzel en appliquant la méthode MCS. A température ambiante, ces mesures correspondent à des mesures de flux transmis et réfléchis. A haute température, la grandeur radiative d'intérêt correspond à une luminance émise.

Pour porter des isolants semi-transparents à de hauts niveaux de température, un système de chauffage au laser CO_2 développé dans le cadre de précédents travaux [2, 12] a été utilisé. Il est particulièrement adapté pour une montée en température d'échantillons qui présentent une forte absorption au nombre d'onde du laser CO_2 , comme c'est le cas pour la céramique Quartzel. Différentes configurations de chauffage ont été testées et une attention particulière a été portée à la détermination de la différence de température entre les deux faces de l'échantillon dans le cas d'un chauffage sur une seule face. L'échantillon est isotherme lorsqu'il est chauffé sur les deux faces.

Avec les mesures présentées dans ce chapitre, nous analyserons dans le chapitre 4 l'identification des propriétés radiatives du feutre Quartzel à partir des mesures de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques à température ambiante. Enfin, nous nous intéresserons plus particulièrement à l'identification des propriétés radiatives de la céramique Quartzel à haute température dans le chapitre 5.

Chapitre 4

Stratégie d'inversion basée sur les méthodes Monte Carlo Symbolique

Nous avons vu dans les chapitres précédents les différents modèles de rayonnement ainsi que les différents types de mesures radiatives envisageables. La prochaine étape consiste à définir une stratégie d'identification des propriétés radiatives par méthode inverse. Dans ce chapitre, nous développons les aspects liés aux méthodes inverses. Après un rappel de définitions utiles pour une démarche d'inversion, nous définirons une stratégie puis nous l'appliquerons pour identifier les propriétés radiatives d'un feutre faible densité Quartzel dont une description est donnée dans le chapitre 3. Cette stratégie se basera sur les méthodes Monte Carlo Symbolique qui, comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, peuvent servir d'outil d'analyse préliminaire à l'inversion. Les travaux présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication [15] dont les principaux résultats sont repris ici.

1 Introduction aux méthodes inverses

La résolution du modèle direct nécessite la connaissance des propriétés radiatives (coefficients d'absorption et de diffusion spectraux) et de la fonction de phase du matériau considéré. A partir de ces paramètres d'entrée, la résolution du problème direct permet de calculer une donnée de sortie, qui dans le cas de l'ETR, peut être une luminance, une transmittance, une réflectance, etc. Un modèle direct permet de prédire des conséquences à partir de causes connues.

A l'opposé, en méthodes inverses, on cherche à remonter aux causes possibles à l'origine de phénomènes mesurables. En d'autres termes, à partir d'une donnée de sortie, le modèle direct est "inversement" résolu afin de déterminer les paramètres d'entrée. Dans le cas des transferts radiatifs dans les matériaux hétérogènes, les paramètres d'entrée peuvent être le coefficient d'absorption, le coefficient de diffusion, le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase, le champ de température, etc. Une donnée de sortie peut être une transmittance, une réflectance ou une luminance émise par le matériau.

Les premières études d'inversion en transferts thermiques ont porté sur la conduction dans des géométries 1D simples [102]. Avec le développement de matériaux hétérogènes complexes dont les propriétés thermophysiques dépendent de la température et avec l'utilisation de procédés industriels de plus en plus sophistiqués, l'estimation des propriétés thermophysiques dans des conditions de température proches des conditions opérationnelles devient nécessaire. Les problèmes d'inversion peuvent être classés selon la nature du transfert de chaleur mis en jeu (conduction, rayonnement en milieu semi-transparent, etc.) ou selon les paramètres à identifier (conditions limites, conditions initiales, propriétés thermophysiques, etc.).

La différence fondamentale entre les problèmes directs et les problèmes inverses réside dans la définition mal-posée des problèmes inverses dans le sens de Hadamard [103]. La formulation mathématique d'un problème physique doit être bien-posée dans le sens où ces trois propriétés doivent être respectées :

1. Existence : il existe une solution au problème ;
2. Unicité : la solution du problème est unique ;
3. Stabilité : une faible variation des paramètres du problème cause une faible variation de la solution.

Le lecteur intéressé se référera par exemple au livre de Kirsh [104] ou aux cours du METTI [105] pour plus de détails sur les techniques d'inversion.

La solution d'un problème inverse en transferts radiatifs est rarement unique [20]. Pour le modèle direct, un jeu de paramètres (coefficients d'absorption et de diffusion, fonction de phase) permet d'obtenir une grandeur radiative unique. En revanche, une grandeur radiative, par exemple une luminance, peut correspondre à plusieurs jeux de paramètres. De plus, les problèmes inverses en transferts radiatifs sont instables [106, 107] : une perturbation sur la luminance peut produire de grandes erreurs sur les paramètres à identifier.

Quelle que soit la méthode d'inversion utilisée, un algorithme d'optimisation débute par la transcription du problème en un ensemble de fonctions objectifs. La première étape est la définition des fonctions objectifs et des éléments composant les contraintes du problème. Cela équivaut à rechercher n éléments regroupés dans le vecteur $\beta = [\beta_1, \dots, \beta_n]$ qui doit satisfaire m inégalités de contraintes $g_i(\beta) \in [C_i, C'_i]$ pour $i = 1, \dots, m$ et p égalités de contraintes $h_j = C_j$ pour $j = 1, \dots, p$ où C est une contrainte du problème. L'optimisation consiste donc à chercher l'ensemble β qui induit les valeurs optimales pour les fonctions objectifs.

1.1 Outils mathématiques pour l'inversion

Il n'existe malheureusement pas de règle générale qui permette d'inverser un problème et d'identifier ses paramètres de manière précise, tout en respectant la définition des problèmes bien-posés vue précédemment. C'est la raison pour laquelle les paragraphes qui suivent présentent un ensemble d'outils mathématiques permettant d'évaluer les performances d'une méthode in-

verse [105].

Considérons un modèle direct noté f dépendant d'une variable t (par exemple, le temps ou le nombre d'onde) et d'un ensemble de paramètres β . Une observable notée \mathbf{y} associée au modèle est fréquemment constituée d'une ou de plusieurs mesures, ou de valeurs requises pour le problème d'optimisation (par exemple un flux thermique faible, une absorption volumique forte, etc.). Soient n le nombre de paramètres (taille du vecteur β) et m le nombre d'observables. Nous associons l'indice i aux observables (y_i pour $i = 1, \dots, m$) et l'indice j aux éléments du vecteur paramètres (β_j pour $j = 1, \dots, n$).

Soit la fonction objectif S dépendant du vecteur paramètre β , définie par :

$$\begin{aligned} S(\beta) &= \sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i, \beta))^2 \\ S(\beta) &= (\mathbf{y} - \mathbf{f})^T \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{f}) \end{aligned} \quad (4.1)$$

S représente la somme des moindres carrés de la différence entre les valeurs observées (mesurées) y_i et les valeurs calculées à partir du modèle direct $f(t_i, \beta)$. Pour le problème d'inversion qui suit, nous cherchons le vecteur paramètre optimal β_{opt} qui minimise voire qui annule la fonction objectif S , *i.e.*, $y_i = f(t_i, \beta)$. Cela revient à trouver le vecteur β_{opt} tel que :

$$\begin{aligned} \forall j \in \{1, \dots, n\}, \quad \frac{\partial S(\beta_{\text{opt}})}{\partial \beta_{\text{opt},j}} &= 0 \\ \sum_{i=1}^m -2 \frac{\partial f(t_i, \beta_{\text{opt}})}{\partial \beta_{\text{opt},j}} (y_i - f(t_i, \beta_{\text{opt}})) &= 0 \\ \sum_{i=1}^m -2 J_{i,j} (y_i - f(t_i, \beta_{\text{opt}})) &= 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

On note $\underline{\underline{J}}$ la matrice Jacobienne de taille (m, n) représentant la sensibilité locale de la fonction f par rapport aux paramètres β_j de β ($J_{i,j} = \partial f_i / \partial \beta_j$). La représentation matricielle de l'équation précédente est :

$$\mathbf{S}'(\beta_{\text{opt}}) = -2 \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{f})^T \underline{\underline{J}} = 0 \quad (4.3)$$

Dans le cas où le problème est linéaire, c'est-à-dire lorsque la matrice Jacobienne $\underline{\underline{J}}$ est indépendante de tous les paramètres β_j de β , nous pouvons aisément écrire :

$$\mathbf{f}(t, \beta) = \underline{\underline{J}} \beta$$

En transferts radiatifs, le problème est souvent non-linéaire. Dans ce cas, la matrice Jacobienne est dépendante d'au moins un paramètre β_j de β . Le problème doit donc être linéarisé en développant la fonction $f(t, \beta)$ en séries de Taylor à l'ordre 1 autour de la solution β_k de la k -ème itération :

$$\mathbf{f}(t, \beta_{k+1}) = \mathbf{f}(t, \beta_k) + \underline{\underline{J}} \cdot (\beta_{k+1} - \beta_k)$$

En notant $\mathbf{f}_k = \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_k)$ et en injectant la relation précédente dans l'équation 4.3, nous obtenons une équation itérative du vecteur paramètre $\boldsymbol{\beta}$:

$$\boldsymbol{\beta}_{k+1} = \boldsymbol{\beta}_k + \left((\underline{\mathbf{J}}_k)^T \underline{\mathbf{J}}_k \right)^{-1} (\underline{\mathbf{J}}_k)^T \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{f}_k) \quad (4.4)$$

Il s'agit de la méthode de linéarisation de Gauss-Newton. La procédure itérative linéaire nécessite l'inversion de la matrice d'information $\underline{\mathbf{A}} = (\underline{\mathbf{J}})^T \underline{\mathbf{J}}$ à chaque itération k . Celle-ci doit admettre un déterminant non-nul. Lorsque le déterminant est proche de 0, le problème est dit mal-conditionné.

Outil 1 : Matrice de sensibilités réduites

L'identification des paramètres représentatifs du comportement radiatif d'un milieu semi-transparent nécessite une analyse de sensibilité du modèle radiatif à chacun de ses paramètres. Cette analyse reposant sur la matrice de sensibilité (Jacobienne) permet de mettre en évidence les possibilités d'identification.

Les paramètres d'un problème n'étant généralement pas de même dimension, nous pouvons considérer les coefficients réduits $J_{i,j}^*$ (adimensionnels) définis par :

$$J_{i,j}^* = \frac{\beta_j}{f(t_i, \boldsymbol{\beta})} \frac{\partial f(t_i, \boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} \quad (4.5)$$

Dans le cas d'un problème inverse non-linéaire, l'observation des sensibilités de chacun des paramètres après convergence permet une première analyse de la qualité de la solution du problème inverse. Cette analyse de sensibilité ne peut se faire qu'après minimisation de la fonction objectif. Si un paramètre a une grande influence sur l'observable, alors la sensibilité à ce paramètre est élevée. Dans ce cas, l'estimation de ce paramètre par méthode inverse est plus précise. A l'opposé, un paramètre n'ayant aucune influence a une sensibilité faible (proche de 0) et son estimation sera difficile voire impossible.

Deux paramètres β_1 et β_2 sont corrélés lorsque les amplitudes des sensibilités réduites sont proportionnelles. Dans ce cas, les influences de chacun de ces paramètres sur le problème inverse ne sont pas indépendantes, mais liées. Après convergence, il est difficile de distinguer les contributions de chacun de ces paramètres. Si certains paramètres sont corrélés, il est possible que la minimisation de la fonction objectif converge vers un minimum local et non un minimum global. Ce cas peut respecter la condition d'existence d'une solution du problème inverse, mais pas son unicité.

Outil 2 : Décomposition en Valeurs Singulières de la matrice d'information

La résolution d'un problème inverse non-linéaire fait intervenir une matrice $\mathbf{A} = (\underline{\mathbf{J}})^T \underline{\mathbf{J}}$ qu'il faut inverser à chaque itération k . Pour analyser l'inversibilité de $\underline{\mathbf{A}}$, il est possible de réaliser une

Décomposition en Valeurs Singulières (*SVD : Singular Value Decomposition*). Cette décomposition consiste à transformer la matrice $\underline{\underline{A}}$ en un produit de trois matrices $\underline{\underline{V}}$, $\underline{\underline{S}}$ et $\underline{\underline{U}}$ tel que :

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{S}} \underline{\underline{V}}^T \quad (4.6)$$

où :

- $\underline{\underline{U}}$ est une matrice orthogonale,
- $\underline{\underline{S}}$ est une matrice diagonale contenant des éléments positifs ou nuls (les valeurs singulières ordonnées de manière décroissante),
- $\underline{\underline{V}}^T$ est la transposée d'une matrice orthogonale.

Il existe deux avantages numériques à la décomposition SVD :

- L'inverse d'une matrice orthogonale est sa transposée,
- L'inverse d'une matrice diagonale (à éléments non-nuls) est une matrice diagonale telle que :

$$(S^{-1})_{p,p} = (S_{p,p})^{-1} = 1/S_{p,p}$$

Ainsi, si la matrice $\underline{\underline{A}}$ est carrée, son inverse $\underline{\underline{A}}^{-1}$ est :

$$\underline{\underline{A}}^{-1} = \underline{\underline{V}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{U}}^T \quad \& \quad A_{i,j} = \sum_{p=1}^n V_{i,p} \frac{1}{S_{p,p}} U_{j,p} \quad (4.7)$$

L'inversion d'une matrice non-singulière est fortement impactée par les erreurs dues aux faibles valeurs singulières $S_{p,p}$. Cet impact est analysé via le nombre de conditionnement CN de la matrice $\underline{\underline{A}}$ défini par :

$$CN = \frac{\max(S_{p,p})}{\min(S_{p,p})} \geq 1 \quad (4.8)$$

Le nombre de conditionnement est un indicateur de l'inversibilité de la matrice $\underline{\underline{A}}$:

- Le problème est approximativement bien-posé lorsque CN tend vers 1 ;
- CN "grand" : la matrice $\underline{\underline{A}}$ est mal-conditionnée ;
- $CN \rightarrow \infty$: la matrice $\underline{\underline{A}}$ est singulière donc non-inversible.

Lorsque CN est grand, plusieurs pistes peuvent être explorées afin de rendre le problème moins mal-conditionné [105], comme changer le type de mesures, changer de modèle \mathbf{f} voire le réduire, régulariser la matrice d'informations $\underline{\underline{A}}$ en y introduisant un biais, etc.

1.2 Stratégie d'identification des propriétés radiatives

Nous avons présenté les enjeux liés à l'identification des paramètres et quelques outils utiles pour l'analyse de la qualité de la solution du problème inverse. Dans le chapitre 2, nous avons présenté les méthodes de Monte Carlo Symbolique pour la résolution de l'ETR et nous avons également vu qu'elles peuvent constituer un outil d'analyse pour l'inversion. Comment mettre en oeuvre les méthodes MCS pour identifier par méthode inverse les propriétés radiatives ?

Grâce à MCS, la grandeur radiative d'intérêt est exprimée sous la forme d'un polynôme dans lequel les propriétés radiatives que nous cherchons à identifier apparaissent de manière explicite. Ce polynôme MCS sert de modèle direct dans notre procédure d'inversion. Ce modèle direct doit pouvoir représenter la grandeur mesurée le plus fidèlement possible. Dans le cas des mesures à température ambiante réalisées dans le cadre de cette thèse, les grandeurs d'intérêt sont la transmittance et la réflectance directionnelles-hémisphériques. Ainsi, le modèle radiatif qui dépend du coefficient d'absorption, du coefficient de diffusion et de la fonction de phase, doit pouvoir représenter les différents phénomènes physiques qui conduisent à la transmittance (respectivement réflectance) pour un faisceau incident d'intensité connue.

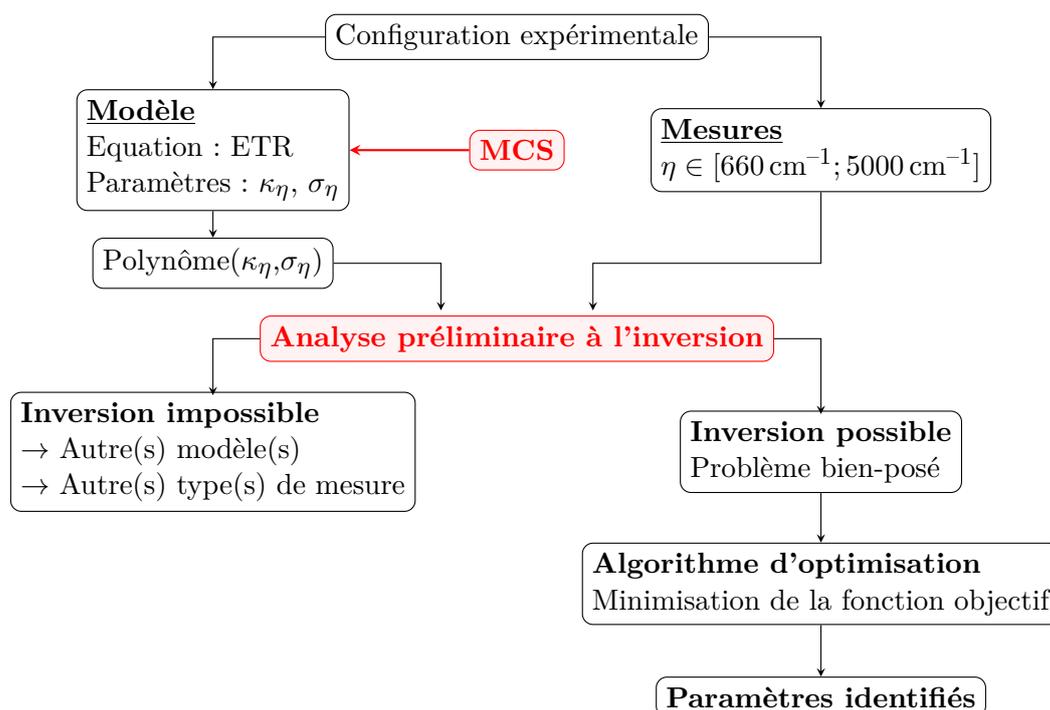


Figure 4.1 – Stratégie d'inversion basée sur les méthodes Monte Carlo Symbolique.

On se propose dans les paragraphes qui suivent d'appliquer la stratégie inverse illustrée sur la figure 4.1. Premièrement, nous définissons un modèle radiatif et un jeu de paramètres à identifier. Ici, le modèle direct est l'ETR exprimée sous la forme polynomiale donnée par MCS en conservant le coefficient d'absorption et le coefficient de diffusion sous forme symbolique. Les propriétés radiatives que nous cherchons à identifier sont donc les coefficients d'absorption et de diffusion. Les mesures hémisphériques ne donnant que très peu d'informations sur la fonction de phase, nous n'allons pas l'identifier et nous la supposons connue. Ensuite, une analyse inverse est menée en utilisant les polynômes obtenus par MCS et les mesures de transmittance et de réflectance. Cette analyse permet de définir les zones spectrales dans lesquelles l'identification des propriétés radiatives est possible. Ce n'est que lorsque nous sommes certains que le problème inverse est bien-posé dans le sens de Hadamard, qu'un algorithme d'inversion sera mis en oeuvre pour identifier les propriétés radiatives (lorsque le problème est bien-posé, n'importe quel algorithme d'optimisation peut être utilisé).

Cette stratégie sera illustrée tout au long de ce chapitre pour identifier les propriétés radiatives du feutre faible densité Quartzel dont les spectres mesurés de transmittance et de réflectance à température ambiante ont été présentés dans le chapitre 3.

2 Identification des propriétés radiatives d'un feutre Quartzel à température ambiante

Dans ce chapitre, la méthode MCS est utilisée pour mener une analyse complète de l'identification des propriétés radiatives d'un échantillon de feutre Quartzel (isolant thermique hétérogène à faible densité utilisé pour des applications haute température) dont les mesures de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques à température ambiante sont présentées sur la figure 3.6 du chapitre 3.

2.1 Mise en équation du modèle radiatif et résolution par MCS

Le milieu, noté Δ , est à température ambiante. Un flux incident d'intensité $L_{0,\eta}$ dans la direction \mathbf{u}_0 traverse la surface S_0 en $x = 0$ mm. On définit les surfaces S_R (respectivement S_T) correspondant aux abscisses $x = 0$ mm (respectivement $x = 4$ mm) pour lesquelles la réflectance (respectivement transmittance) sera estimée.

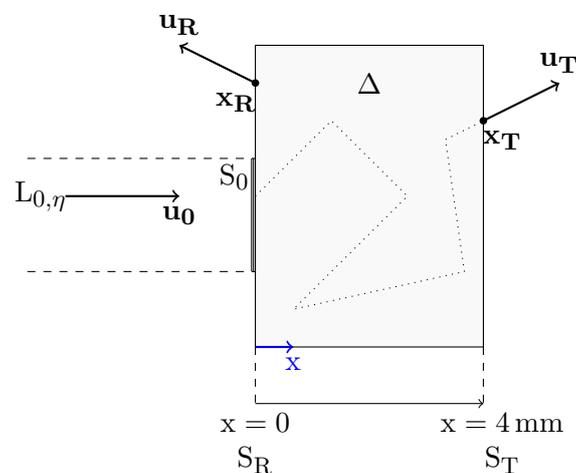


Figure 4.2 – Schéma de la configuration étudiée.

L'ETR dans un milieu homogène absorbant et diffusant est utilisée pour modéliser le transfert radiatif dans le feutre Quartzel. Concernant la fonction de phase, les mesures directionnelles-hémisphériques ne permettent pas d'avoir des informations sur l'anisotropie [68, 75]. Pour choisir un modèle de fonction de phase adéquat et pour avoir des informations sur l'anisotropie de l'échantillon, il faudrait réaliser des mesures de transmission et/ou de réflexion bi-directionnelles¹. En conséquence, dans le cadre de cette étude, nous supposons la fonction de

1. Le dispositif de mesures bi-directionnelles du CETHIL n'est plus opérationnel.

phase isotrope ou de type linéaire anisotrope (LA). Dans le cadre de la fonction de phase LA, le facteur d'asymétrie g_η de la fonction de phase est inclus dans le coefficient de diffusion réduit noté $\sigma'_\eta = \sigma_\eta(1 - g_\eta)$ où σ_η est le coefficient de diffusion. $\beta'_\eta = \kappa_\eta + \sigma'_\eta$ est le coefficient d'extinction sous l'approximation de transport (voir page 28).

Les formulations de la transmittance et de la réflectance, basées sur la forme intégrale de l'ETR (équation 1.24), sont données par :

$$\begin{aligned} T_\eta &= \frac{\int_{S_0} L_{0,\eta} dS \times \Gamma_\eta((\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \rightarrow (\mathbf{x}_T, \mathbf{u}_T))}{\int_{S_0} L_{0,\eta} dS} \\ R_\eta &= \frac{\int_{S_0} L_{0,\eta} dS \times \Gamma_\eta((\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) \rightarrow (\mathbf{x}_R, \mathbf{u}_R))}{\int_{S_0} L_{0,\eta} dS} \end{aligned} \quad (4.9)$$

où \mathbf{x}_T (ou \mathbf{x}_R) est une position sur la surface S_T (ou S_R) et \mathbf{u}_T (ou \mathbf{u}_R) est une direction partant de la surface S_T (ou S_R) comme cela est illustré sur la figure 4.2. La fonction Γ_η est adimensionnée et peut être considérée comme une fonction de transmission du faisceau incident jusqu'à la surface par laquelle le faisceau quitte le milieu. Γ_η est basée sur la formulation intégrale de l'ETR. En d'autres termes, l'équation 4.9 peut être lue comme suit : le faisceau incident provenant de la source MIR interne au spectromètre entre dans l'échantillon par la face en $x = 0$. La surface d'interaction entre le faisceau incident et le matériau est S_0 . Le rayonnement se propage ensuite à l'intérieur du matériau. La puissance (flux) sortant par la face en $x = 0$ (respectivement $x = 4$ mm) rapportée à la puissance du faisceau incident correspond à la réflectance (respectivement transmittance).

Nous souhaitons utiliser la méthode Monte Carlo Symbolique en conservant le coefficient d'absorption κ_η et le coefficient de diffusion réduit σ'_η comme paramètres symboliques. Ce sont les paramètres que nous cherchons à identifier à partir des mesures de transmittance et de réflectance. Nous avons montré dans la sous-section 2.3 du chapitre 2 qu'une grandeur radiative s'écrit avec MCS sous la forme d'un polynôme dans lequel les coefficients d'absorption et de diffusion apparaissent explicitement. Dans le cas de la transmittance et de la réflectance directionnelles-hémisphériques, ce polynôme s'écrit :

$$\begin{aligned} T_\eta(\kappa_\eta, \sigma'_\eta) &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{a_{j,k}} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\widehat{\beta}_\eta(1 - \widetilde{P}_{s,\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma'_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s,\eta}} \right)^k \\ R_\eta(\kappa_\eta, \sigma'_\eta) &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{b_{j,k}} \left(\frac{\widehat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\widehat{\beta}_\eta(1 - \widetilde{P}_{s,\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma'_\eta}{\widehat{\beta}_\eta \widetilde{P}_{s,\eta}} \right)^k \end{aligned} \quad (4.10)$$

avec :

$$\begin{aligned} \overline{a_{j,k}} &= \frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} H(\mathbf{x}_i \rightarrow S_T) \delta(j = N_{cn,i}) \delta(k = N_{sca,i}) \\ \overline{b_{j,k}} &= \frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} H(\mathbf{x}_i \rightarrow S_R) \delta(j = N_{cn,i}) \delta(k = N_{sca,i}) \end{aligned} \quad (4.11)$$

où $N_{nc,i}$ et $N_{sca,i}$ sont le nombre de collisions nulles et le nombre de diffusions lors du i -ème échantillonnage et \mathbf{x}_i la position de sortie du chemin optique.

Un exemple de schéma fonctionnel de l'algorithme MCS est présenté sur la figure 2.16 du chapitre 2. Pour chaque i -ème chemin optique, nous comptons le nombre de diffusions $N_{sca,i}$ et le nombre de collisions nulles $N_{nc,i}$ puis nous retenons la surface par laquelle le libre parcours d'extinction quitte le milieu. Une fois que tous les chemins N_{MC} ont été générés, nous appliquons l'équation 4.11 pour générer les polynômes.

Il est intéressant de préciser qu'en une seule simulation MCS, nous obtenons une grandeur radiative (ici la transmittance et la réflectance) et son incertitude numérique associée (voir annexe A) définies dans tout l'espace des paramètres (κ_η et σ'_η). Les seuls choix arbitraires effectués sont le coefficient d'extinction global $\hat{\beta}_\eta$ (incluant les collisions nulles) et la probabilité arbitraire de diffusion $\tilde{P}_{s,\eta}$ qui dépendent *a priori* du nombre d'onde. Il est toutefois possible d'obtenir un seul et unique polynôme défini sur tout le spectre, *i.e.*, des coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$ indépendants du nombre d'onde. Pour ce faire, nous définissons un coefficient d'extinction $\hat{\beta}$ et une probabilité arbitraire \tilde{P}_s indépendants du nombre d'onde. Cependant, le choix de $\hat{\beta}$ et \tilde{P}_s indépendants du nombre d'onde peut avoir des conséquences sur les écart-types. L'influence de $\hat{\beta}$ sur les écart-types a été étudiée par Galtier et. al. [79]. Nous évaluerons l'impact du choix de \tilde{P}_s dans les sous-sections qui vont suivre.

MCS permet donc d'exprimer la transmittance et la réflectance sous la forme d'un polynôme des propriétés radiatives sur tout le spectre en un seul et unique calcul. Rappelons ici que le coefficient d'extinction $\hat{\beta}$ est un majorant de κ_η et σ'_η :

$$\forall \eta, \kappa_{\eta,\max} + \sigma'_{\eta,\max} \leq \hat{\beta}$$

A ce niveau, comment pouvons-nous judicieusement choisir un coefficient d'extinction $\hat{\beta}$? En principe, n'importe quel coefficient de collision nulle γ_η (et donc coefficient d'extinction $\hat{\beta}$) pourrait convenir puisque l'ajout d'un champ fictif ne change aucunement l'ETR et la physique de transport. Cependant, un coefficient d'extinction trop élevé accroîtrait le temps de calcul car, pour chaque i -ème échantillonnage Monte Carlo, les libres parcours d'extinction deviennent très petits et prennent plus de temps pour quitter le milieu [79]. Cela induit un nombre important de diffusions et de collisions nulles et donc un polynôme de degré élevé.

Pour choisir efficacement $\hat{\beta}$ dans le cadre du problème inverse étudié ici, il faut prendre en compte les ordres de grandeur des spectres de transmittance et de réflectance mesurés et utilisés pour le problème inverse ainsi que la physique qui régit la transmittance et la réflectance. Lorsque le coefficient d'extinction est élevé, l'épaisseur optique d'extinction devient également élevée et le milieu ne transmet plus le rayonnement incident. La transmittance diminue dans le sens des coefficients d'extinction croissants. La réflectance est quant à elle associée aux phénomènes de diffusion en volume. En suivant ce raisonnement, la somme $\kappa_{\eta,\max} + \sigma'_{\eta,\max}$ donnant

une transmittance minimale et le coefficient de diffusion $\sigma'_{\eta,\max}$ donnant une réflectance maximale seraient un bon indicateur de la borne supérieure $\hat{\beta}$. C'est donc la connaissance *a priori* du comportement radiatif du matériau qui permet d'effectuer un choix arbitraire de $\hat{\beta}$. Dans la suite de l'étude, nous choisissons $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$, majorant de $\kappa_{\eta} + \sigma_{\eta}$ sur tout le spectre.

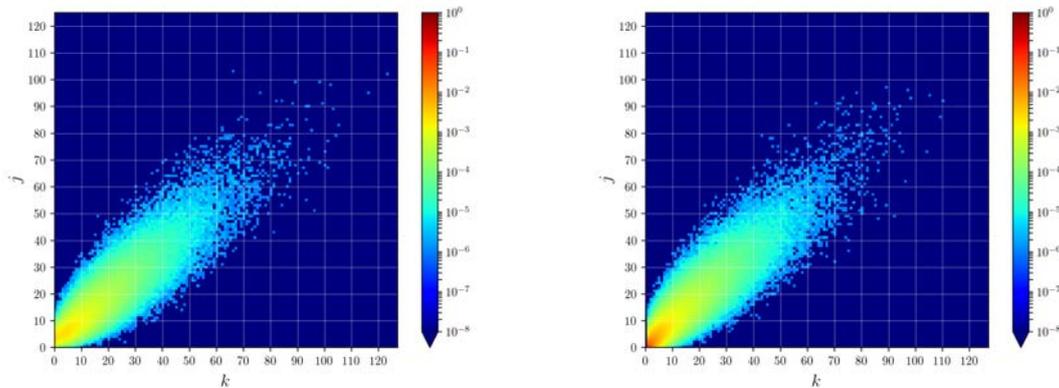
De plus, le choix de la probabilité arbitraire \tilde{P}_s pour la diffusion et $\tilde{P}_n = 1 - \tilde{P}_s$ pour la collision nulle est aussi nécessaire pour pouvoir construire les polynômes. L'introduction de cette probabilité arbitraire peut induire des difficultés de convergence selon la valeur choisie. Afin de minimiser la variance introduite par le choix de \tilde{P}_s , les probabilités \tilde{P}_s et $\tilde{P}_n = 1 - \tilde{P}_s$ doivent être proches du ratio du nombre de diffusions ou de collisions nulles sur le nombre total de collisions (voir section 2.3 du chapitre 2) :

$$\tilde{P}_s \simeq P_s = \frac{\sigma'_{\eta}}{\sigma'_{\eta} + \gamma_{\eta}} = \frac{\sigma'_{\eta}}{\hat{\beta} - \kappa_{\eta}} \quad \& \quad \tilde{P}_n = 1 - \tilde{P}_s \simeq P_n = \frac{\gamma_{\eta}}{\sigma'_{\eta} + \gamma_{\eta}} = \frac{\hat{\beta} - \kappa_{\eta} - \sigma'_{\eta}}{\hat{\beta} - \kappa_{\eta}} \quad (4.12)$$

Or, κ_{η} et σ'_{η} sont inconnus. Il faut donc faire un choix et affecter une valeur numérique à \tilde{P}_s . Dans le cadre du problème inverse étudié ici, nous choisissons $\tilde{P}_s = 0,5$ car elle représente un bon compromis entre les petites et les grandes épaisseurs optiques de diffusion [13]. Toutefois, une fois les propriétés radiatives identifiées, nous prendrons le soin de vérifier que ce choix est cohérent. Tous les résultats qui vont suivre ont été obtenus en choisissant $N_{MC} = 10^6$.

NOTE : Coefficients des polynômes

MCS a permis d'exprimer la transmittance et la réflectance sous la forme d'un polynôme donné par l'équation 4.10. Pour l'échantillon feutre Quartzel étudié dans le problème inverse présenté ici, nous avons choisi $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$ correspondant à une épaisseur optique d'extinction de 8 (épaisseur de 4 mm). En prenant $\tilde{P}_s = 0,5$ et $N_{MC} = 10^6$, le nombre maximal de collisions nulles et de diffusions sont $N_{cn,\max} = 126$ et $N_{sca,\max} = 128$. Les matrices contenant les coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$ sont à peu près carrées de taille 126 par 128. Pour $\tilde{P}_s = 0,5$, le libre parcours a la même probabilité de subir une collision nulle (contribution j) qu'une diffusion (contribution k).



a – Coefficients $\overline{a_{j,k}}$.

b – Coefficients $\overline{b_{j,k}}$.

Figure 4.3 – Représentation graphique des coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$.

Quelle est la contribution de chacun des coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$ dans l'estimation de la transmittance et de la réflectance? Pour cela, nous pouvons représenter graphiquement les valeurs des coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$ dans l'espace $j - k$ (j étant la contribution d'une collision nulle, k la contribution d'une diffusion) comme sur la figure 4.3. Nous pouvons déjà remarquer que les plus grandes contributions sont localisées à proximité de $j = 0$ et $k = 0$. Ensuite, les coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$ sont répartis autour de la diagonale $j = k$ du fait du choix de $\tilde{P}_s = 0,5$. Si \tilde{P}_s tend vers 0 (respectivement vers 1), il y a peu de diffusion (respectivement peu de collisions nulles), la répartition des coefficients serait portée par l'axe j (resp. l'axe k). Enfin, bien qu'il y ait eu 126 collisions nulles et 128 diffusions au maximum, la contribution des coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$ pour j et k supérieurs à 100 semble être négligeable.

2.2 Analyse inverse

2.2.1 Analyse du problème inverse par une méthode graphique

Les polynômes obtenus par MCS permettent d'estimer la transmittance et la réflectance dans tout l'espace des paramètres $\kappa_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 10 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 10 \text{ cm}^{-1}]$. Nous pouvons donc générer des iso-valeurs de transmittance et de réflectance en fonction de κ_η et σ'_η comme présentées sur la figure 4.4. Un seul calcul MCS a permis de générer toutes les iso-lignes en trait plein. Pour avoir une idée préalable de l'erreur commise en choisissant $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$ et $\tilde{P}_s = 0,5$, les valeurs obtenues par MCS sont comparées à celles obtenues par MCC. Sur la même figure sont représentées les iso-valeurs de transmittance et de réflectance sous la forme de croix pour les simulations MCC. Notons ici qu'une croix correspond à un seul calcul MCC pour un seul couple $(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)$. Nous pouvons déjà remarquer la bonne correspondance entre les transmittances et les réflectances obtenues par MCS et par MCC. Les choix de $\hat{\beta}$ et \tilde{P}_s pour cette étude introduisent une erreur négligeable (l'écart-type relatif maximal obtenu est de l'ordre de 3%).

Selon l'ETR, les iso-lignes qui donnent une valeur particulière de T_η et R_η sont tracées pour une infinité de couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$. Une iso-ligne donne toutes les valeurs possibles de κ_η et σ'_η qui reproduisent une valeur de transmittance ou une valeur de réflectance données. Par exemple, l'iso-ligne $T_\eta = 0,3$ sur la figure 4.4a donne tous les coefficients d'absorption et de diffusion qui reproduisent cette valeur de transmittance : $\kappa_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 3 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 8,7 \text{ cm}^{-1}]$. Cette iso-ligne donne les bornes admissibles de κ_η et σ'_η et le lien entre ces coefficients. Supposons que nous ayons une information sur κ_η , par exemple $\kappa_\eta = 2 \text{ cm}^{-1}$, alors l'iso-ligne permet de déduire $\sigma'_\eta \simeq 1,8 \text{ cm}^{-1}$.

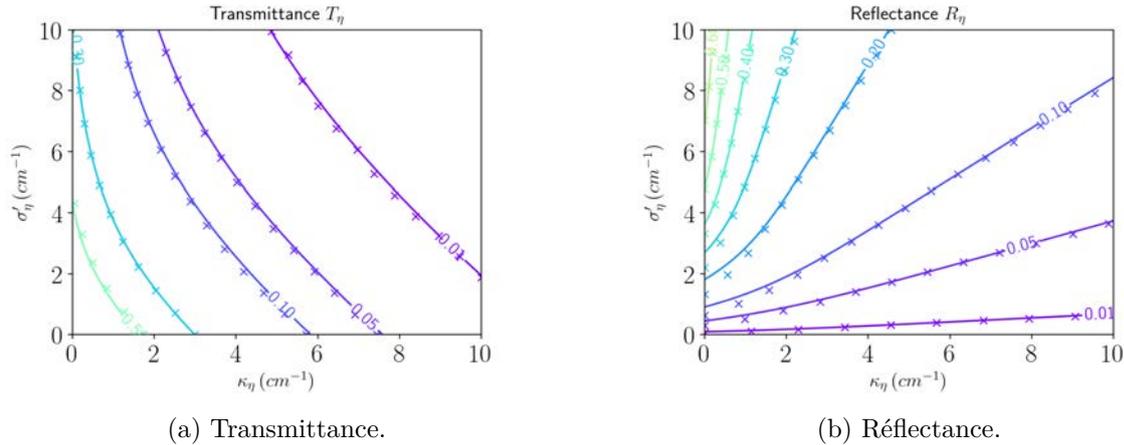


Figure 4.4 – Iso-lignes de (a) T_η et (b) R_η dans l'espace κ_η et σ'_η . Un seul calcul MCS a permis de générer toutes les courbes en trait plein tandis que chaque croix a été obtenue par un calcul MCC pour chacun des couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$.

Sur les figures 4.4a et 4.4b, nous remarquons que les tendances des iso-lignes sont opposées : dans le plan $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$, une iso-ligne de transmittance est une fonction décroissante tandis qu'une iso-ligne de réflectance est une fonction croissante. A partir de ces iso-lignes, il est possible de déterminer si la solution du problème inverse existe et est unique. Pour cela, nous allons étudier certaines valeurs particulières de transmittance et de réflectance du spectre de la figure 4.5. Ces valeurs particulières peuvent par exemple correspondre aux extrema du spectre ou aux zones où l'incertitude expérimentale relative est élevée. Dans le cas du problème inverse étudié ici, afin d'illustrer l'analyse d'inversion menée grâce à MCS, nous prendrons par exemple un cas où nous sommes en présence d'une valeur de transmittance faible et une zone du spectre où la transmittance vaut 0,01 avec une incertitude relative de 100% (c'est la valeur minimale admissible pour une mesure de transmittance ou de réflectance).

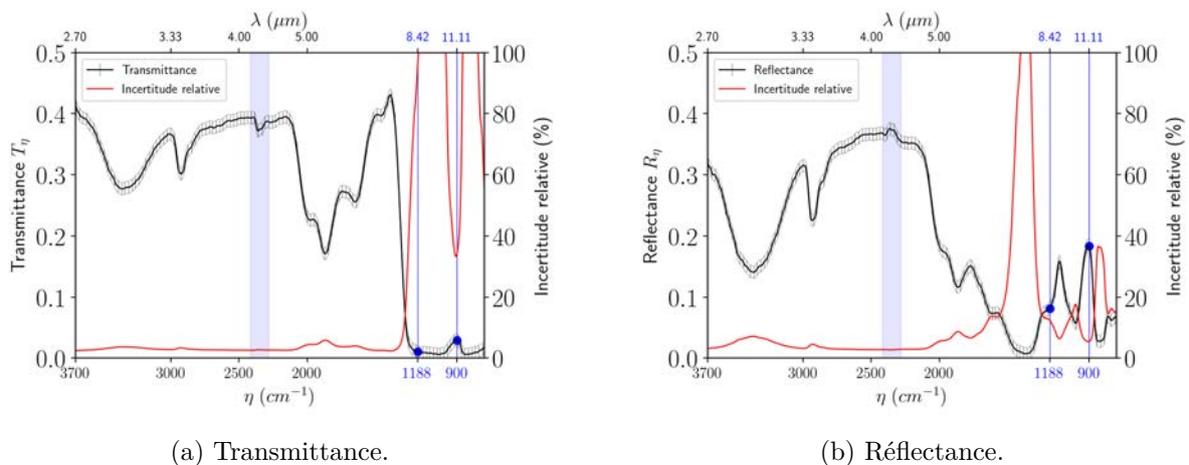


Figure 4.5 – Spectres moyens de (a) transmittance et de (b) réflectance d'un échantillon de feutre Quartzel. La bande spectrale grisée correspond à la bande d'absorption du CO_2 entre $\eta \simeq 2220 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,5 \mu\text{m}$) et $\eta \simeq 2400 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,17 \mu\text{m}$).

Le premier cas présenté sur la figure 4.6a correspond à une transmittance mesurée de 0,03 et à une réflectance de 0,18 à $\eta = 900 \text{ cm}^{-1}$. D'après l'ETR, l'iso-ligne qui reproduit $T_\eta = 0,03$ (respectivement $R_\eta = 0,18$) est représentée par un trait plein rouge (respectivement un trait plein vert). Cette méthode qui utilise des intersections graphiques, appelée "*contour intersection approach*" [108], permet de déterminer les coefficients κ_η et σ'_η qui sont solutions du problème inverse en traçant l'ensemble des couples $(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)$ sous la forme d'iso-lignes qui, d'après l'ETR, reproduisent les valeurs de transmittance et de réflectance mesurées. S'il existe une intersection de ces iso-lignes, alors nous obtenons un couple $(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)$ qui est solution du problème inverse. Si cette intersection est unique, alors la solution du problème inverse est également unique. S'il n'y a aucune intersection, alors le problème inverse n'admet pas de solution. Sur la figure 4.6a, les iso-lignes correspondant à $T_\eta = 0,03$ et $R_\eta = 0,18$ admettent une unique intersection à $\kappa_\eta = 3,90 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma'_\eta = 7,44 \text{ cm}^{-1}$.

Le même raisonnement est valable pour le deuxième cas présenté figure 4.6b pour lequel les mesures de transmittance et de réflectance correspondent à $T_\eta = 0,01$ et $R_\eta = 0,08$ à $\eta = 1188 \text{ cm}^{-1}$. Nous apercevons une unique intersection à $\kappa_\eta = 7,62 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma'_\eta = 4,92 \text{ cm}^{-1}$.

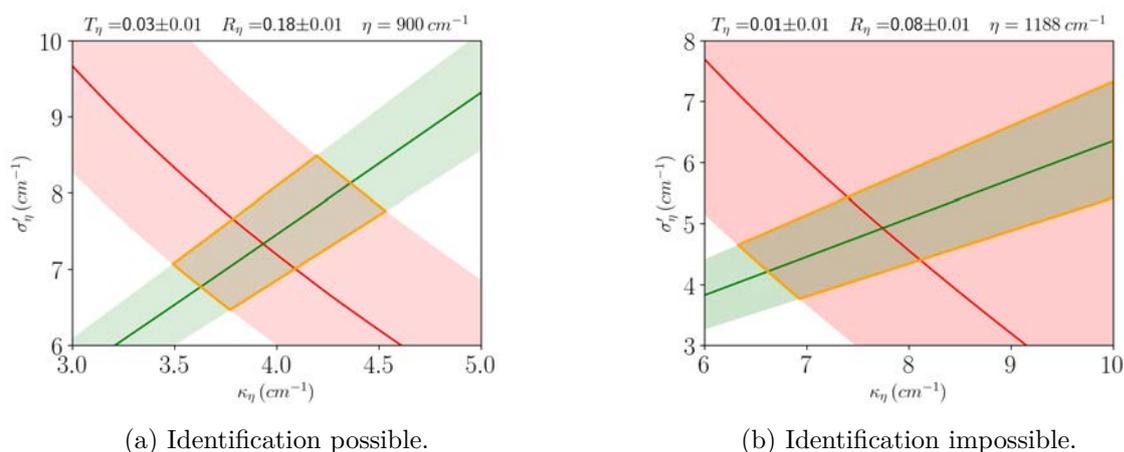


Figure 4.6 – Solutions possibles κ_η et σ'_η à (a) $\eta = 900 \text{ cm}^{-1}$ et (b) $\eta = 1188 \text{ cm}^{-1}$ en prenant en compte les incertitudes expérimentales et l'écart-type de Monte Carlo dans l'analyse du problème inverse.

A ce niveau, MCS a permis de répondre à deux critères du caractère bien-posé du problème inverse tels que définis par Hadamard, à savoir l'existence et l'unicité de la solution du problème inverse. Le troisième critère qui reste à vérifier est la stabilité de la solution du problème inverse par rapport aux incertitudes expérimentales. En d'autres termes, l'incertitude expérimentale se propage-t-elle dans le processus d'inversion et amplifie-t-elle l'incertitude sur la solution du problème inverse ?

MCS permet facilement de prendre en compte les incertitudes expérimentales et numériques (écart-type calculé par MCS) dans l'analyse inverse. Les incertitudes expérimentales et numériques sont introduites en traçant les iso-surfaces correspondant à $T_\eta \pm U_\eta(T_\eta)$ et $R_\eta \pm U_\eta(R_\eta)$ où U_η est la somme de l'incertitude expérimentale et de l'écart-type MCS (incertitude numé-

rique).

Sur la figure 4.6a, les iso-surfaces correspondant à $T = 0,03 \pm 0,01$ (incertitude relative de 30%) et $R = 0,18 \pm 0,01$ (incertitude relative de 4%) sont représentées en rouge et en vert. L'intersection des deux surfaces, représentée par le polygone à bords orange, donne tous les couples $(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)$ qui sont solutions du problème inverse en prenant en compte l'incertitude expérimentale et l'écart-type MCS : $\kappa_\eta \in [3,45 \text{ cm}^{-1}; 4,50 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [6,57 \text{ cm}^{-1}; 8,61 \text{ cm}^{-1}]$.

A l'opposé, sur la figure 4.6b, les incertitudes relatives sont de 100% pour la transmittance et 10% pour la réflectance. Les solutions du problème inverse ne sont pas bornées mais infinies puisque tous les couples $(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)$ inclus dans le polygone orange infini sont solutions ($\kappa_\eta \geq 6,25 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma'_\eta \geq 3,75 \text{ cm}^{-1}$). Dans ce cas de figure (lorsque la transmittance est inférieure ou égale à 0,01), il n'est pas possible d'identifier κ_η et σ'_η à partir de mesures de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques. Pour tendre vers un problème inverse bien-posé, il faudrait utiliser d'autres types de mesures et/ou d'autres modèles radiatifs.

Ces exemples montrent comment MCS permet de déterminer l'existence, l'unicité et la stabilité de la solution du problème inverse. La méthode permet également de définir les zones spectrales où l'identification est possible. Pour l'échantillon feutre de Quartzel étudié ici, ces zones sont $\eta \in [1245 \text{ cm}^{-1}; 3700 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [870 \text{ cm}^{-1}; 950 \text{ cm}^{-1}]$. Dans les autres zones spectrales $\eta \in [950 \text{ cm}^{-1}; 1245 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 870 \text{ cm}^{-1}]$, il n'est pas possible d'identifier simultanément κ_η et σ'_η à partir des mesures normales-hémisphériques effectuées.

2.2.2 Analyse de sensibilités

MCS a permis d'obtenir en un seul calcul une grandeur radiative exprimée sous la forme d'un polynôme simple et défini dans l'espace des paramètres à identifier. Grâce à ce polynôme, une étude de sensibilité aux paramètres peut aisément être menée comme nous allons le voir dans cette sous-section. Dans le problème inverse de ce chapitre, nous cherchons à identifier deux paramètres ($n = 2$) à partir de deux mesures indépendantes ($m = 2$) pour chaque nombre d'onde η . Pour alléger les écritures, l'indice η a été retiré dans cette sous-section.

L'analyse de la qualité de la solution du problème inverse repose principalement sur le traitement de la matrice de sensibilités $\underline{\underline{J}}$. Une des premières étapes est graphique et consiste en l'observation de la sensibilité de chacun des paramètres choisis lorsque la fonction objectif atteint un minimum. Ici, les différents paramètres sont de même dimension (inverse d'une longueur exprimée en cm^{-1}), les différentes sensibilités sont donc comparables les unes aux autres. Il est ainsi possible de connaître l'impact d'un paramètre sur le résultat du problème inverse. Une grande sensibilité correspond à une grande influence du paramètre sur la grandeur estimée et induira aussi une grande précision lors de son estimation. A l'opposé, lorsque la sensibilité tend vers 0, le paramètre à identifier a une faible influence sur la grandeur estimée et son estimation sera moins précise (lorsque la sensibilité locale tend vers 0, l'identification des paramètres est difficile voire impossible car le modèle est "insensible" aux paramètres).

La matrice de sensibilités \mathbf{J} est constituée des sensibilités de la transmittance et de la réflectance aux coefficients d'absorption et de diffusion réduit. Les sensibilités J_{ij} s'obtiennent en dérivant les expressions polynomiales de la transmittance et de la réflectance par rapport aux coefficients d'absorption et de diffusion :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma')}{\partial \kappa} &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{a_{j,k}} \frac{-j}{\widehat{\beta}(1-\widetilde{P}_s)} \left(\frac{\widehat{\beta}-\kappa-\sigma'}{\widehat{\beta}(1-\widetilde{P}_s)} \right)^{j-1} \left(\frac{\sigma'}{\widetilde{\beta P}_s} \right)^k \\ \frac{\partial T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma')}{\partial \sigma'} &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{a_{j,k}} \left(\frac{\widehat{\beta}-\kappa-\sigma'}{\widehat{\beta}(1-\widetilde{P}_s)} \right)^{j-1} \left(\frac{\sigma'}{\widetilde{\beta P}_s} \right)^{k-1} \left(\frac{-j}{\widehat{\beta}(1-\widetilde{P}_s)} \frac{\sigma'}{\widetilde{\beta P}_s} + \frac{k}{\widetilde{\beta P}_s} \frac{\widehat{\beta}-\kappa-\sigma'}{\widehat{\beta}(1-\widetilde{P}_s)} \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Cette équation est également valable pour la réflectance si nous prenons les coefficients $\overline{b_{j,k}}$. Les polynômes obtenus par MCS permettent d'estimer la transmittance et la réflectance ainsi que leurs sensibilités dans tout l'espace des paramètres $\kappa \in [0 \text{ cm}^{-1}; 10 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma' \in [0 \text{ cm}^{-1}; 10 \text{ cm}^{-1}]$. Nous pouvons donc générer des iso-valeurs de sensibilités locales en fonction de κ et σ' comme présentées sur la figure 4.7. Raisonnons sur la sensibilité de la transmittance au coefficient d'absorption (figure 4.7a). Celle-ci diminue (en valeur absolue) pour tendre vers 0 lorsque le milieu devient optiquement épais en absorption et en diffusion (κ et σ tendent vers 10 cm^{-1}). De même, la sensibilité de la transmittance au coefficient de diffusion (figure 4.7b) diminue (en valeur absolue) pour tendre vers 0 lorsque κ et σ prennent des valeurs élevées. Ces zones correspondent aussi aux régions où la transmittance devient inférieure à 0,01 sur les iso-lignes de la figure 4.4a.

Le problème inverse présenté ici est non-linéaire puisque la matrice Jacobienne dépend d'au moins un paramètre β_j de $\boldsymbol{\beta} = [\kappa; \sigma']$. Pour minimiser la fonction objectif, le problème doit donc être linéarisé en développant la fonction $f(\boldsymbol{\beta})$ en séries de Taylor à l'ordre 1 autour de la solution $\boldsymbol{\beta}^k$ de la k -ème itération du processus itératif :

$$\begin{bmatrix} T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma') \\ R_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma') \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma') \\ R_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma') \end{bmatrix}_k + \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma')}{\partial \kappa} & \frac{\partial T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma')}{\partial \sigma'} \\ \frac{\partial R_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma')}{\partial \kappa} & \frac{\partial R_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma')}{\partial \sigma'} \end{bmatrix}_k}_{\mathbf{J}_k} \begin{bmatrix} \kappa_{k+1} - \kappa_k \\ \sigma'_{k+1} - \sigma'_k \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

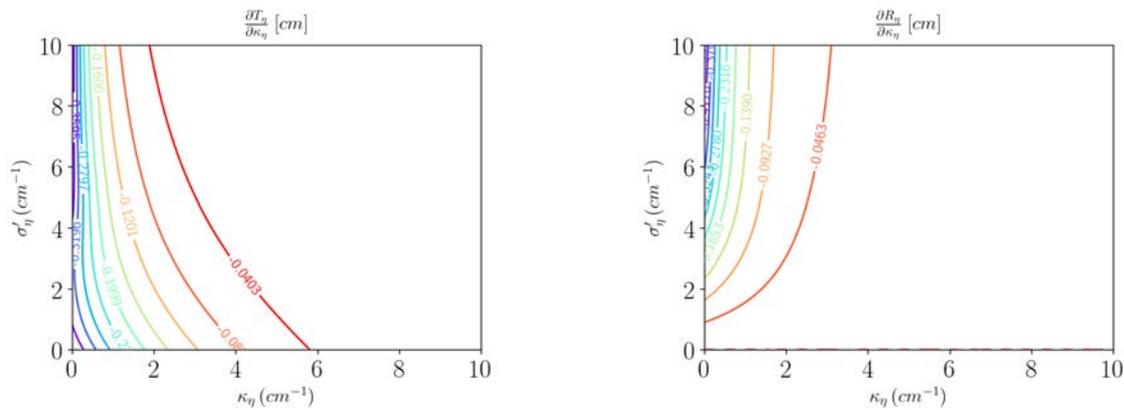
L'équation itérative qui permet d'obtenir le vecteur paramètre $\boldsymbol{\beta}$ est :

$$\begin{bmatrix} \kappa \\ \sigma' \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \kappa \\ \sigma' \end{bmatrix}_k + \left((\mathbf{J}_k)^T \mathbf{J}_k \right)^{-1} (\mathbf{J}_k)^T \begin{bmatrix} T_{\text{mes}} - T_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma') \\ R_{\text{mes}} - R_{\text{MCS}}(\kappa, \sigma') \end{bmatrix}_k \quad (4.15)$$

Cette procédure itérative linéaire nécessite l'inversion de la matrice $\underline{\underline{\mathbf{A}}} = (\mathbf{J})^T \mathbf{J}$ à chaque itération k . La matrice d'information $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ joue ici un rôle fondamental puisque son conditionnement renseigne directement sur la qualité de la solution du problème inverse. Les éléments constituant la matrice d'information $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ sont composés de polynômes des paramètres que nous cherchons à identifier. En conséquence, le déterminant et le conditionnement de la matrice d'information $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ sont des fonctions définies dans l'espace des paramètres à identifier. De la même manière que pour la transmittance, la réflectance et leurs sensibilités aux paramètres, il est possible de générer des iso-lignes du déterminant et du conditionnement de la matrice d'information $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ dans l'espace

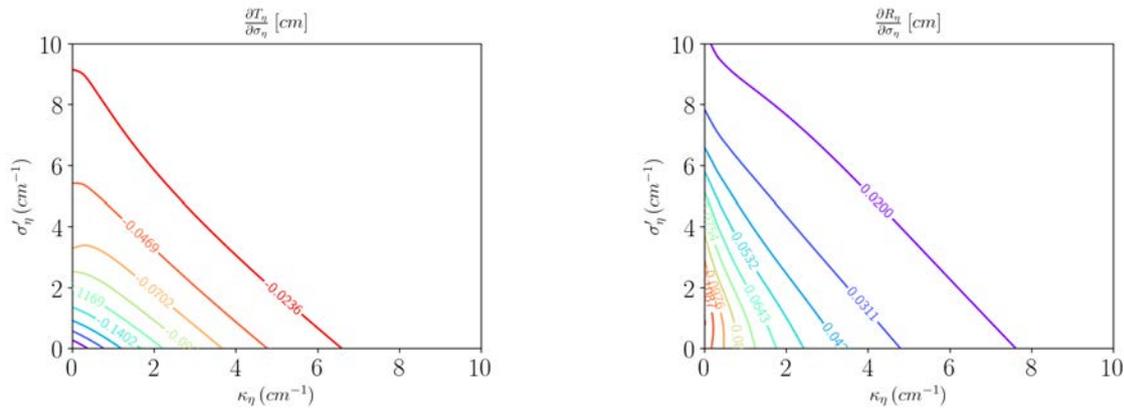
des paramètres $\kappa \in [0 \text{ cm}^{-1}; 10 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma' \in [0 \text{ cm}^{-1}; 10 \text{ cm}^{-1}]$ comme présenté sur la figure 4.8. Concernant le déterminant, celui-ci tend vers 0 lorsque le milieu devient optiquement épais. Cette zone correspond également à la région pour laquelle la transmittance est inférieure à 0,01. Dans cette zone, la matrice d'information $\underline{\underline{A}}$ n'est pas inversible et il est difficile de converger vers une solution du problème inverse. Cette conclusion se retrouve dans l'analyse des iso-lignes du nombre de conditionnement. Pour que le problème soit bien-posé, le conditionnement doit être proche de 1 (ou son logarithme proche de 0 comme sur la figure 4.8b).

Il est donc possible d'identifier les coefficients d'absorption et de diffusion à partir des mesures de transmittance et de réflectance directionnelles hémisphériques seulement lorsque la transmittance est supérieure à 0,01.



(a) Sensibilité de la transmittance au coefficient d'absorption.

(b) Sensibilité de la réflectance au coefficient d'absorption.



(c) Sensibilité de la transmittance au coefficient de diffusion réduit.

(d) Sensibilité de la réflectance au coefficient de diffusion réduit.

Figure 4.7 – Sensibilités de la transmittance et de la réflectance aux coefficients d'absorption et de diffusion réduit.

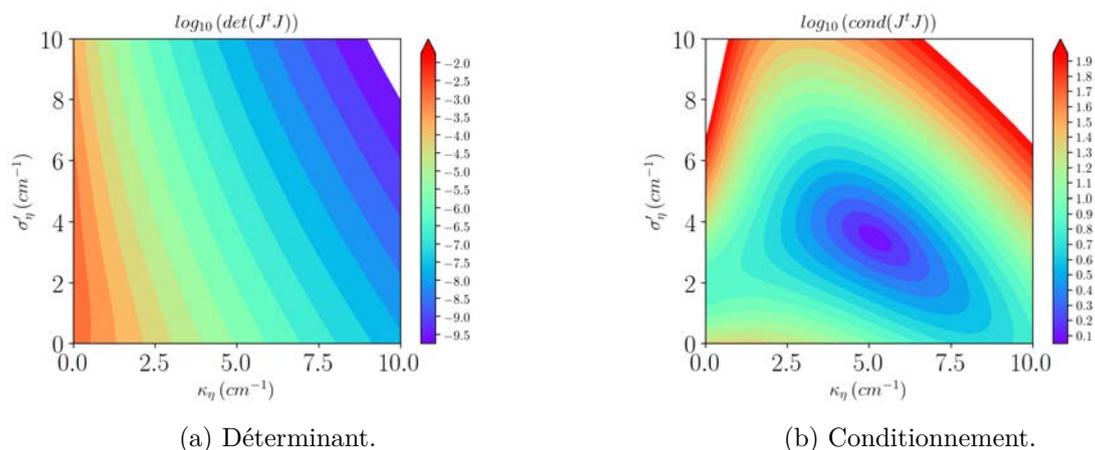


Figure 4.8 – (a) Déterminant et (b) conditionnement de la matrice d'information dans l'espace des paramètres κ_η et σ'_η .

2.3 Identification des propriétés radiatives et analyse post-convergence

MCS constitue un outil complet pour l'analyse du problème inverse puisqu'il a permis :

- de résoudre le modèle radiatif direct et de formuler la transmittance et la réflectance sous la forme d'un polynôme où les propriétés radiatives à identifier apparaissent explicitement ;
- d'analyser le caractère bien-posé ou mal-posé du problème inverse ;
- de définir les zones spectrales où l'identification des propriétés radiatives est possible ($\eta \in [1245 \text{ cm}^{-1}; 3700 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [870 \text{ cm}^{-1}; 950 \text{ cm}^{-1}]$) pour le cas particulier du matériau étudié.

Pour identifier κ_η et σ'_η , la fonction objectif (ou fonction coût) définie précédemment doit être minimisée. Lorsque le problème est bien-posé, n'importe quel algorithme d'optimisation peut être utilisé pour minimiser la fonction objectif. Nous utilisons ici l'algorithme de Levenberg-Marquardt.

```

for  $\eta = 660 \text{ cm}^{-1}$  to  $3700 \text{ cm}^{-1}$  do
  if  $T_\eta \geq 0,01$  then
     $k = 0$ 
    Input:  $\beta_\eta = \beta_{\eta,k} = (\kappa_{\eta,k}; \sigma'_{\eta,k})$ 
     $S(\beta_{\eta,k}) = (T_{\text{MCS},\eta}(\beta_{\eta,k}) - T_{\text{mes},\eta} \pm U(T_\eta))^2 + (R_{\text{MCS},\eta}(\beta_{\eta,k}) - R_{\text{mes},\eta} \pm U(R_\eta))^2$ 
    while  $S(\beta_{\eta,k}) > \varepsilon = 10^{-16}$  do
      Compute  $\beta_{\eta,k+1}$  (Levenberg-Marquardt algorithm)
       $\beta_{\eta,k} \leftarrow \beta_{\eta,k+1}$ 
      Estimation of  $S(\beta_{\eta,k})$ 
    end
    Output: Identified radiative properties  $\beta_{\eta,k+1} \pm U(\beta_{\eta,k+1})$ 
  end
end

```

Figure 4.9: Algorithme d'identification des propriétés radiatives.

Dans la procédure d'inversion décrite figure 4.9, les polynômes obtenus par MCS pour la transmittance et la réflectance sont utilisés pour résoudre le modèle radiatif direct et évitent la coûteuse résolution de l'ETR à chaque itération d'inversion. Nous ne réalisons qu'une seule et unique simulation MCS durant tout le processus d'inversion, de la phase d'analyse préliminaire jusqu'à la minimisation de la fonction objectif. Le critère de convergence pour la minimisation de la fonction objectif a été fixé à $\varepsilon = 10^{-16}$.

Les coefficients d'absorption et de diffusion réduit identifiés sont représentés sur la figure 4.10 avec leurs incertitudes associées. Au nombre d'onde $\eta = 900 \text{ cm}^{-1}$ ayant servi à l'analyse préliminaire (cf. figure 4.6a), nous retrouvons bien $\kappa_\eta = 3,90 \text{ cm}^{-1} \in [3,45 \text{ cm}^{-1}; 4,50 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta = 7,44 \text{ cm}^{-1} \in [6,57 \text{ cm}^{-1}; 8,61 \text{ cm}^{-1}]$.

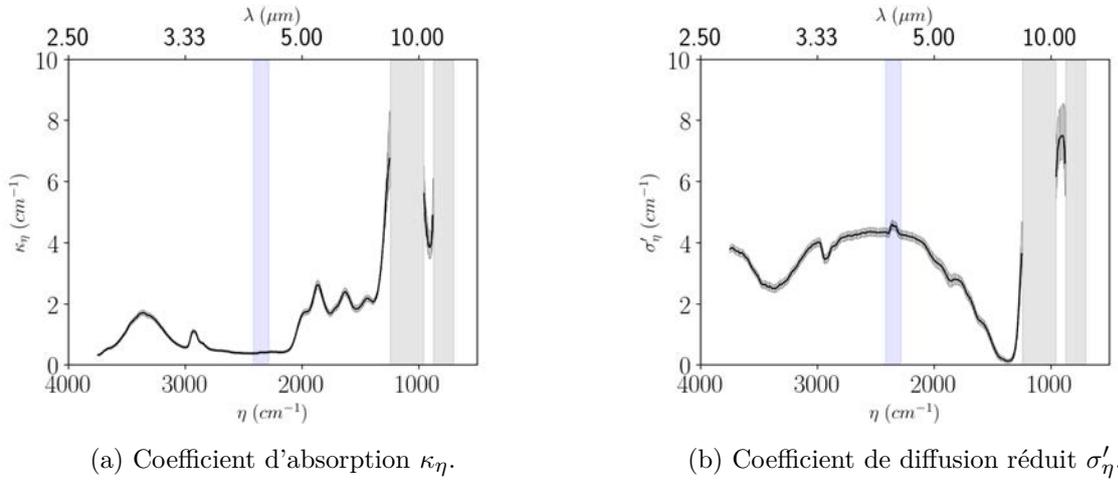


Figure 4.10 – Coefficients (a) d'absorption et (b) de diffusion réduit identifiés à température ambiante en utilisant les polynômes obtenus par MCS. Les bandes grises ($\eta \in [950 \text{ cm}^{-1}; 1245 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 870 \text{ cm}^{-1}]$) correspondent aux zones spectrales où l'identification n'est pas possible.

Après convergence du processus de minimisation de la fonction objectif et identification des propriétés radiatives, les spectres de transmittance et de réflectance obtenus par MCC, MCS et par la méthode des deux-flux (M2FA) développée par Dombrovsky *et al.* [41] à partir des propriétés identifiées peuvent être comparés. Ces résultats sont présentés sur la figure 4.11. Il est logique de trouver une parfaite concordance entre les mesures et les résultats obtenus par les polynômes MCS puisque la fonction objectif a atteint le seuil de convergence fixé à 10^{-16} . Le modèle M2FA reproduit également les mêmes spectres de transmittance et de réflectance à partir des propriétés radiatives identifiées. Cependant, bien que MCS présente des résultats de transmittance et de réflectance similaires à MCC (voir figure 4.4), il est possible que la probabilité arbitraire \tilde{P}_s induise un écart si elle est mal choisie. Une manière de vérifier le bon choix de la probabilité arbitraire serait d'utiliser les propriétés radiatives identifiées dans le calcul de la probabilité idéale de diffusion $P_{s,\eta}$ définie dans l'équation 4.12. L'évolution de la probabilité idéale $P_{s,\eta}$ est donnée figure 4.11c. Sur la majeure partie du spectre, la probabilité arbitraire idéale calculée à partir des propriétés radiatives identifiées est proche de 0,2, ce qui indique

que le choix arbitraire initial de 0,5 n'était pas optimal. Dans certaines parties du spectre, par exemple lorsque la réflectance est proche de 0 (donc un coefficient de diffusion réduit proche de 0), une probabilité arbitraire $\tilde{P}_s = 0$ aurait été plus judicieuse. Aussi, entre $\eta = 870 \text{ cm}^{-1}$ et $\eta = 950 \text{ cm}^{-1}$, la probabilité arbitraire idéale serait 0,5. Malgré la différence entre la probabilité arbitraire choisie et la probabilité arbitraire idéale dans ces deux zones spectrales, MCS et MCC reproduisent les mêmes spectres de transmittance et de réflectance.

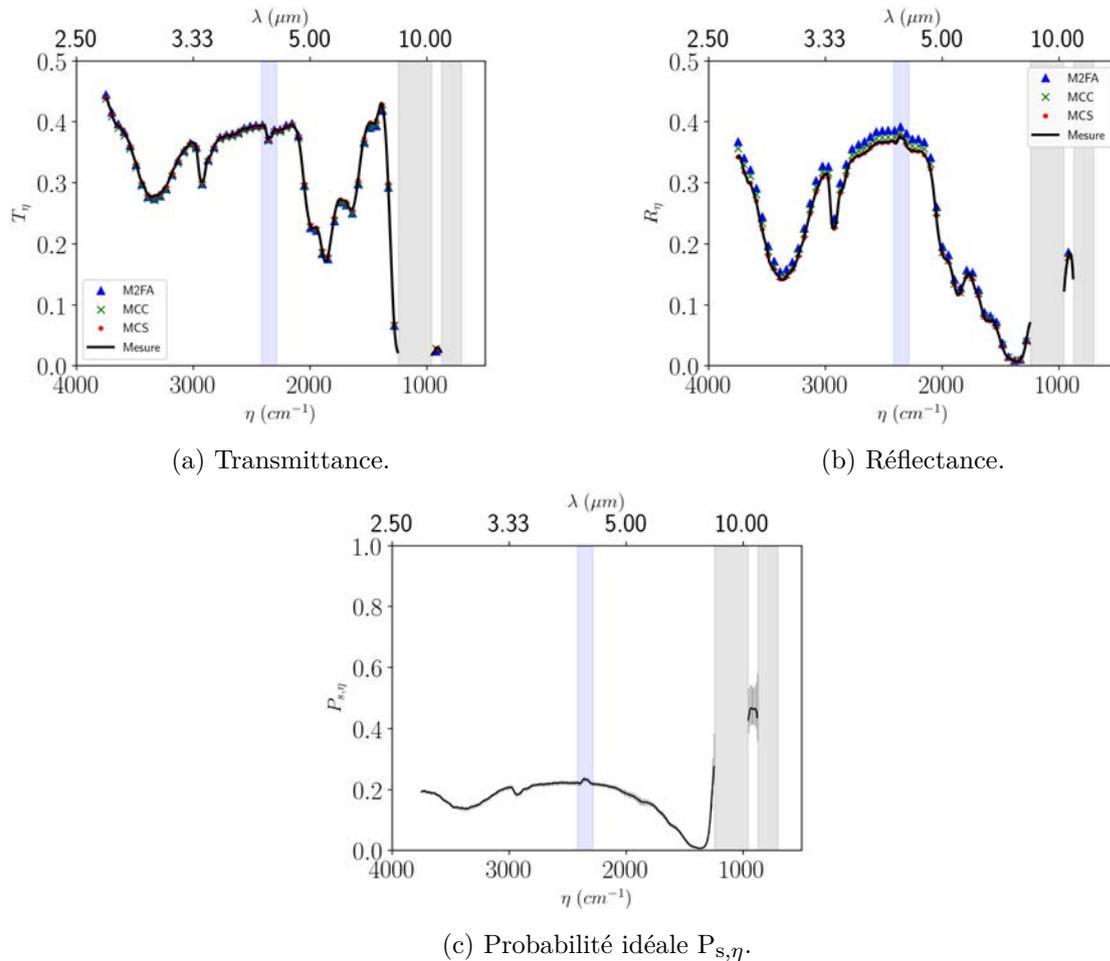


Figure 4.11 – (a-b) Comparaison des spectres de transmittance et de réflectance après inversion et (c) probabilité arbitraire idéale après identification des propriétés radiatives.

De plus, après convergence, nous pouvons évaluer les sensibilités de la transmittance et de la réflectance aux propriétés radiatives identifiées. Les spectres de sensibilités sont illustrés figure 4.12. Pour la transmittance (figure 4.12a), celle-ci est "sensible" aux paramètres à identifier dans tout le spectre sauf à proximité des bandes grisées ($\eta \in [950 \text{ cm}^{-1}; 1245 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 870 \text{ cm}^{-1}]$). Ces bandes grisées correspondent aux zones où la mesure de transmittance n'est pas exploitable (inférieure à 0,01) et dans lesquelles l'analyse préliminaire par MCS a montré qu'il n'est pas possible d'identifier les coefficients d'absorption et de diffusion réduit. Dans ces bandes, la sensibilité de la transmittance au coefficient d'absorption et au coefficient de diffusion réduit tend vers 0. Nous retrouvons les mêmes conclusions pour la sensibilité de la réflectance aux propriétés radiatives (figure 4.12b) : elle tend également vers 0 pour des nombres

d'onde proches des bandes spectrales grisées. Enfin, dans tout le spectre, le conditionnement de la matrice d'information prend des valeurs raisonnables et proches de 1, ce qui montre que le problème est bien-posé sur l'ensemble du spectre.

Cette analyse post-convergence conforte les conclusions tirées de l'analyse pré-inversion qui a pu être menée grâce aux polynômes MCS.

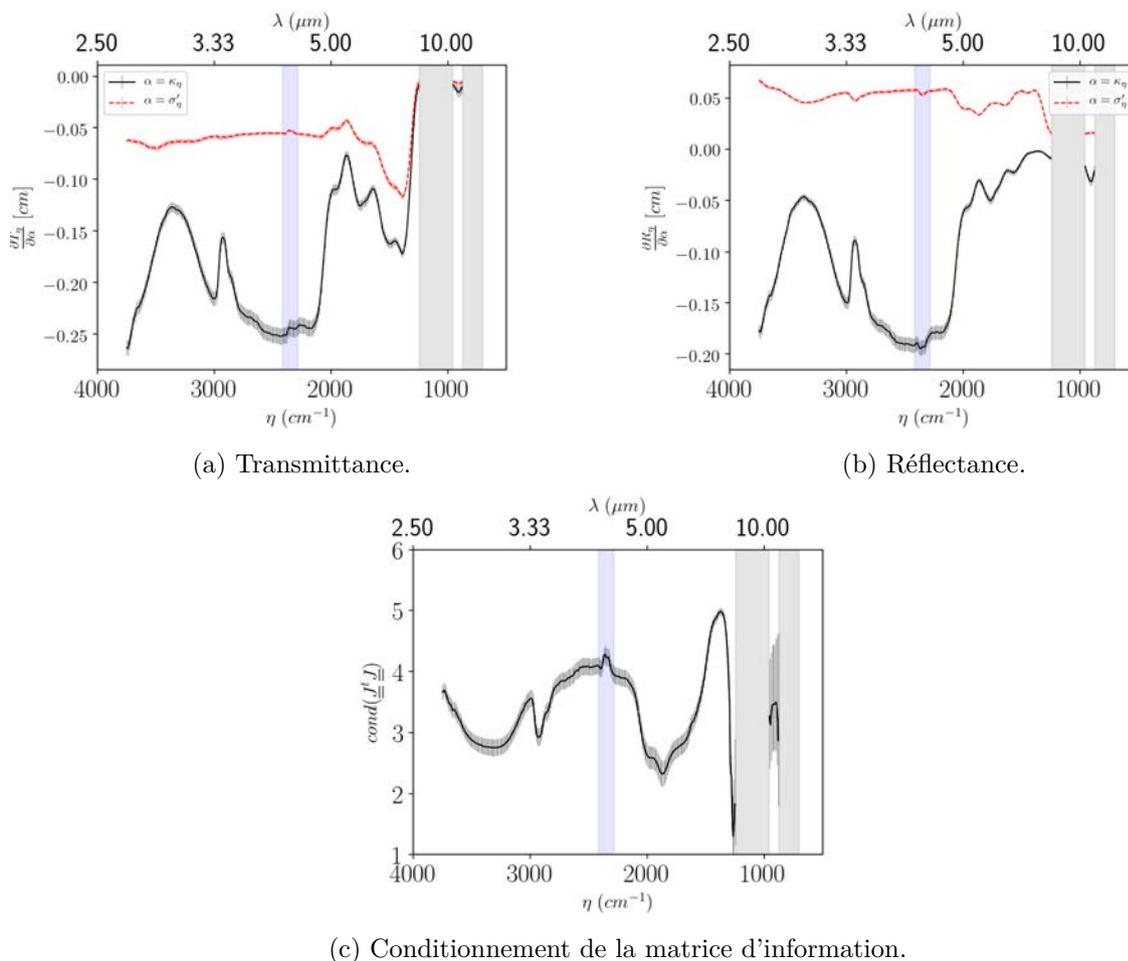


Figure 4.12 – Sensibilités de (a) la transmittance et de la (b) réflectance aux coefficients d'absorption et de diffusion réduit ; et (c) conditionnement de la matrice d'information après identification des propriétés radiatives.

3 Influence des choix arbitraires sur l'identification

Afin de pouvoir réaliser la simulation MCS préliminaire à l'analyse inverse, nous avons défini un certain nombre de paramètres de manière arbitraire. Ces paramètres sont le coefficient d'extinction global $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$ majorant de $\kappa_{\eta} + \sigma'_{\eta}$ et la probabilité arbitraire de diffusion $\tilde{P}_s = 0,5$. Ils ont été choisis indépendants du nombre d'onde afin que les coefficients \bar{a}_{jk} et \bar{b}_{jk} des polynômes de transmittance et de réflectance soient indépendants du nombre d'onde. L'aspect spectral se retrouve uniquement dans les coefficients d'absorption et de diffusion réduit. Le choix de $\hat{\beta}$ et \tilde{P}_s a une influence sur l'écart-type MCS et donc sur l'identification des propriétés

radiatives.

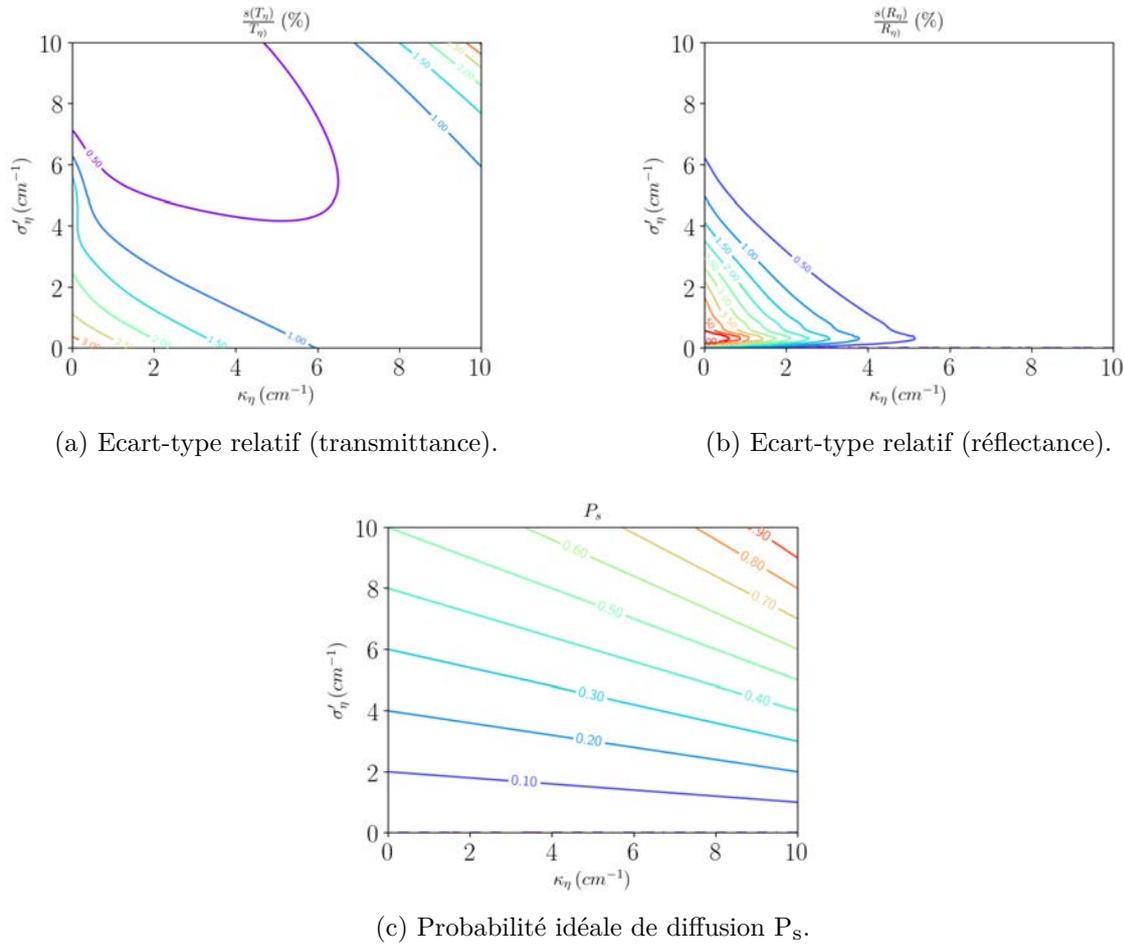


Figure 4.13 – Iso-lignes de (a) $\frac{s(T_\eta)}{T_\eta}$, (b) $\frac{s(R_\eta)}{R_\eta}$ et (c) P_s dans l'espace κ_η et σ'_η .

Nous avons montré dans le chapitre 2 et en annexe A que l'écart-type d'une simulation MCS est une fonction des coefficients d'absorption et de diffusion. Tout comme la transmittance et la réflectance, l'écart-type est également estimé par MCS dans tout l'espace des paramètres. Il est ainsi possible de générer des iso-lignes des écart-types relatifs définis par $\frac{s(T_\eta)}{T_\eta}$ et $\frac{s(R_\eta)}{R_\eta}$. Pour $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$ et $\tilde{P}_s = 0,5$, les iso-lignes des écart-types relatifs sont représentées sur les figures 4.13a et 4.13b. A ce stade, l'analyse des iso-lignes des écart-types relatifs consiste à localiser les zones $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$ où ces écart-types sont minimaux ou maximaux. Ce n'est qu'en analysant la figure 4.13c que les iso-lignes des écart-types relatifs prennent leur sens. En effet, sur la figure 4.13c sont représentées les iso-lignes de la probabilité idéale de diffusion P_s dans le même espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$. Nous avons expliqué dans la sous-section 2.3 du chapitre 2 que la probabilité arbitraire de diffusion \tilde{P}_s doit être choisie proche du ratio du nombre de diffusions sur le nombre total de collisions défini par l'équation 4.12 afin d'éviter des problèmes de convergence. Ce ratio dit probabilité idéale de diffusion dépend de κ_η , σ'_η et $\hat{\beta}$. Ainsi, les écart-types sont minimaux dans les zones de κ_η et σ'_η où la probabilité idéale de diffusion est proche de 0,5. Dès que l'on s'éloigne

de l'iso-ligne $P_s = 0,5$, l'écart-type relatif augmente.

L'analyse que nous venons de mener est réalisée avant l'identification des propriétés radiatives et nous renseigne sur les potentielles zones dans lesquelles le choix de \tilde{P}_s pourrait ne pas convenir pour l'identification. Il faudrait que l'écart-type de MCS n'introduise que peu d'incertitude supplémentaire, de telle sorte que la somme de l'écart-type de MCS et des incertitudes expérimentales permette de bien identifier κ_η et σ'_η . Pour vérifier cela, la figure 4.14 montre l'évolution spectrale de l'écart-type relatif de MCS après convergence de l'algorithme de minimisation et identification des propriétés radiatives. Ici, pour $\tilde{P}_s = 0,5$, l'écart-type moyen de la transmittance et de la réflectance sont de 1%, avec un maximum de 2,1% pour la transmittance et de 2,6% pour la réflectance. Avec ces incertitudes numériques, l'identification des propriétés radiatives a été possible.

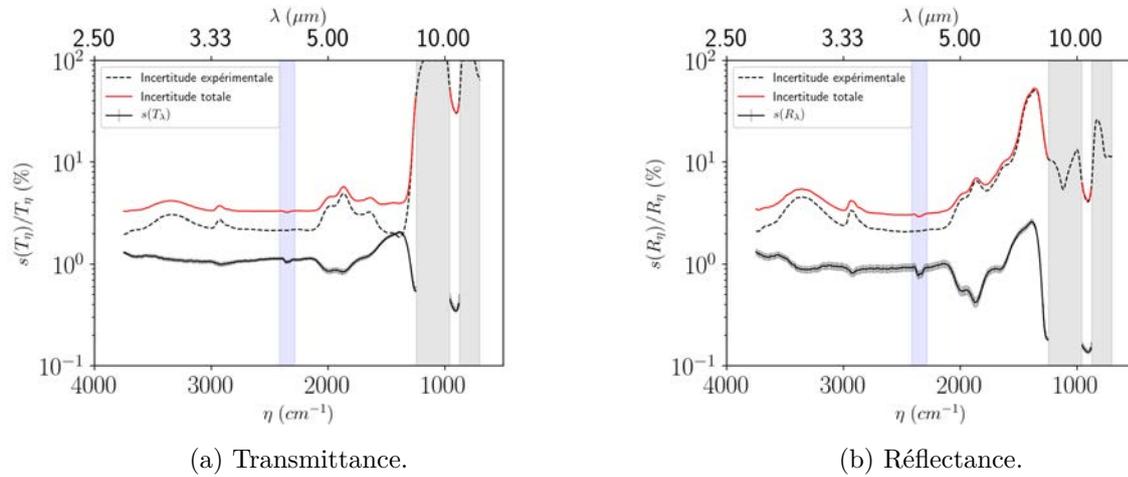


Figure 4.14 – Ecart-type relatif MCS de (a) la transmittance et de (b) la réflectance après identification des propriétés radiatives.

3.1 Influence de la probabilité arbitraire \tilde{P}_s

Afin d'évaluer les conséquences du choix de \tilde{P}_s sur l'identification des propriétés radiatives et sur l'écart-type relatif de MCS, nous avons réalisé 4 simulations MCS en fixant $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$ et en faisant varier \tilde{P}_s , puis les propriétés radiatives ont été identifiées quatre fois pour chacune des valeurs de \tilde{P}_s choisies. Les quatre valeurs de \tilde{P}_s choisies sont 0,1, 0,2, 0,5 et 0,8. Pour éviter un écart-type relatif de MCS trop élevé et se placer ainsi dans des zones où l'identification des propriétés radiatives n'est plus possible, seule l'incertitude expérimentale est prise en compte dans l'identification de κ_η et de σ'_η .

Dans un premier temps, nous pouvons évaluer l'influence de \tilde{P}_s sur l'identification de κ_η et de σ'_η comme illustré sur la figure 4.15. Pour $\tilde{P}_s \leq 0,5$, nous ne constatons aucune différence sur les propriétés radiatives identifiées. Pour $\tilde{P}_s = 0,8$, le coefficient d'absorption est sur-estimé tandis que le coefficient de diffusion est sous-estimé. Le choix de $\tilde{P}_s = 0,8$ est à rejeter car il

ne respecte pas le ratio du nombre de diffusions sur le nombre total de collisions qui doit être proche de 0,2 sur la majeure partie du spectre (voir figure 4.11c).

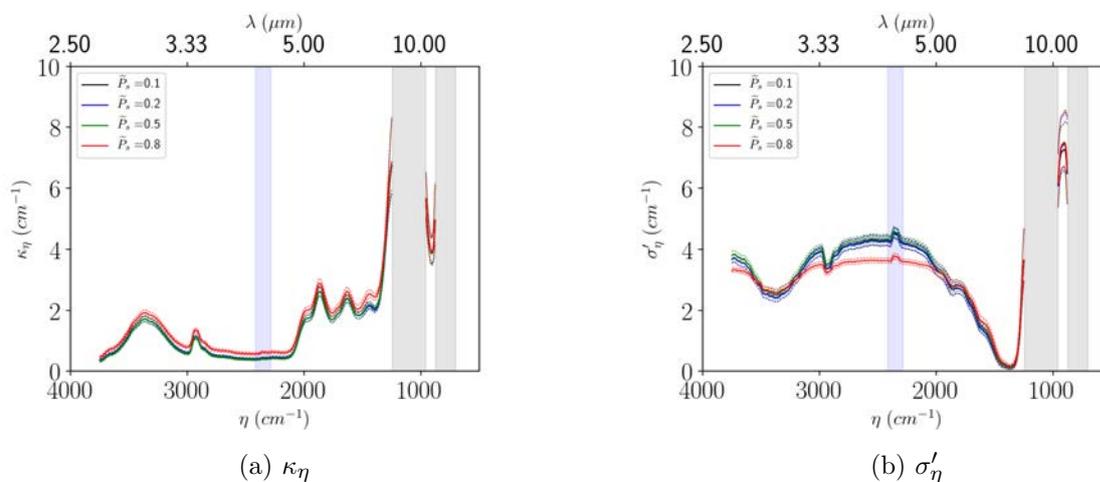


Figure 4.15 – Coefficients (a) d'absorption et (b) de diffusion identifiés en utilisant les polynômes obtenus par MCS pour différentes valeurs de \tilde{P}_s .

Ces conclusions se retrouvent dans l'analyse des écart-types relatifs de la figure 4.16. Pour $\tilde{P}_s \leq 0,5$, l'écart-type relatif moyen est inférieur à 1%. L'écart-type relatif moyen est minimal pour $\tilde{P}_s = 0,2$ qui correspond au choix cohérent avec la probabilité idéale de diffusion (voir figure 4.11c). Cependant, pour $\tilde{P}_s = 0,8$, l'écart-type relatif moyen dépasse les 30% avec un maximum de l'ordre de 40%. Si nous avons choisi $\tilde{P}_s = 0,8$, MCS aurait introduit une incertitude supplémentaire qui, ajoutée à l'incertitude expérimentale sur la transmittance et la réflectance, aurait restreint le domaine spectral dans lequel l'identification des propriétés radiatives est possible.

Nous voyons clairement l'influence du choix arbitraire de la probabilité de diffusion \tilde{P}_s sur les propriétés radiatives identifiées et sur les écart-types MCS. Une question évidente se pose à ce stade de l'analyse. Comment bien choisir la probabilité arbitraire \tilde{P}_s sans aucune information *a priori* sur le matériau hétérogène dont nous cherchons à identifier les propriétés radiatives? La réponse à cette question dépend de la qualité de la solution inverse recherchée, et plusieurs pistes peuvent être explorées :

1. Nous pouvons dans un premier temps nous contenter de choisir $\tilde{P}_s = 0,5$ qui semble être un bon compromis entre les faibles et les grandes épaisseurs optiques de diffusion, d'évaluer l'écart-type de MCS et de le prendre en compte dans le processus d'inversion.
2. Il est possible de réaliser quelques simulations MCS pour quelques valeurs de \tilde{P}_s judicieusement choisies entre 0 et 1. Au lieu d'avoir un polynôme pour la transmittance et un polynôme pour la réflectance, nous aurions alors p polynômes de transmittance et p polynômes de réflectance. Selon les valeurs de κ_η et de σ'_η prises pendant l'inversion, le polynôme sera choisi selon la valeur prise par le rapport $\frac{\sigma'_\eta}{\tilde{\beta} - \kappa_\eta}$ (probabilité idéale de diffusion) qui devra être la plus proche possible de la probabilité arbitraire \tilde{P}_s choisie pour

construire le polynôme. D'un point de vue numérique, cette piste sera toujours avantageuse comparée à l'utilisation d'un algorithme MCC dans le processus inverse. En effet, seules p simulations MCS seront réalisées en amont du processus inverse afin de construire p polynômes, tandis que l'utilisation d'un algorithme MCC induit une simulation de Monte Carlo à chaque itération du processus inverse.

3. En se basant sur le développement en série de polynômes orthogonaux présenté dans la section 3 du chapitre 2, il est possible de conserver la probabilité arbitraire de diffusion \tilde{P}_s sous forme symbolique et d'exprimer la transmittance (et la réflectance) sous la forme :

$$T_\eta(\kappa_\eta, \sigma'_\eta, \tilde{P}_s) \simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{a}_{j,k,n} \left(\frac{\hat{\beta}_\eta - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\hat{\beta}_\eta(1 - \tilde{P}_{s,\eta})} \right)^j \left(\frac{\sigma'_\eta}{\hat{\beta}_\eta \tilde{P}_{s,\eta}} \right)^k \Psi_n(\tilde{P}_s)$$

où Ψ est une série de polynômes orthogonaux (par exemple les polynômes de Legendre). \tilde{P}_s n'est plus fixée égale à un scalaire, mais est considérée comme une variable aléatoire distribuée sur $[0; 1]$ tout au long des N_{MC} échantillonnages Monte Carlo. Lors du processus inverse, il suffirait de choisir \tilde{P}_s égale à la probabilité idéale de diffusion P_s .

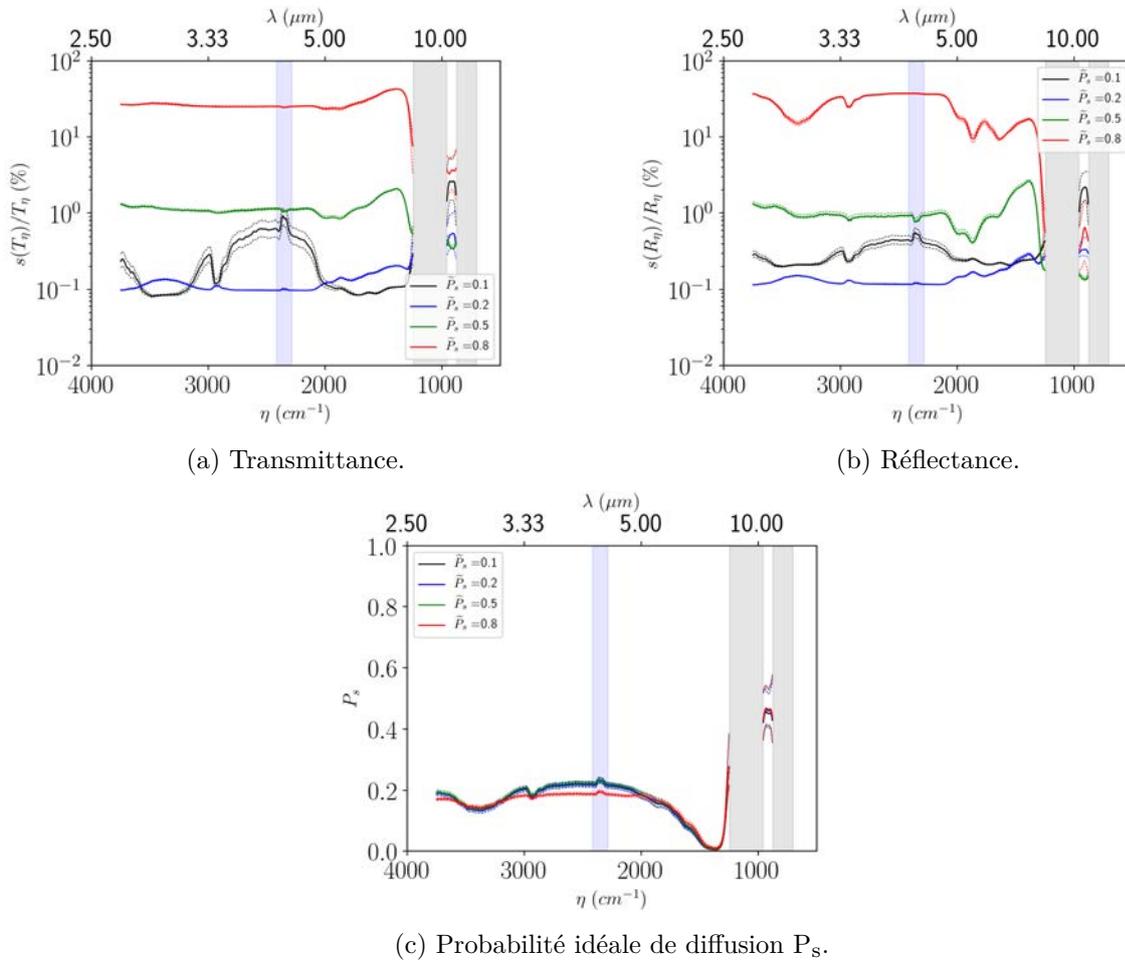


Figure 4.16 – Ecart-type relatif MCS de (a) la transmittance et de (b) la réflectance, et (c) probabilité idéale de diffusion après identification des propriétés radiatives pour différentes valeurs de \tilde{P}_s .

3.2 Influence du coefficient d'extinction $\hat{\beta}$

Enfin, il reste à évaluer l'impact du coefficient d'extinction global $\hat{\beta}$ sur l'identification des propriétés radiatives et sur l'écart-type relatif de MCS. Pour cela, nous avons réalisé quatre simulations MCS en fixant $\tilde{P}_s = 0,1$ et en faisant varier $\hat{\beta}$, puis les propriétés radiatives ont été identifiées quatre fois pour chacune des valeurs de $\hat{\beta}$ choisies. Les quatre valeurs de $\hat{\beta}$ choisies sont 20, 30, 40 et 50 cm^{-1} . Seule l'incertitude expérimentale sera prise en compte dans l'identification de κ_η et de σ'_η .

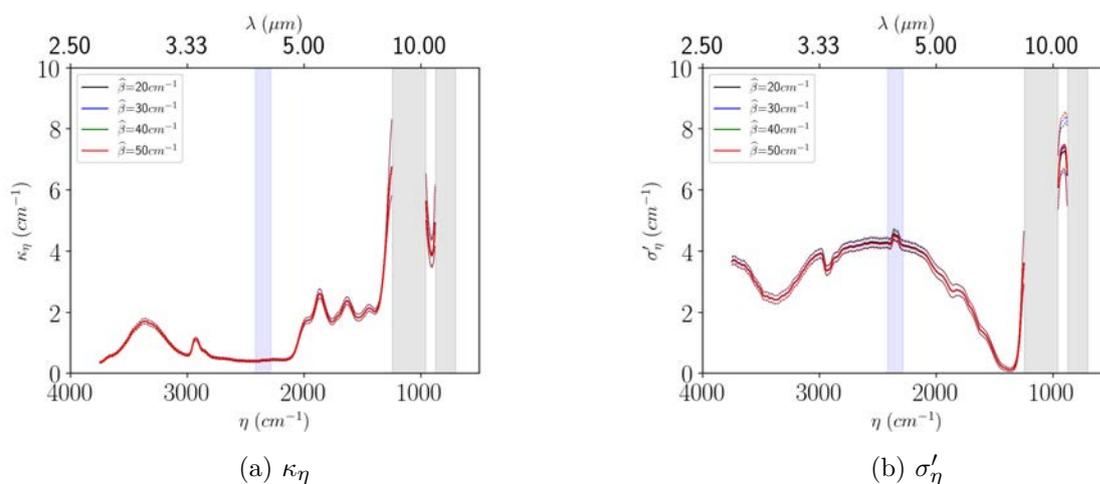


Figure 4.17 – Coefficients (a) d'absorption et (b) de diffusion identifiés en utilisant les polynômes obtenus par MCS pour différentes valeurs de $\hat{\beta}$.

Sur la figure 4.17, nous remarquons que le choix de $\hat{\beta}$ n'a aucune influence sur les propriétés radiatives identifiées. L'écart entre les quatre spectres est de l'ordre de grandeur de l'écart causé par les incertitudes expérimentales. Un très faible écart dans la bande $\eta \in [870 \text{ cm}^{-1}; 950 \text{ cm}^{-1}]$ est observé, probablement dû au mauvais choix de la probabilité arbitraire de diffusion $\tilde{P}_s = 0,1$ (cet écart reste raisonnable car inclus dans la plage d'incertitudes).

Les écart-types MCS sont inférieurs à 1% dans la majeure partie du spectre. L'écart-type relatif moyen est de l'ordre de 0,7% pour $\hat{\beta} = 20 \text{ cm}^{-1}$, tandis qu'il est de l'ordre de 0,1% pour $\hat{\beta} = 40$ ou 50 cm^{-1} . L'écart-type croît dès lors que la probabilité arbitraire de diffusion \tilde{P}_s s'éloigne de la probabilité idéale de diffusion P_s .

Nous venons d'évaluer l'influence des choix arbitraires dans l'identification des propriétés radiatives. Le choix de $\hat{\beta}$ doit seulement constituer un majorant de $\kappa_\eta + \sigma'_\eta$. En revanche, l'introduction d'une probabilité arbitraire de diffusion \tilde{P}_s introduit une incertitude numérique supplémentaire qui, ajoutée à l'incertitude expérimentale sur les mesures, peut rendre impossible l'identification des propriétés radiatives. Cela est particulièrement le cas lorsque \tilde{P}_s prend une valeur éloignée de la probabilité idéale de diffusion P_s . Une bonne convergence statistique n'est jamais garantie, d'où l'intérêt de toujours étudier l'écart-type afin d'identifier les zones pour

lesquelles le choix de \tilde{P}_s est pertinent.

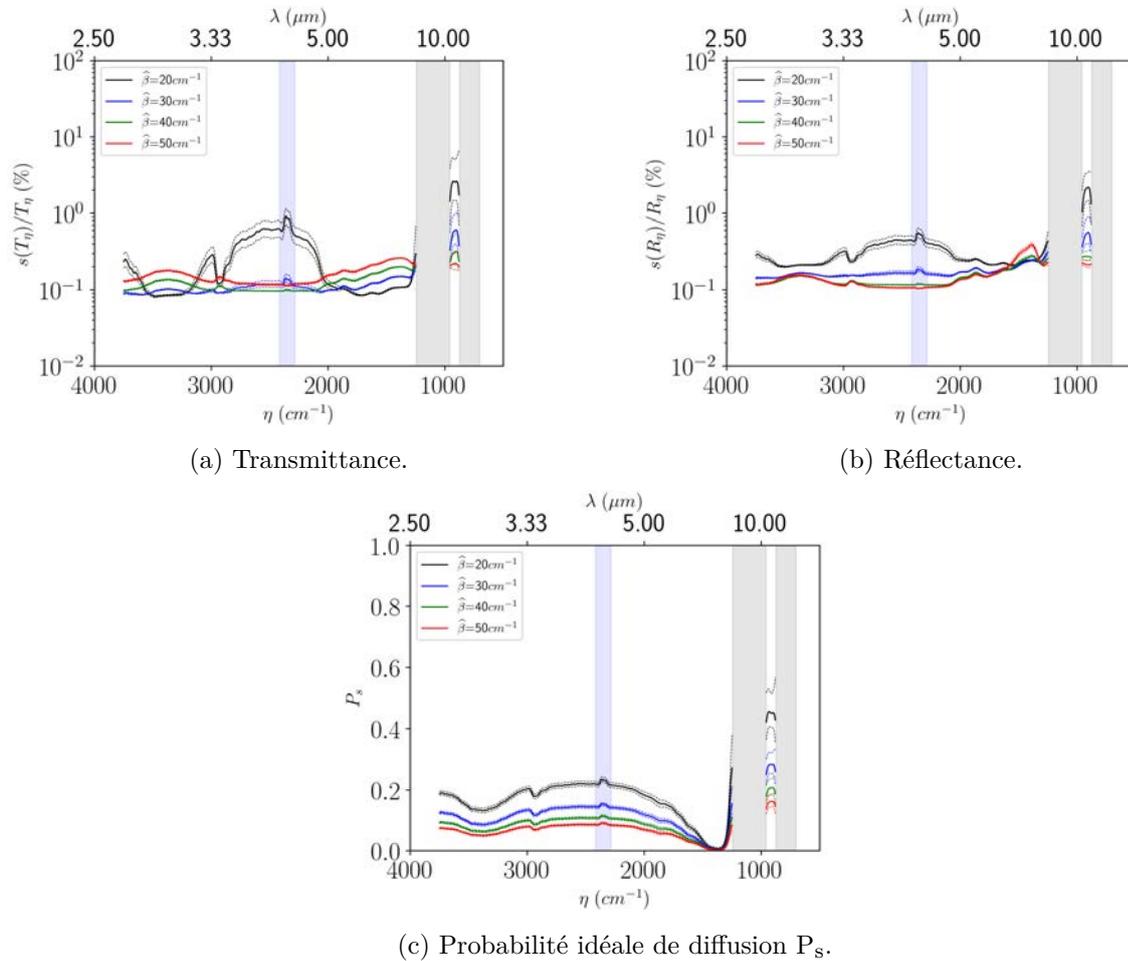


Figure 4.18 – Ecart-type relatif MCS de (a) la transmittance et de (b) réflectance, et (c) probabilité idéale de diffusion après identification des propriétés radiatives pour différentes valeurs de $\hat{\beta}$.

Conclusions du chapitre

Nous avons montré que la méthode MCS permet de mener une analyse complète d'un problème inverse grâce à une seule et unique simulation. La méthode a d'abord permis de résoudre le modèle radiatif direct (ETR) puis de formuler la grandeur radiative d'intérêt (transmittance et réflectance) sous la forme d'un polynôme dans lequel les propriétés radiatives à identifier apparaissent explicitement.

La forme polynomiale simple et pratique peut être utilisée pour analyser le caractère bien-posé ou mal-posé du problème inverse soit par une méthode purement graphique, soit par une analyse de sensibilités. En effet, l'unique simulation MCS réalisée a permis de définir toutes les grandeurs d'intérêt (transmittance, réflectance, sensibilités, conditionnement) dans l'espace des paramètres à identifier. A travers cette analyse préliminaire, nous avons défini des zones spec-

trales dans lesquelles l'identification est possible et nous avons rejeté les zones dans lesquelles l'identification n'est pas réalisable.

Lorsque le problème inverse est bien-posé (identification possible), la minimisation des écarts quadratiques entre les mesures de transmittance et de réflectance et le modèle direct a permis de déterminer les coefficients d'absorption et de diffusion réduit de l'échantillon feutre de Quartzel, ainsi que les incertitudes associées aux propriétés radiatives identifiées à température ambiante. Après convergence du processus inverse, une analyse de sensibilités a permis de confirmer les conclusions obtenues par l'analyse préliminaire à l'inversion. Enfin, nous avons évalué l'impact des choix arbitraires sur l'identification des propriétés radiatives. Le coefficient d'extinction $\hat{\beta}$ a une influence négligeable sur les propriétés radiatives identifiées. Cependant, ce coefficient d'extinction intervient dans la définition de la probabilité idéale de diffusion P_s et donc dans le choix de la probabilité arbitraire de diffusion \tilde{P}_s . En effet, lorsque \tilde{P}_s ne respecte pas le ratio du nombre de diffusions sur le nombre total de collisions, l'écart-type MCS introduit une incertitude numérique supplémentaire qui, ajoutée à l'incertitude expérimentale, peut rendre l'identification impossible.

Une approche préliminaire et nécessaire consiste à identifier les propriétés radiatives du matériau hétérogène étudié à partir de mesures réalisées à température ambiante. Cette étape nous a permis de mettre en oeuvre la démarche d'identification basée sur la méthode Monte Carlo Symbolique (MCS) à partir de mesures plus faciles à mettre en oeuvre que des mesures spectrométriques à haute température. Le volet suivant de ce travail a consisté en l'identification des propriétés radiatives à partir de mesures spectrométriques d'émission de matériaux portés à très haute température. La démarche inverse basée sur des mesures de flux émis par des matériaux à haute température fera l'objet du chapitre 5 suivant.

Chapitre 5

Identification des propriétés radiatives à haute température

Dans le chapitre précédent, nous avons défini une stratégie d'identification des propriétés radiatives basées sur les méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS) puis nous l'avons appliquée pour identifier les coefficients d'absorption et de diffusion d'un feutre Quartzel. Cette stratégie repose sur une analyse préliminaire du problème inverse à travers les polynômes MCS, tout en prenant en compte les incertitudes expérimentales et numériques.

Dans ce chapitre, nous nous posons la question de l'identification à haute température. Quelle(s) propriété(s) pouvons-nous identifier à partir de mesures spectrométriques d'émission ? Pouvons-nous définir une méthodologie qui permette cette identification à l'aide des méthodes MCS ? Nous essaierons de montrer les difficultés inhérentes à la haute température dans ce chapitre et d'explorer les possibilités pour les contourner.

Nous reprenons la même stratégie pour analyser l'identifiabilité des propriétés radiatives d'un matériau porté à haute température à partir de mesures spectrométriques d'émission. Rappelons que pour la haute température nous avons choisi de tester la méthode avec une céramique Quartzel. Nous considérons dans tout ce chapitre un échantillon isotherme qui, dans la configuration expérimentale, correspond à un échantillon de céramique chauffé de manière symétrique par ses deux faces. Dans un premier temps, la méthode graphique est utilisée pour déterminer les zones spectrales dans lesquelles l'identification est possible, puis est complétée par une analyse de sensibilités. La seconde section du chapitre permet de placer la méthode MCS au centre d'une réflexion autour des informations à apporter pour que le problème inverse d'identification à haute température soit bien-posé.

1 Analyse du problème inverse

1.1 Modèle radiatif

Les échantillons de céramique Quartzel étudiés au chapitre 3 sont représentés sur la figure 5.1 par le milieu noté Δ de dimensions $L_x = 3 \text{ mm}$, $L_y = L_z = 11 \text{ mm}$. Le côté $x = 0 \text{ mm}$ correspond à la face arrière de l'échantillon tandis que $x = 3 \text{ mm}$ correspond à la surface par

laquelle s'effectue la mesure de la luminance émise $L_\eta(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0)$. La direction \mathbf{u}_0 fait un angle de 30° avec la normale à la face avant et la position \mathbf{x}_0 a pour coordonnées (3 ; 5,5 ; 5,5) mm.

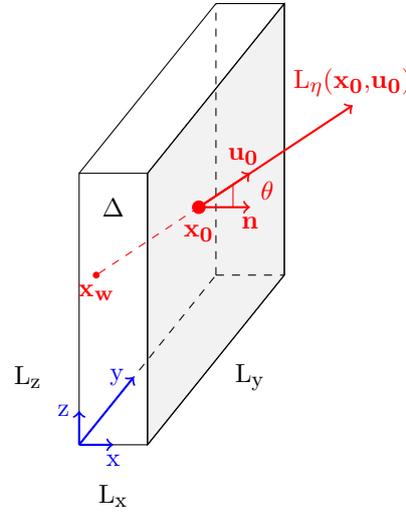


Figure 5.1 – Schéma du cas étudié. Le milieu homogène est absorbant, émettant et diffusant. La luminance est calculée au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 correspondant au centre de la surface $x = L_x$ ayant \mathbf{n} comme normale. L'angle θ considéré est de 30° .

L'ETR dans un milieu homogène équivalent, absorbant, émettant et diffusant est utilisée pour modéliser le transfert radiatif dans les échantillons de céramique Quartzel. Concernant la fonction de phase, nous la supposons isotrope ou de type linéaire anisotrope (LA), ce qui nous permet d'inclure le facteur d'asymétrie g_η dans le coefficient de diffusion réduit noté $\sigma'_\eta = \sigma_\eta(1 - g_\eta)$ où σ_η est le coefficient de diffusion.

Nous utilisons la méthode Monte Carlo Symbolique pour conserver les coefficients d'absorption κ_η et de diffusion réduit σ'_η comme paramètres symboliques. Ce sont les paramètres que nous cherchons à identifier à partir des mesures de luminance émise. Nous avons montré dans la sous-section 2.3 du chapitre 2 qu'une grandeur radiative s'écrit avec MCS sous la forme d'un polynôme dans lequel les coefficients d'absorption et de diffusion apparaissent explicitement. Dans le cas de la luminance sortante, si le milieu est isotherme à la température T, ce polynôme s'écrit :

$$L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0) \simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{a_{j,k}} \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}} B_\eta(T) \left(\frac{\hat{\beta} - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\hat{\beta}(1 - \tilde{P}_s)} \right)^j \left(\frac{\sigma'_\eta}{\hat{\beta} \tilde{P}_s} \right)^k \quad (5.1)$$

avec :

$$\overline{a_{j,k}} = \frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} H(\mathbf{x}_i \notin \Delta) H(j+k < N_{nc,i} + N_{sca,i}) \quad (5.2)$$

où $N_{nc,i}$ et $N_{sca,i}$ sont respectivement le nombre de collisions nulles et le nombre de diffusions lors du i -ème échantillonnage et \mathbf{x}_i la position de sortie du chemin optique.

Un exemple de schéma fonctionnel de l'algorithme MCS est présenté sur la figure 2.16 du chapitre 2. Pour chaque i -ème chemin optique, nous comptons le nombre de diffusions $N_{sca,i}$ et le

nombre de collisions nulles $N_{nc,i}$ jusqu'à ce que le libre parcours d'extinction quitte le milieu Δ . Une fois que tous les chemins N_{MC} ont été générés, nous appliquons l'équation 5.2 pour générer les polynômes.

Rappelons que nous obtenons une grandeur radiative (ici la luminance sortante) et son incertitude numérique associée (voir annexe A) définies dans tout l'espace des paramètres (κ_η et σ'_η) en ne réalisant qu'une simulation MCS. De plus, nous avons montré dans les chapitres 2 et 4 qu'il est possible de définir un coefficient d'extinction global $\hat{\beta}$ et une probabilité arbitraire de diffusion \tilde{P}_s indépendants du nombre d'onde, de manière à réaliser une unique simulation MCS pour obtenir un polynôme que nous pouvons appliquer sur tout le spectre. Dans la suite de ce chapitre, nous utiliserons ce polynôme pour effectuer l'analyse du problème de l'identification des propriétés radiatives à partir de mesures spectrométriques d'émission.

1.2 Analyse inverse

1.2.1 Méthode graphique

Pour cette analyse préliminaire, nous fixons $\hat{\beta} = 40 \text{ cm}^{-1}$, $\tilde{P}_s = 0,5$ et $N_{MC} = 10^6$. Grâce aux polynômes MCS, la luminance sortante est estimée dans tout l'espace des paramètres $\kappa_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 20 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 20 \text{ cm}^{-1}]$. Nous pouvons donc générer des iso-valeurs du facteur d'émission $F_\eta = \frac{L_\eta(\mathbf{x}_0; \mathbf{u}_0)}{B_\eta(T)}$ en fonction de κ_η et σ'_η comme présentées sur la figure 5.2. Bien que F_η soit une grandeur spectrale, cette première analyse est valable quel que soit le nombre d'onde η . Un seul calcul MCS a permis de générer toutes les iso-lignes en trait plein, tandis que chaque croix correspond à un seul calcul MCC pour un seul couple $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$. Les choix de $\hat{\beta}$ et \tilde{P}_s pour cette étude introduisent une erreur négligeable (l'écart-type relatif maximal obtenu est de l'ordre de 2,5%).

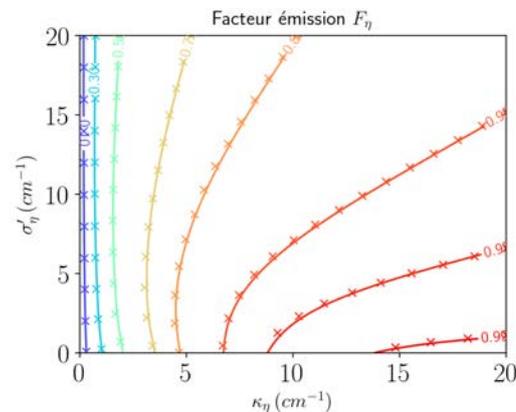


Figure 5.2 – Iso-lignes du facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$.

Une iso-valeur (ou iso-ligne) correspond à tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$ qui reproduisent une valeur donnée du facteur d'émission. A titre d'exemple, le facteur d'émission de l'échantillon de

céramique Quartzel porté à une température de 1148°C vaut $F_\eta = 0,3$ pour $\eta = 3850 \text{ cm}^{-1}$ (voir figure 3.18 du chapitre 3). D'après l'ETR résolue par MCS pour $\hat{\beta} = 40 \text{ cm}^{-1}$ et $\tilde{P}_s = 0,5$, tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$ qui donnent $F_\eta = 0,3$ sont localisés sur une iso-ligne quasi-verticale. Nous pouvons alors tirer de l'information sur le coefficient d'absorption : $\kappa_\eta \simeq 0,6 \text{ cm}^{-1}$. En revanche, la détermination du coefficient de diffusion est compliquée car toutes les valeurs de $\sigma'_\eta \geq 0 \text{ cm}^{-1}$ sont solutions du problème inverse.

Prenons maintenant l'exemple où le facteur d'émission vaut 0,99 à $\eta = 1310 \text{ cm}^{-1}$. Tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$ qui donnent $F_\eta = 0,99$ sont localisés sur une iso-ligne quasi-horizontale. De cette iso-ligne, nous pouvons avoir plus d'informations sur l'identification du coefficient de diffusion dont l'intervalle des possibilités est plus réduit que lorsque $F_\eta = 0,3$. Ici, σ'_η est compris entre 0 et $1,8 \text{ cm}^{-1}$ (peu de diffusion). Le coefficient d'absorption est quant à lui difficile à déterminer avec précision car tous les $\kappa_\eta \geq 13,7 \text{ cm}^{-1}$ sont solutions du problème inverse (milieu optiquement épais en absorption).

Enfin, prenons l'exemple d'un cas intermédiaire où le facteur d'émission vaut $F_\eta = 0,8$ à $\eta = 1850 \text{ cm}^{-1}$. Tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$ qui donnent $F_\eta = 0,8$ ne sont pas localisés sur une iso-ligne verticale ou horizontale. Ici, peu d'information peut être tirée sur κ_η ou σ'_η . La seule information exploitable concerne la borne minimale admissible pour κ_η qui vaut $\kappa_{\eta, \min} = 4,9 \text{ cm}^{-1}$.

Cette première analyse a permis de mettre en évidence trois zones dans lesquelles l'identification d'un paramètre sur deux est possible. Lorsque le milieu est optiquement mince en absorption (pour le cas étudié ici, $\tau_{a,\eta} \leq 0,7$ correspond à des facteurs d'émission inférieurs à 0,5), seul le coefficient d'absorption peut être identifié à partir du facteur d'émission. Inversement, lorsque le milieu est optiquement épais en absorption ($\tau_{a,\eta} \geq 4$ et $F_\eta \geq 0,99$), l'intervalle admissible pour le coefficient de diffusion est plus restreint, tandis que les coefficients d'absorption solutions du problème inverse ne sont pas bornés. Enfin, dans la zone où l'épaisseur optique d'absorption est intermédiaire ($0,7 < \tau_{a,\eta} < 4$ et $0,5 < F_\eta < 0,99$), nous ne pouvons pas conclure quant à la possibilité d'identifier l'un ou l'autre des deux paramètres. Toutefois, pour les trois cas de figure illustrés, nous pouvons déterminer avec certitude la borne minimale admissible pour le coefficient d'absorption.

Le problème inverse qui consiste à identifier κ_η et σ'_η à partir d'une mesure du facteur d'émission F_η à un nombre d'onde η donné est mal-posé. En effet, pour ce problème inverse, nous cherchons à identifier deux paramètres spectraux à partir d'une mesure spectrale. L'ajout d'informations, par d'autres types de mesures, d'autres modèles radiatifs ou des relations de corrélations entre κ_η et σ'_η , est primordiale pour rendre le problème inverse bien-posé. Procédons maintenant à une analyse de sensibilités pour essayer d'extraire davantage d'informations.

1.2.2 Sensibilités

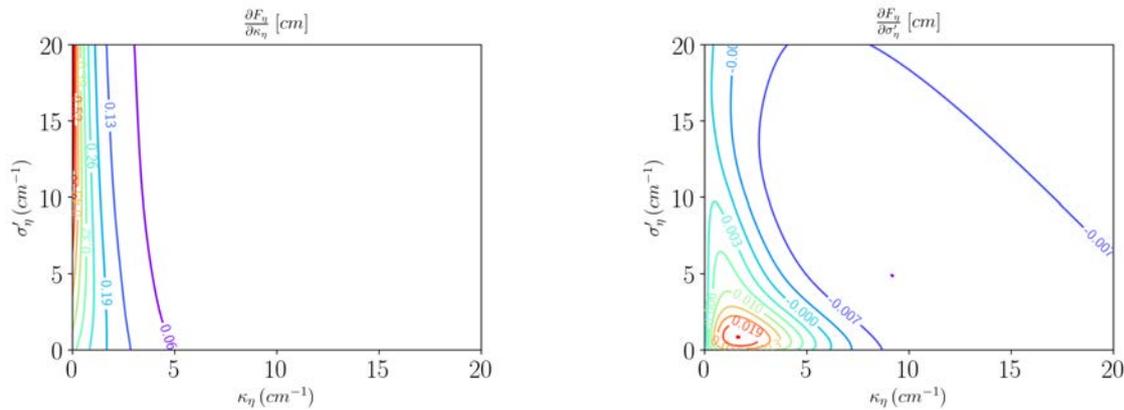
MCS a permis d'exprimer la luminance sortante sous la forme d'un polynôme simple et défini dans l'espace des paramètres à identifier. Ce polynôme fait apparaître de manière explicite les propriétés radiatives que nous cherchons à identifier. Il est possible de dériver ce polynôme par

rapport à chaque paramètre symbolique pour obtenir les sensibilités du facteur d'émission aux coefficients d'absorption et de diffusion :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_\eta(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)}{\partial \kappa_\eta} &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{a_{j,k}} \left(\frac{\sigma'_\eta}{\widehat{\beta P_s}} \right)^k \left\{ \frac{1}{\widehat{\beta}} \left(\frac{\widehat{\beta} - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\widehat{\beta}(1 - \widetilde{P}_s)} \right)^j - \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}} \frac{j}{\widehat{\beta}(1 - \widetilde{P}_s)} \left(\frac{\widehat{\beta} - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\widehat{\beta}(1 - \widetilde{P}_s)} \right)^{j-1} \right\} \\ \frac{\partial F_\eta(\kappa_\eta, \sigma'_\eta)}{\partial \sigma'_\eta} &\simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \overline{a_{j,k}} \frac{\kappa_\eta}{\widehat{\beta}} \left(\frac{\widehat{\beta} - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\widehat{\beta}(1 - \widetilde{P}_s)} \right)^{j-1} \left(\frac{\sigma'_\eta}{\widehat{\beta P_s}} \right)^{k-1} \left\{ \frac{k}{\widehat{\beta P_s}} \frac{\widehat{\beta} - \kappa_\eta - \sigma'_\eta}{\widehat{\beta}(1 - \widetilde{P}_s)} - \frac{j}{\widehat{\beta}(1 - \widetilde{P}_s)} \frac{\sigma'_\eta}{\widehat{\beta P_s}} \right\} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Les sensibilités aux paramètres sont également constituées de polynômes définis dans tout l'espace des paramètres $\kappa_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 20 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 20 \text{ cm}^{-1}]$. Nous pouvons donc générer des iso-valeurs de sensibilités locales en fonction de κ_η et σ'_η comme présentées sur la figure 5.3. Raisonons sur la sensibilité du facteur d'émission au coefficient d'absorption (figure 5.3a). Celle-ci diminue (en valeur absolue) pour tendre vers 0 lorsque le milieu devient optiquement épais en absorption (κ_η augmente vers 20 cm^{-1}). Cette sensibilité est élevée lorsque le milieu est optiquement mince en absorption (κ_η diminue vers 0 cm^{-1}). Les iso-valeurs de la sensibilité du facteur d'émission au coefficient d'absorption confortent les résultats obtenus dans la sous-section précédente : dans les zones spectrales où le facteur d'émission est inférieur à 0,5, nous pouvons identifier de manière fiable le coefficient d'absorption. Cependant, les iso-valeurs de sensibilité du facteur d'émission au coefficient de diffusion ne sont pas significatives et sont 10 fois inférieures à la sensibilité de F_η par rapport à κ_η .

Lorsque le milieu est optiquement épais en absorption, nous observons que les sensibilités du facteur d'émission à κ_η et à σ'_η deviennent faibles. Cela s'explique par le fait que le matériau a un comportement radiatif qui se rapproche du corps noir. Ainsi, il n'y a plus de rayonnement volumique dans le matériau. Il n'est donc plus utile d'identifier des propriétés comme κ_η et σ_η . Ce comportement s'observe notamment au nombre d'onde de Christiansen pour lequel il est possible de déterminer la température grâce à ce rayonnement de type corps noir.



(a) Sensibilité du facteur d'émission au coefficient d'absorption.

(b) Sensibilité du facteur d'émission au coefficient de diffusion réduit.

Figure 5.3 – Iso-lignes des sensibilités du facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$.

Le problème inverse consistant à identifier simultanément κ_η et σ'_η pour chaque nombre d'onde étant mal-posé, des informations supplémentaires (autres mesures complémentaires à l'émission, plusieurs modèles radiatifs adaptés à chaque bande spectrale, etc.) sont nécessaires à l'identification. Grâce à MCS, nous allons proposer des pistes et tenter de conclure quant à leur pertinence pour l'identification des deux propriétés radiatives spectrales.

2 Comment identifier les propriétés radiatives à partir de mesures d'émission ?

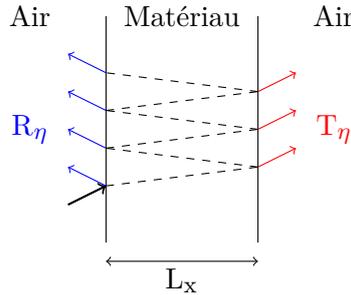
2.1 Cas d'un matériau homogène

Avant de se pencher sur le cas des matériaux hétérogènes dans lesquels les phénomènes de diffusion en volume ont lieu, considérons dans un premier temps l'exemple d'un matériau homogène quelconque (par exemple, un cristal de Quartz) d'indice de réfraction $m_\eta = n_\eta - jk_\eta$ uniforme (avec $j^2 = -1$). Ce matériau, porté à haute température, par exemple via un chauffage laser, prend la forme d'une plaque d'épaisseur L_x . Nous cherchons à exprimer le facteur d'émission F_η dans une direction normale à l'une des surfaces $x = 0$ ou $x = L_x$ sous l'approximation de l'optique géométrique. Par application de la seconde loi de Kirchhoff, l'absorptance normale α_η est :

$$\alpha_\eta = 1 - R_\eta - T_\eta \quad (5.4)$$

où R_η et T_η sont respectivement la réflectance et la transmittance normales. La première loi de Kirchhoff stipule quant à elle que l'absorptance spectrale directionnelle (ou hémisphérique) est égale au facteur d'émission spectral directionnel (ou hémisphérique) : $F_\eta = \alpha_\eta$.

Dans une plaque d'épaisseur L_x , la réflectance et la transmittance résultent des réflexions multiples au sein du matériau et des conditions aux interfaces :



R_η et T_η sont liées à la réflectivité ρ_η et à la transmissivité τ_η aux interfaces air-matériau et matériau-air. La réflectivité et la transmissivité normales au niveau de ces interfaces s'écrivent [21] :

$$\rho_\eta = \left| \frac{m_\eta - 1}{m_\eta + 1} \right|^2 \quad \& \quad \tau_\eta = 1 - \rho_\eta \quad (5.5)$$

Ainsi, la réflectance et la transmittance normales s'obtiennent en réalisant la somme infinie des

réflexions et des transmissions aux interfaces [109] :

$$\begin{aligned} R_\eta &= \rho_\eta + \rho_\eta \tau_\eta^2 \exp(-2\kappa_\eta L_x) + \rho_\eta^3 \tau_\eta^2 \exp(-4\kappa_\eta L_x) + \rho_\eta^5 \tau_\eta^2 \exp(-6\kappa_\eta L_x) + \dots \\ T_\eta &= \tau_\eta^2 \exp(-\kappa_\eta L_x) + \rho_\eta^2 \tau_\eta^2 \exp(-3\kappa_\eta L_x) + \rho_\eta^4 \tau_\eta^2 \exp(-5\kappa_\eta L_x) + \dots \end{aligned} \quad (5.6)$$

où $\kappa_\eta = 4\pi k_\eta \eta$ est le coefficient d'absorption et a la dimension inverse d'une longueur. Le terme exponentiel dans la somme infinie correspond à l'atténuation par absorption le long d'une distance L_x . Nous notons cette atténuation $A_\eta = \exp(-\kappa_\eta L_x)$. En ré-arrangeant la somme infinie, la réflectance et la transmittance s'écrivent :

$$R_\eta = \rho_\eta + \frac{\rho_\eta \tau_\eta^2 A_\eta^2}{1 - \rho_\eta^2 A_\eta^2} \quad \& \quad T_\eta = \frac{\tau_\eta^2 A_\eta}{1 - \rho_\eta^2 A_\eta^2} \quad (5.7)$$

Le facteur d'émission s'écrit donc comme une fonction de l'indice de réfraction complexe du milieu homogène [110] :

$$F_\eta(m_\eta) = \frac{(1 - \rho_\eta(m_\eta))(1 - A_\eta(m_\eta))}{1 - \rho_\eta(m_\eta)A_\eta(m_\eta)} \quad (5.8)$$

Lorsque le matériau est homogène d'indice de réfraction uniforme, le facteur d'émission est défini de manière analytique dans l'espace de l'indice de réfraction complexe m_η (dans l'espace $\Re(m_\eta) - \Im(m_\eta)$). Il est alors possible d'explorer les différentes possibilités d'identification de l'indice de réfraction à partir de mesures de facteurs d'émission. A l'instar de l'outil MCS développé dans cette thèse, cette analyse d'identifiabilité est menée sous la forme graphique d'iso-valeurs comme illustré sur la figure 5.4. Une iso-valeur du facteur d'émission correspond à tous les couples $(\Re(m_\eta); \Im(m_\eta))$ qui reproduisent une valeur donnée de F_η . Le facteur d'émission s'écrivant en fonction de l'atténuation exponentielle A_η qui dépend directement du nombre d'onde η , nous menons notre analyse pour deux nombres d'onde arbitrairement choisis, par exemple ¹ $\eta = 1000 \text{ cm}^{-1}$ (figure 5.4a) et $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ (figure 5.4b). Aussi, nous choisissons de représenter F_η pour $\Re(m_\eta) \in [0,1; 4]$ et $\Im(m_\eta) \in [10^{-6}; 4]$. Ces bornes correspondent à celles de l'indice de réfraction du Quartz dans la gamme spectrale $[1000 \text{ cm}^{-1}; 5000 \text{ cm}^{-1}]$ pour des températures comprises entre 298 K et 1880 K [101].

Pour $\eta = 1000 \text{ cm}^{-1}$, tous les couples $(\Re(m_\eta); \Im(m_\eta))$ qui reproduisent $F_\eta = 0,1$ sont localisés sur l'iso-ligne en bleu foncé. Cette iso-ligne est constituée de deux lignes quasi-horizontales et renseigne sur les deux valeurs possibles que peut prendre l'indice d'extinction ($k = \Im(m_\eta)$), mais ne renseigne aucunement sur la partie réelle de l'indice de réfraction. Dans l'hypothèse où nous avons obtenu de l'information sur $\Re(m_\eta)$ à travers une autre mesure à $\eta = 1000 \text{ cm}^{-1}$ ou à travers une autre modélisation, aucune information ne peut être obtenue sur $\Im(m_\eta)$.

Si le facteur d'émission vaut $F_\eta = 0,8$, alors tous les couples $(\Re(m_\eta); \Im(m_\eta))$ qui reproduisent cette valeur particulière sont localisés sur l'iso-ligne orange constituée de deux lignes quasi-horizontales et de deux lignes quasi-verticales. Cela conduit à peu d'information pour l'identification de $\Re(m_\eta)$ et $\Im(m_\eta)$. Nous avons donc besoin d'injecter de l'information sur $\Re(m_\eta)$

1. Ces nombres d'onde correspondent aux *extrema* de la plage spectrale pour laquelle les mesures d'émission ont été réalisées et présentées dans le chapitre 3.

et $\Im(m_\eta)$. Si $\Re(m_\eta)$ est déterminé autrement, alors deux valeurs sont possibles pour $\Im(m_\eta)$. Réciproquement, si $\Im(m_\eta)$ est connue alors $\Re(m_\eta)$ ne peut prendre que deux valeurs possibles. L'ajout d'information peut s'avérer infructueux si la détermination par une autre méthode de $\Re(m_\eta)$ correspond à l'abscisse d'une quasi-verticale (ou la détermination de $\Im(m_\eta)$ correspond à l'ordonnée d'une quasi-horizontale).

Enfin, si le facteur d'émission tend vers 1, nous pouvons remarquer que l'iso-ligne se recentre autour de $\Re(m_\eta) = 1$ et $\Im(m_\eta)$ est compris entre 10^{-1} et 10^{-3} . Dans le cas étudié ici, le matériau homogène d'indice m_η est séparé par de l'air d'indice $m_{\text{air}} = 1$. La partie imaginaire $\Im(m_\eta)$ est suffisamment faible pour que la réflectivité à l'interface soit faible, mais suffisamment élevée pour que tout flux arrivant à la surface soit absorbé sur quelques centaines de microns comme pour un corps noir. C'est l'illustration de l'effet Christiansen dont le principe a été expliqué dans le chapitre 3.

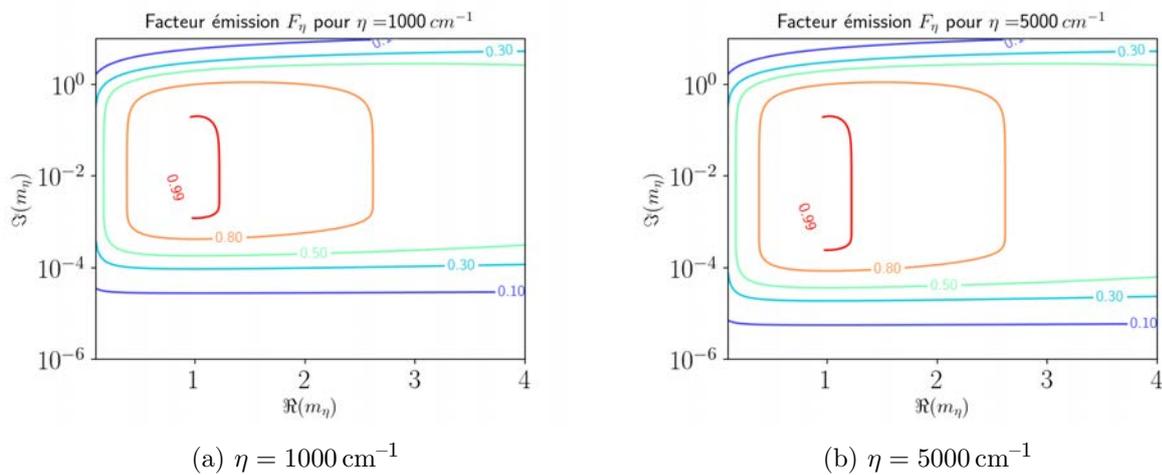


Figure 5.4 – Iso-valeurs du facteur d'émission dans l'espace $\Re(m_\eta) - \Im(m_\eta)$. L'axe $\Im(m_\eta)$ est représenté en échelle logarithmique.

Nous nous sommes intéressés dans cette sous-section à l'identification de l'indice de réfraction complexe d'un matériau homogène d'indice de réfraction uniforme. L'approximation de l'optique géométrique a permis d'exprimer le facteur d'émission F_η de manière analytique en fonction de l'indice de réfraction. Le problème inverse qui consiste à identifier m_η à partir d'une mesure du facteur d'émission F_η à un nombre d'onde η donné reste mal-posé, car nous sommes toujours confrontés au problème d'identification de deux paramètres spectraux à partir d'une mesure spectrale.

Pour pouvoir identifier m_η à partir de mesures du facteur d'émission, nous nous proposons de transformer le problème inverse, tout en conservant le même modèle (approximation de l'optique géométrique) et les mêmes mesures (spectre du facteur d'émission). Au lieu de chercher à identifier deux paramètres spectraux à partir d'une mesure à un nombre d'onde, nous allons voir qu'il est possible d'identifier m_η sur la gamme spectrale d'étude en utilisant toutes les mesures de F_η sur cette même gamme spectrale. En d'autres termes, est-il possible d'identifier une loi

spectrale de $m(\eta)$ à partir d'un spectre de $F(\eta)$?

Cette approche est basée sur une modélisation fine de la fonction diélectrique et donc de l'indice de réfraction complexe. Elle consiste à définir une loi spectrale de la fonction diélectrique $\epsilon(\eta) = m^2(\eta)$, en faisant intervenir des paramètres qui ne dépendent pas du nombre d'onde. Parmi les modèles de fonction diélectriques, nous pouvons citer le modèle de Drude, le modèle de Lorentz à trois ou à quatre paramètres ou encore le modèle basé sur les profils Gaussiens développé par De Sousa Meneses *et. al.* [74, 101]. Les modèles de fonction diélectrique sont souvent représentés comme une somme d'oscillateurs judicieusement choisis pour représenter les phénomènes d'absorption liés aux transitions énergétiques dans le matériau homogène. Le modèle de fonction diélectrique basé sur les profils Gaussiens peut être écrit sous la forme [36] :

$$\epsilon(\eta) = \sum_{i=1}^{N_{\text{osc}}} \frac{2B_i}{\sqrt{\pi}} \left(D \left(2\sqrt{\ln(2)} \frac{\eta + \eta_i}{s_i} \right) - D \left(2\sqrt{\ln(2)} \frac{\eta - \eta_i}{s_i} \right) \right) + jB_i \left(e^{-4\ln(2) \left(\frac{\eta - \eta_i}{s_i} \right)^2} - e^{-4\ln(2) \left(\frac{\eta + \eta_i}{s_i} \right)^2} \right) \quad (5.9)$$

où N_{osc} est le nombre d'oscillateurs et $j^2 = -1$. Pour le i -ème oscillateur, B_i est son amplitude, η_i sa fréquence propre et s_i sa largeur à mi-hauteur. D est la fonction de Dawson. Ce modèle est par exemple adéquat pour représenter la fonction diélectrique de la silice ou du Quartz [101]. Après avoir choisi le nombre d'oscillateurs N_{osc} , l'objectif sera donc d'identifier les paramètres de la fonction diélectrique en utilisant un spectre du facteur d'émission, chaque oscillateur comprenant trois paramètres. Si le spectre contient N_{mes} mesures à différents η où $N_{\text{mes}} \geq 3N_{\text{osc}}$, la minimisation de la somme des écarts-quadratiques (notée S) entre le facteur d'émission analytique et les mesures du facteur d'émission pour tous les nombres d'onde (et non pas à un nombre d'onde donné) peut permettre de déterminer B_i , η_i et s_i :

$$S(B_i; \eta_i; s_i) = \sum_{k=1}^{N_{\text{mes}}} (F_{\eta_k}(B_i; \eta_i; s_i) - F_{\text{mes}, \eta_k})^2 \quad (5.10)$$

Pour réaliser cette identification des paramètres de la fonction diélectrique, le logiciel FOCUS développé par De Sousa Meneses au CEMHTI peut être utilisé [111]. Ce logiciel permet de choisir des modèles de fonctions diélectriques afin de simuler des spectres de transmittance, de réflectance ou de facteur d'émission. De plus, il est possible de charger des spectres expérimentaux et de les comparer avec les spectres simulés. Le logiciel est également équipé d'un solveur capable de rechercher le meilleur jeu de paramètres de la fonction diélectrique qui reproduit le spectre expérimental. Ainsi, la fonction diélectrique (et donc l'indice de réfraction) peut être identifiée sur la gamme spectrale d'étude.

Toutefois, en fonction des gammes de nombre d'onde considérées et des matériaux étudiés, cette méthode peut s'avérer insuffisante. En effet, supposons que l'intervalle de nombres d'onde pour lequel les spectres d'émission ont été mesurés soit $[\eta_{\text{min}}; \eta_{\text{max}}]$, il est parfois possible d'avoir des contributions dans la représentation de la fonction diélectrique qui soient localisées en dehors de $[\eta_{\text{min}}; \eta_{\text{max}}]$ et qui contribuent à l'émission dans la gamme $[\eta_{\text{min}}; \eta_{\text{max}}]$. Supposons à titre d'exemple que nous ayons à disposition des mesures d'émission d'une plaque de Quartz dans la

gamme $\eta \in [1000 \text{ cm}^{-1}; 5000 \text{ cm}^{-1}]$. Si nous nous contentons de ces mesures, il est alors difficile de modéliser fidèlement sa fonction diélectrique car il existe des bandes d'absorption pour des nombres d'onde inférieurs à $\eta = 1000 \text{ cm}^{-1}$ [101].

2.2 Cas d'un matériau hétérogène

Dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons à la possibilité de développer une méthodologie d'identification des propriétés radiatives à haute température qui puisse s'appliquer à différents types de matériaux. Cette méthodologie a pour objectif de garder une certaine généralité pour être utile si les matériaux hétérogènes d'intérêt ne sont pas constitués d'hétérogénéités sphériques ou cylindriques (dans lesquels la théorie de Mie peut être utilisée), ou si la structure du matériau hétérogène à haute température est inconnue. Jusqu'ici, l'analyse basée sur MCS nous a permis de mieux baliser le problème inverse et de nous rendre compte que l'identification des propriétés radiatives à partir de mesures à haute température s'avère compliquée.

2.2.1 Identification à partir de l'ensemble du spectre d'émission

Nous nous proposons ici de nous inspirer de la méthodologie d'identification du spectre d'indice de réfraction d'un matériau homogène à partir d'un spectre d'émission. Au lieu de réaliser une identification spectrale (à un nombre d'onde donné), nous tentons d'analyser si l'utilisation d'un spectre d'émission peut permettre d'identifier un spectre de κ et un spectre de σ' . Pour cela, il faut préalablement définir une loi spectrale de κ et de σ' , information supplémentaire nécessaire comme mentionné précédemment. Ces lois spectrales permettent d'évaluer κ_η et σ'_η à un nombre d'onde η et font intervenir des paramètres regroupés dans un vecteur \mathbf{c} pour κ_η (\mathbf{d} pour σ_η) qui ne dépendent pas du nombre d'onde :

$$\kappa_\eta(c_1, c_2, \dots, c_{N_\kappa}) \quad \& \quad \sigma'_\eta(d_1, d_2, \dots, d_{N_\sigma}) \quad (5.11)$$

Ainsi, κ_η dépend de N_κ paramètres non-spectraux regroupés dans le vecteur \mathbf{c} . La loi spectrale modélisant le coefficient de diffusion fait intervenir N_σ paramètres. L'identification de tous les paramètres \mathbf{c} et \mathbf{d} doit utiliser un spectre de N_{mes} mesures de facteur d'émission tel que $N_{\text{mes}} \geq N_\kappa + N_\sigma$.

Identifier les paramètres \mathbf{c} et \mathbf{d} consiste à minimiser la fonction objectif suivante :

$$S(\mathbf{c}, \mathbf{d}) = \sum_{i=1}^{i=N_{\text{mes}}} \left\{ F_{\text{mes}, \eta_i} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d})) \right\}^2 \quad (5.12)$$

où S est la somme des écarts quadratiques entre les mesures de facteur d'émission F_{mes, η_i} à η_i et le facteur d'émission modélisé par le polynôme MCS rappelé ci-dessous :

$$F_{\text{MCS}, \eta_i}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d})) \simeq \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c})}{\hat{\beta}} \left(\frac{\hat{\beta} - \kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}) - \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d})}{\hat{\beta}(1 - \tilde{P}_s)} \right)^j \left(\frac{\sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d})}{\hat{\beta}\tilde{P}_s} \right)^k \quad (5.13)$$

Pour ce problème d'inversion, nous cherchons les vecteurs optimaux \mathbf{c}_{opt} et \mathbf{d}_{opt} qui minimisent la fonction objectif S , *i.e.*, $F_{\text{mes},\eta_i} = F_{\text{MCS},\eta_i}$ pour tous les nombres d'onde η_i . Cela revient à trouver les vecteurs \mathbf{c}_{opt} et \mathbf{d}_{opt} tels que :

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{c} \in \mathbf{c}_{\text{opt}} : \quad & \sum_{i=1}^{i=N_{\text{mes}}} -2 \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_i}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}}))}{\partial \mathbf{c}} \left\{ F_{\text{mes},\eta_i} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}})) \right\} = 0 \\ \forall \mathbf{d} \in \mathbf{d}_{\text{opt}} : \quad & \sum_{i=1}^{i=N_{\text{mes}}} -2 \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_i}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}}))}{\partial \mathbf{d}} \left\{ F_{\text{mes},\eta_i} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}})) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

La représentation matricielle de l'équation précédente est :

$$\mathbf{S}'(\mathbf{c}_{\text{opt}}; \mathbf{d}_{\text{opt}}) = -2 \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{\text{T}} (\mathbf{F}_{\text{mes}} - \mathbf{F}_{\text{MCS}}(\mathbf{c}_{\text{opt}}; \mathbf{d}_{\text{opt}})) = 0 \quad (5.15)$$

où $\underline{\underline{\mathbf{J}}}$ est la matrice Jacobienne qui représente la sensibilité locale de F_{MCS} par rapport aux paramètres \mathbf{c} et \mathbf{d} :

$$\mathbf{J}_{\text{m},n} = \begin{cases} \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_m}(\kappa_{\eta_m}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_m}(\mathbf{d}))}{\partial \mathbf{c}_n} & \text{si } 1 \leq n \leq N_{\kappa} \\ \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_m}(\kappa_{\eta_m}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_m}(\mathbf{d}))}{\partial \mathbf{d}_{n-k}} & \text{si } N_{\kappa} + 1 \leq n \leq N_{\kappa} + N_{\sigma} \end{cases} \quad (5.16)$$

Les paramètres qui interviennent dans la fonction κ_{η} étant supposés différents de ceux qui modélisent σ'_{η} , il est possible de réécrire la sensibilité locale sous la forme suivante :

$$\mathbf{J}_{\text{m},n} = \begin{cases} \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_m}(\kappa_{\eta_m}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_m}(\mathbf{d}))}{\partial \kappa_{\eta_m}(\mathbf{c})} \frac{\partial \kappa_{\eta_m}(\mathbf{c})}{\partial \mathbf{c}_n} & \text{si } 1 \leq n \leq N_{\kappa} \\ \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_m}(\kappa_{\eta_m}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_m}(\mathbf{d}))}{\partial \sigma'_{\eta_m}(\mathbf{d})} \frac{\partial \sigma'_{\eta_m}(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}_{n-k}} & \text{si } N_{\kappa} + 1 \leq n \leq N_{\kappa} + N_{\sigma} \end{cases} \quad (5.17)$$

Ainsi, le système 5.14 à $N_{\kappa} + N_{\sigma}$ équations à résoudre est donc :

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{c} \in \mathbf{c}_{\text{opt}} : \quad & \sum_{i=1}^{i=N_{\text{mes}}} -2 \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_i}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}}))}{\partial \kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}})} \frac{\partial \kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}})}{\partial \mathbf{c}} \left\{ F_{\text{mes},\eta_i} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}})) \right\} = 0 \\ \forall \mathbf{d} \in \mathbf{d}_{\text{opt}} : \quad & \sum_{i=1}^{i=N_{\text{mes}}} -2 \frac{\partial F_{\text{MCS},\eta_i}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}}))}{\partial \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}})} \frac{\partial \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}})}{\partial \mathbf{d}} \left\{ F_{\text{mes},\eta_i} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_i}(\mathbf{c}_{\text{opt}}); \sigma'_{\eta_i}(\mathbf{d}_{\text{opt}})) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (5.18)$$

La méthode de linéarisation de Gauss-Newton peut être utilisée afin d'obtenir une équation itérative des paramètres à identifier :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{c}_{N_{\kappa}} \\ \mathbf{d}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{d}_{N_{\sigma}} \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{c}_{N_{\kappa}} \\ \mathbf{d}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{d}_{N_{\sigma}} \end{bmatrix}_k + \left((\underline{\underline{\mathbf{J}}}_k)^{\text{T}} \underline{\underline{\mathbf{J}}}_k \right)^{-1} (\underline{\underline{\mathbf{J}}}_k)^{\text{T}} \begin{bmatrix} F_{\text{mes},\eta_1} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_1}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_1}(\mathbf{d})) \\ \vdots \\ F_{\text{mes},\eta_{N_{\text{mes}}}} - F_{\text{MCS}}(\kappa_{\eta_{N_{\text{mes}}}}(\mathbf{c}); \sigma'_{\eta_{N_{\text{mes}}}}(\mathbf{d})) \end{bmatrix}_k \quad (5.19)$$

où $(\underline{\underline{\mathbf{J}}})^{\text{T}} \underline{\underline{\mathbf{J}}}$ est la matrice d'information notée $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$. Elle est constituée des produits croisés des sensibilités de F_{MCS} aux différents paramètres \mathbf{c} et \mathbf{d} . La matrice d'informations $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ doit être inversée

à chaque itération du processus inverse. Son déterminant doit être non-nul à chaque itération et son conditionnement proche de 1 afin que le problème inverse soit bien-posé.

La mise en équation du problème inverse a supposé que les paramètres qui interviennent dans la définition de κ_η et de σ'_η étaient différents. Cette démarche qui consiste à identifier une fonction κ_η et une fonction σ'_η à partir d'un spectre de mesures d'émission soulève quelques questions. La première question concerne le choix des fonctions spectrales qui modélisent $\kappa(\eta)$ et $\sigma'(\eta)$. Quelles fonctions sont adéquates pour représenter fidèlement un spectre de $\kappa(\eta)$ et de $\sigma'(\eta)$? Ces propriétés radiatives étant homogénéisées, elles dépendent de la taille, la distribution, la répartition, l'orientation et de la fraction volumique des hétérogénéités. Or, à haute température, la structure hétérogène du matériau est inconnue et il est courant de la supposer identique à la structure du même matériau à température ambiante (la tomographie d'un échantillon à température ambiante correspondrait à celle du même matériau à des niveaux de température plus élevés). Cette hypothèse peut s'avérer invalide si le matériau hétérogène subit des réactions thermo-chimiques ou s'il se déforme à haute température. Il peut aussi y avoir des phénomènes de dégazage à haute température qui conduisent à des propriétés différentes de celles à température ambiante. Malgré cela, il est possible de choisir des fonctions $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ *a priori* (par exemple des fonctions polynomiales, Gaussiennes, Lorentziennes, etc.) pour identifier les paramètres de ces fonctions afin de déterminer les spectres de κ_η et σ'_η .

Nous avons testé cette approche en choisissant des fonctions linéaires par morceaux dans un premier temps par souci de simplicité. Nous n'avons pas pu dans le cadre de ce travail aboutir à un résultat à cause des difficultés suivantes :

- Si nous fixons $\kappa(\eta) = a\eta + b$ et $\sigma(\eta) = c\eta + d$ sur $[\eta_{\min}; \eta_{\max}]$, les coefficients a , b , c et d sont corrélés et les solutions à ce problème, pourtant fortement simplifié, ne sont pas uniques.
- Si nous choisissons pour $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ des fonctions polynomiales ou des sommes de Gaussiennes ou de Lorentziennes, il devient très difficile de définir les bornes minimales et maximales des paramètres de ces fonctions lors de l'identification.

Si nous n'avons pas réussi dans le cadre de ce travail à obtenir de résultats concluants, cette approche reste cependant intéressante et mérite dans le futur de plus amples recherches, notamment sur le choix des fonctions modélisant $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ qui pourraient être adaptées aux matériaux hétérogènes.

La deuxième interrogation concerne le spectre expérimental à utiliser pour identifier les paramètres des fonctions κ_η et σ'_η . Faut-il utiliser tout le spectre à disposition? Est-il possible d'utiliser quelques points judicieusement choisis (à condition que leur nombre soit au moins égal au nombre de paramètres à identifier)?

Il est également possible de définir deux fonctions $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ faisant intervenir les mêmes paramètres, à l'instar des modèles de fonctions diélectriques où les mêmes paramètres d'oscillateurs interviennent dans la définition des parties réelle et imaginaire. Cela revient à définir une seule fonction $f(\eta)$ à partir de laquelle nous obtiendrons un spectre de κ_η et un spectre de

σ'_η . Cette fonction $f(\eta)$ doit pouvoir tenir compte des possibles liens de corrélation qui existent entre κ_η et σ'_η . Or ces liens qui existent entre κ_η et σ'_η dépendent de la structure du matériau hétérogène et s'avèrent donc difficile à modéliser à haute température.

REMARQUE

Soient deux matériaux hétérogènes dont la composition, la taille et la répartition des hétérogénéités sont différentes. Supposons que les spectres d'émission de ces deux matériaux soient rigoureusement identiques sur une gamme spectrale $[\eta_{\min}; \eta_{\max}]$, mais que leurs spectres de transmittance (ou de réflectance) soient différents. Si à un nombre d'onde, l'un des deux matériaux a une transmittance plus élevée (tout en ayant le même facteur d'émission) alors son coefficient d'extinction est nécessairement plus faible.

Sans information sur la structure hétérogène d'un matériau, un spectre d'émission seul ne permet pas d'identifier $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$.

Nous avons recensé les difficultés liées à l'identification d'un spectre de κ_η et d'un spectre de σ'_η , à savoir le choix de fonctions adéquates et les liens de corrélation entre κ_η et σ'_η qui dépendent du matériau hétérogène. Une solution mise en oeuvre par Le Foll [2, 35] pour les matériaux fibreux a consisté à identifier les paramètres de la fonction diélectrique² d'une fibre de silice ($f(\eta) = \epsilon_{\text{SiO}_2}(\eta)$) en supposant que :

- La fonction diélectrique d'une fibre de silice et celle d'un cristal SiO_2 sont identiques ;
- La taille, la répartition, la distribution et la fraction volumique des fibres SiO_2 déterminées par microscopie à balayage électronique à température ambiante sont indépendantes de la température.

Pour chaque fibre modélisée par un cylindre infini, la théorie de Mie est mise en oeuvre pour calculer les sections efficaces d'absorption et de diffusion ainsi que la fonction de phase. Ces sections efficaces sont ensuite homogénéisées en utilisant l'approche de Lee [29–32] afin d'obtenir les coefficients d'absorption $\kappa(\eta)$ et de diffusion $\sigma(\eta)$, permettant ainsi de calculer une luminance grâce à l'ETR. Une technique d'inversion permet de minimiser l'écart quadratique entre le spectre de la luminance mesurée et celui calculé par l'ETR. Lorsque le processus converge, les paramètres de la fonction diélectrique d'une fibre de silice sont ainsi identifiés puis la démarche d'homogénéisation est reprise afin d'obtenir $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$. Les liens de corrélation entre $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ sont donc donnés par la technique d'homogénéisation qui prend en compte la structure hétérogène du matériau. Cette solution est adaptée aux matériaux fibreux seulement (par extension, aux milieux à hétérogénéités sphériques) et nécessite une modélisation de la fonction diélectrique de l'hétérogénéité ainsi qu'une hypothèse de structure hétérogène indépendante de la température.

Dans une démarche où l'on souhaite une méthode d'identification générique, applicable à tout type de matériau hétérogène et sans avoir recours à une modélisation fine des fonctions diélectriques, un spectre d'émission seul ne permet pas de déterminer un spectre de κ_η et un

2. La fonction diélectrique a été "dégradée" en retirant quelques oscillateurs dans la modélisation et en diminuant le nombre de paramètres à identifier.

spectre de σ'_η . Trouver les liens existants entre κ_η et σ'_η en fonction de la répartition des hétérogénéités est une piste qui mériterait d'être davantage approfondie. La méthode MCS peut par exemple être envisagée pour exprimer κ_η et σ_η comme une fonction des paramètres structurels des hétérogénéités (taille, distribution, orientation, etc.) à partir d'un calcul symbolique en géométrie réelle, sans homogénéisation. Ces expressions symboliques pourraient aider à établir les corrélations entre κ_η et σ_η et à choisir des modèles de fonctions pour l'évolution spectrale de $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$.

2.2.2 Mesures spectrales de transmittance et de réflectance à haute température

Dans la première sous-section de ce chapitre, nous avons montré que l'identification de deux paramètres spectraux à partir d'une mesure spectrale d'émission s'avère difficile. Nous avons toutefois réussi à obtenir d'importantes informations selon que le matériau étudié soit optiquement mince ou optiquement épais en absorption. Lorsqu'il est optiquement mince en absorption, nous pouvons identifier avec précision le coefficient d'absorption et aucune information ne peut être tirée pour le coefficient de diffusion. Lorsque le milieu est optiquement épais en absorption, le matériau a un comportement surfacique proche du corps noir, et l'identification de κ_η et σ_η n'est pas utile.

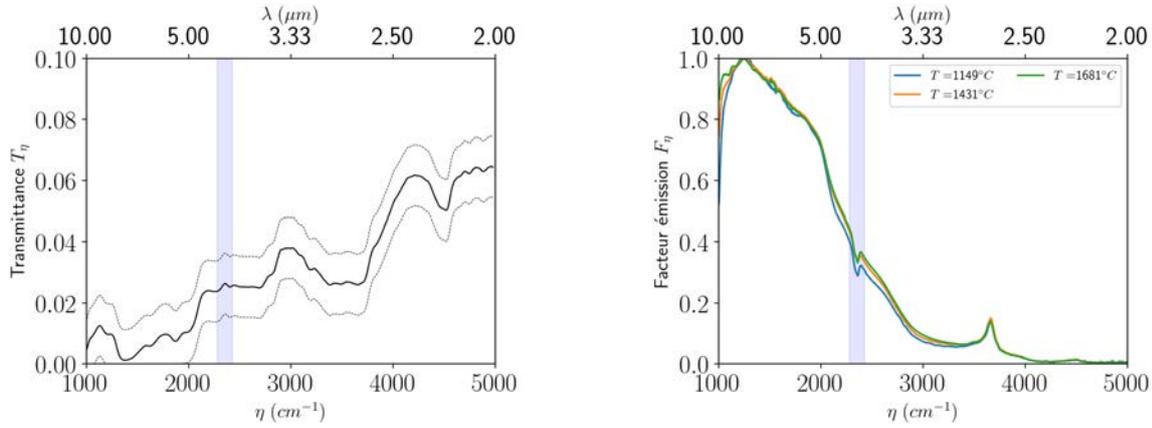
Pour avoir de l'information supplémentaire sur κ_η et/ou σ'_η , nous proposons grâce à MCS de tenter de déterminer le type de mesures spectrales à envisager en plus des mesures spectrales d'émission, par exemple des mesures spectrales de réflectance R'^\cap ou de transmittance T'^\cap directionnelle-hémisphérique à haute température. Cette analyse ne prend pas pour le moment en considération les nombreuses difficultés métrologiques qu'engendrent ces mesures à haute température. L'une des deux mesures suffit car le facteur d'émission, la réflectance et la transmittance sont liés par la deuxième loi de Kirchhoff :

$$T'^\cap + R'^\cap + F'_\eta = 1$$

La direction considérée est de 30° par rapport à la normale au milieu en $x = L_x = 3 \text{ mm}$. Pour analyser l'apport de la transmittance pour l'analyse inverse, nous générons des pseudo-mesures de transmittance directionnelle-hémisphérique à partir des propriétés radiatives de la céramique identifiées à température ambiante. L'incertitude sur la transmittance $U(T_\eta)$ a été supposée égale à 0,01 sur tout le spectre. Le spectre de transmittance simulé est donné figure 5.5a et le facteur d'émission mesuré au chapitre 3 pour trois niveaux de température est rappelé figure 5.5b.

Au chapitre 4, nous avons exprimé la transmittance directionnelle-hémisphérique sous la forme d'un polynôme MCS de κ_η et σ'_η . Pour s'affranchir des problèmes de convergence que peut poser le mauvais choix de \tilde{P}_s lorsque le milieu est optiquement épais, nous réalisons cinq simulations MCS pour $\tilde{P}_s \in \{0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9\}$ afin de construire cinq polynômes en fonction de κ_η et de σ'_η . Le choix du polynôme dépend de la valeur que prend la probabilité idéale de diffusion $P_s = \frac{\sigma'_\eta}{\hat{\beta} - \kappa_\eta}$. Pour ces simulations, nous prenons $\hat{\beta} = 200 \text{ cm}^{-1}$ et $N_{mc} = 10^6$. Les polynômes continus par morceaux obtenus permettent de générer des iso-valeurs de la transmittance

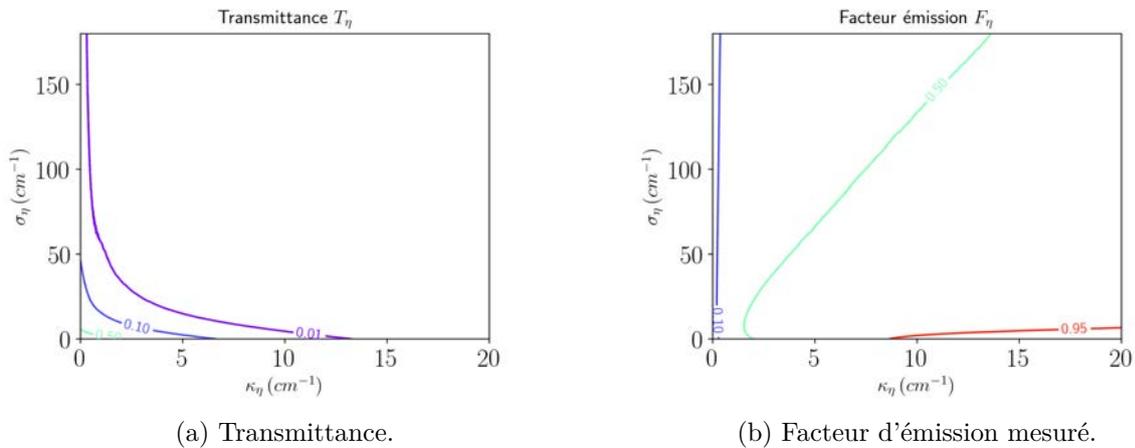
directionnelle-hémisphérique dans l'espace $\kappa_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 20 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [0 \text{ cm}^{-1}; 180 \text{ cm}^{-1}]$ comme illustré sur la figure 5.6a. Les iso-valeurs du facteur d'émission pour les mêmes bornes de κ_η et σ'_η sont données figures 5.6b.



(a) Transmittance directionnelle-hémisphérique simulée.

(b) Facteur d'émission.

Figure 5.5 – (a) Transmittance directionnelle-hémisphérique simulée et (b) facteur d'émission mesuré (chapitre 3) d'une céramique Quartzel portée à haute température.



(a) Transmittance.

(b) Facteur d'émission mesuré.

Figure 5.6 – Iso-valeurs de (a) la transmittance directionnelle-hémisphérique et du (b) facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$.

La méthode d'intersection des iso-lignes est reprise ici pour analyser l'identifiabilité de κ_η et de σ'_η à partir d'une mesure de facteur d'émission et d'une mesure de transmittance directionnelle-hémisphérique. Rappelons que la pseudo-mesure de transmittance utilisée a été simulée à partir des propriétés radiatives identifiées à température ambiante. A l'instar de l'étude menée à température ambiante, nous nous plaçons à un nombre d'onde pour lequel la pseudo-mesure de transmittance n'est pas exploitable ($T_\eta \leq U(T_\eta)$) et un autre nombre d'onde pour lequel la transmittance n'admet pas une incertitude relative de 100%. Nous prenons par exemple les cas suivants : (a) $L_\eta \simeq 2600 \text{ W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\mu\text{m}^{-1}$ et $T_\eta \simeq 0,03$ à $\eta \simeq 2600 \text{ cm}^{-1}$ puis (b)

$L_\eta \simeq 2056 \text{ W.m}^{-2}.\text{sr}^{-1}.\mu\text{m}^{-1}$ et $T_\eta \leq U(T_\eta)$ à $\eta \simeq 1430 \text{ cm}^{-1}$ où $L_\eta = F_\eta(T)B_\eta(T)$ est la luminance sortante. Pour ces deux cas, l'iso-ligne qui représente la luminance (respectivement la transmittance) est représentée en rouge (respectivement en noir). Les incertitudes expérimentales sont également prises en compte : les valeurs données de la luminance $L_\eta \pm U(L_\eta)$ et de la transmittance $T_\eta \pm U(T_\eta)$ sont représentées par des iso-surfaces. Enfin, nous illustrons uniquement le cas où la céramique est à $T = 1148^\circ\text{C}$, le raisonnement étant valable pour les autres niveaux de température.

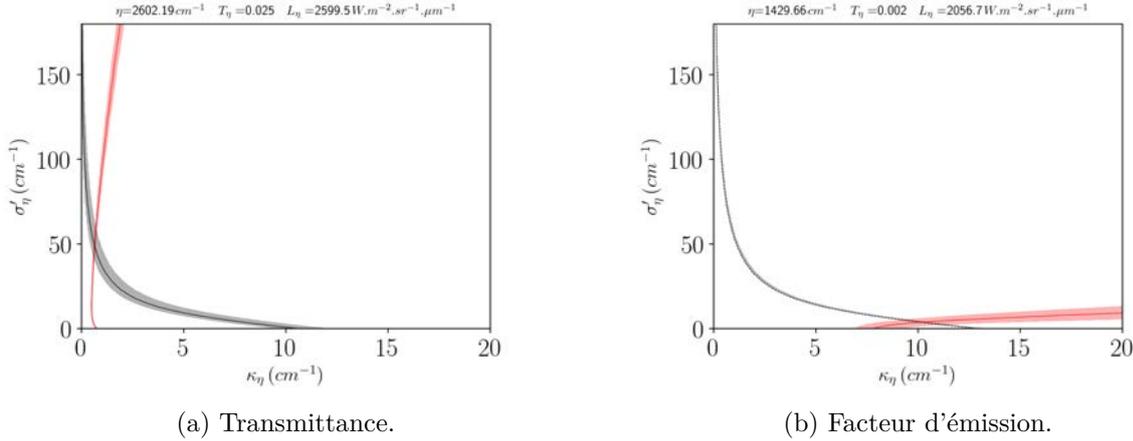


Figure 5.7 – Identifiabilité de κ_η et de σ'_η à partir de mesures d'émission et de transmittance à haute température. Lorsque $T_\eta \leq U(T_\eta)$, seule l'iso-surface correspondant à l'intervalle $[U(T_\eta); T_\eta + U(T_\eta)]$ est représentée, l'iso-surface de l'intervalle $[0; U(T_\eta)]$ n'admettant pas de borne supérieure.

Pour $\eta \simeq 2600 \text{ cm}^{-1}$ (figure 5.7a), l'intersection des deux iso-surfaces de luminance et de transmittance est unique et bornée. Le polygone correspondant à cette intersection fournit tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$ qui, d'après l'ETR, donnent $L_\eta \pm U(L_\eta)$ et $T_\eta \pm U(T_\eta)$: $\kappa_\eta \in [0,57 \text{ cm}^{-1}; 0,75 \text{ cm}^{-1}]$ et $\sigma'_\eta \in [40,78 \text{ cm}^{-1}; 62,03 \text{ cm}^{-1}]$. Si nous étions capable de mesurer une transmittance à haute température, celle-ci peut permettre d'identifier κ_η et σ'_η et leurs incertitudes associées.

Pour le deuxième cas considéré (figure 5.7b), la pseudo-mesure de transmittance n'est pas exploitable et admet 100% d'incertitude relative. L'iso-surface de transmittance $[0; U(T_\eta)]$ n'étant pas bornée mais infinie, elle n'est pas représentée sur la figure 5.7b. L'intersection de l'iso-ligne $T_\eta + U(T_\eta)$ et de l'iso-surface $L_\eta \pm U(L_\eta)$ permet quant à elle de déterminer une borne minimale pour $\kappa_\eta \geq 9,21 \text{ cm}^{-1}$ et pour $\sigma'_\eta \geq 2,21 \text{ cm}^{-1}$.

A travers cette première analyse d'identifiabilité, nous constatons qu'une mesure de transmittance à haute température peut améliorer l'identification de κ_η et de σ'_η . En effet, lorsque la mesure de transmittance est exploitable ($T_\eta > U(T_\eta)$), il est possible de déterminer tous les couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$ qui donnent simultanément $L_\eta \pm U(L_\eta)$ et $T_\eta \pm U(T_\eta)$. Lorsque la mesure de transmittance n'est pas exploitable (100% d'incertitude relative), elle permet de restreindre le champ des possibilités pour κ_η et pour σ'_η en confirmant une borne minimale. Ainsi, la réalisation de cette analyse sur tout le spectre considéré permet de déterminer κ_η et σ'_η et leurs incertitudes associées. Un exemple de spectres de κ_η et de σ'_η qu'il est possible d'obtenir en supposant que la

mesure de transmittance hémisphérique à haute température est réalisable, est donné figure 5.8. Ce spectre de κ_η et de σ'_η ne représente pas les propriétés radiatives de la céramique Quartzzel puisque nous avons utilisé une pseudo-mesure de transmittance que nous avons simulée à partir de propriétés radiatives à température ambiante. Les bandes grises correspondent aux zones du spectre où $T_\eta \leq U(T_\eta)$ et dans lesquelles seules les bornes minimales de κ_η et de σ'_η peuvent être déterminées.

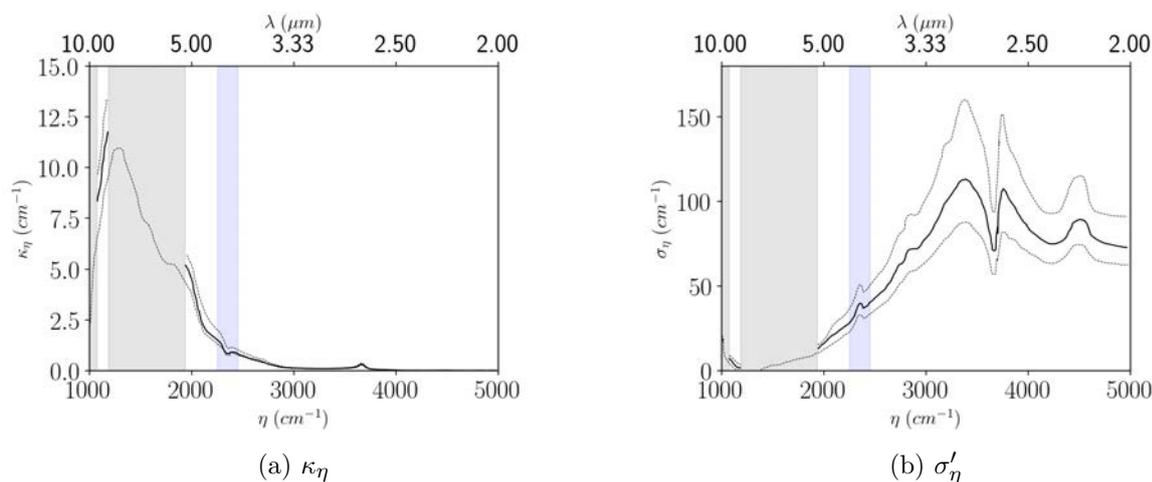


Figure 5.8 – Exemple de spectres de (a) κ_η et de (b) σ'_η identifiés à partir d'une pseudo-mesure de transmittance et d'une mesure de luminance émise à 1148°C . La bande spectrale grisée correspond à la bande d'absorption du CO_2 entre $\eta \simeq 2220 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,5 \mu\text{m}$) et $\eta \simeq 2400 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,17 \mu\text{m}$). Dans les autres bandes spectrales grisées, l'identification n'est pas possible. Les courbes en pointillés noirs correspondent représente $\kappa_\eta \pm \Delta\kappa_\eta$ et $\sigma'_\eta \pm \Delta\sigma'_\eta$.

Conclusions du chapitre

Dans ce chapitre, les méthodes MCS ont permis d'analyser l'identifiabilité des propriétés radiatives d'un matériau hétérogène porté à haute température à partir de mesures spectro-métriques d'émission. A un nombre d'onde donné, le problème inverse qui consiste à identifier un coefficient d'absorption et un coefficient de diffusion à partir d'une mesure d'émission est mal-posé.

Pour identifier κ_η et σ_η , nous avons placé MCS au centre d'une réflexion autour des éventuels modèles à choisir ou d'éventuelles mesures à réaliser. Concernant l'aspect expérimental, en plus d'une mesure d'émission, si la mesure de transmittance ou de réflectance directionnelle-hémisphérique à haute température ne pose pas de problèmes métrologiques majeurs, alors il sera possible d'identifier κ_η et σ_η .

Pour la modélisation, il est possible de transformer le problème inverse "monochromatique" en un problème inverse utilisant tout un spectre d'émission. Cette technique est utilisée et maîtrisée dans le cas de matériaux homogènes d'indice de réfraction uniforme afin d'identifier un spectre de

fonction diélectrique à partir d'un spectre d'émission. Cette idée a nourri une réflexion similaire consistant à chercher deux fonctions $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ puis à identifier les paramètres intervenant dans ces fonctions. Rappelons que nous cherchons à développer dans le cadre de cette thèse une méthodologie générique d'identification des propriétés radiatives surtout si les matériaux hétérogènes d'intérêt ne sont pas constitués d'hétérogénéités sphériques ou cylindriques (dans ces derniers, la théorie de Mie peut être mise en oeuvre comme l'a proposé Le Foll [2]). Deux questions restent ainsi en suspens. Comment choisir des fonctions d'évolution spectrales $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ qui permettent l'identification des paramètres de ces fonctions à partir d'un spectre d'émission, tout en permettant une modélisation précise du spectre ? Comment tenir compte de la structure du matériau hétérogène à haute température ? Abstraction faite de l'impossibilité d'accéder à la structure de matériaux à haute température par microscopie ou par tomographie, une étude "prospective" sur des répliques numériques pourrait avoir un intérêt ici. En effet, il serait alors possible de générer numériquement des milieux hétérogènes dans lesquels les données sur la composition, la forme et sur la distribution de taille des hétérogénéités sont contrôlées. Grâce au formalisme polyvalent des méthodes MCS qui résolvent un modèle (ETR, optique géométrique, etc.) et qui expriment une grandeur sous la forme d'un polynôme où les paramètres symboliques apparaissent de manière explicite, l'outil MCS pourrait en théorie être envisagé pour évaluer l'influence des paramètres géométriques et des indices de réfraction sur les propriétés radiatives, par exemple :

- Un calcul MCS sous l'approximation de l'optique géométrique peut permettre de simuler une transmittance et une réflectance en fonction des paramètres géométriques symboliques. Il serait ensuite possible d'évaluer l'influence de ces paramètres géométriques sur κ_η et σ_η .
- Les équations de Maxwell pourraient être utilisées pour exprimer des sections efficaces d'absorption et de diffusion en fonction des indices de réfraction des hétérogénéités, puis de les relier à κ_η et à σ_η en prenant en compte la distribution de taille des hétérogénéités et leur fraction volumique, si l'approximation de l'optique géométrique ne peut pas être utilisée.

Conclusions générales et perspectives

Les matériaux hétérogènes sont largement présents dans des applications industrielles à différents niveaux de température. Leurs hétérogénéités en structure et/ou en composition, sont généralement conçues pour répondre à des fonctionnalités spécifiques qui peuvent être autres que thermiques. Ils sont fréquemment, du fait de ce caractère hétérogène, le siège de transfert radiatif. Ce mode de transfert de chaleur peut s'avérer prépondérant à haute température et à l'origine de dégradation des performances du matériau. Il devient alors indispensable de modéliser le transfert radiatif au travers du matériau pour évaluer son impact.

Pour modéliser les transferts radiatifs au sein des matériaux hétérogènes, la connaissance de leurs propriétés radiatives dans des conditions de température proches des conditions opératoires est capitale. Ces propriétés à haute températures sont mal connues ou sont considérées peu dépendantes de la température en négligeant les possibles réactions thermochimiques (dégazage à haute température, oxydation, cristallisation, sublimation, etc.) et thermomécaniques (dilatation, déformation, etc.) qui peuvent avoir lieu dans le matériau à des températures autres que l'ambiante. Pour déterminer ces propriétés radiatives, il est possible de les prédire à partir de la connaissance des paramètres de structure et de la composition du matériau, ou de les identifier par méthode inverse en associant des modèles de rayonnement et des mesures expérimentales. Dans tout problème d'identification de paramètres à partir de mesures expérimentales, il faut déterminer si le problème inverse est bien-posé, *i.e.*, si le problème inverse admet une unique solution stable.

Nous avons alors proposé dans ce travail de thèse une méthodologie basée sur les méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS) afin d'analyser le caractère bien-posé de problèmes inverses en transferts radiatifs. Cette méthode permet de résoudre un problème radiatif direct en conservant certains paramètres (comme les propriétés radiatives) sous forme symbolique. En sortie d'algorithme symbolique, la grandeur radiative d'intérêt s'écrit sous la forme d'un polynôme dans lequel les paramètres symboliques apparaissent de manière explicite. Une seule simulation Monte Carlo est nécessaire pour définir une grandeur et son incertitude numérique sur tout l'espace des paramètres que nous cherchons à identifier. De plus, ces méthodes bénéficient de tous les avantages des méthodes Monte Carlo classiques : elles n'introduisent pas de biais lors de l'estimation d'une grandeur, fournissent un intervalle de confiance et sont adaptées pour simuler le transfert radiatif dans des géométries complexes.

Suite aux travaux de Galtier *et. al.* [13], la méthode MCS a été approfondie dans le cadre de cette thèse, l'idée étant de la développer pour l'appliquer à l'identification de paramètres. L'effet de choix numériques liés aux algorithmes symboliques (probabilité arbitraire, coefficient d'ex-

inction avec collisions nulles) sur l'identification a notamment été exploré. Ces méthodes MCS sont particulièrement adaptées pour exprimer les grandeurs radiatives en fonction de la température, du coefficient d'absorption et du coefficient de diffusion. En revanche, l'approche proposée par Galtier *et. al.* [13] ne peut pas être appliquée lorsqu'on s'intéresse aux paramètres de la fonction de phase ou à d'autres types de paramètres (géométriques, indices optiques, nombre d'onde, etc.). Pour y remédier, nous proposons une nouvelle méthode symbolique basée sur un développement de polynômes orthogonaux, facile à mettre en oeuvre et sans restriction de choix de paramètres, ouvrant ainsi un champ large de possibilités d'application.

Tout au long de ce travail, la méthode MCS a joué un rôle primordial pour l'analyse du problème inverse. Si le problème consiste à déterminer des propriétés à température ambiante, l'identification des propriétés radiatives à partir de mesures spectrales directionnelles-hémisphériques de transmittance et de réflectance à température ambiante est possible dès lors que la mesure de transmittance est exploitable. Dans ce cas, il est possible de déterminer les coefficients d'absorption et de diffusion solutions du problème inverse, tout en prenant en compte les incertitudes expérimentales et numériques. Lorsque la mesure de transmittance n'est pas exploitable car trop faible, le milieu est optiquement épais et il n'est plus possible d'identifier κ_η et σ_η . Cependant, dans ces zones de fortes épaisseurs optiques d'absorption, le matériau a un comportement surfacique proche du corps noir, et l'identification de κ_η et σ_η n'est plus nécessaire.

A haute température, l'identification des propriétés radiatives est plus compliquée. Une mesure spectrale d'émission seule ne permet pas d'identifier simultanément les coefficients d'absorption et de diffusion, le problème inverse étant mal-posé. L'outil MCS a été utilisé pour analyser l'apport d'informations complémentaires pour rendre le problème inverse bien-posé. Concernant la modélisation, nous avons exploré la possibilité d'identifier des spectres du coefficient d'absorption et du coefficient de diffusion à partir d'un spectre d'émission. Pour cela, il faut parvenir à définir deux fonctions d'évolution spectrale $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ tout en prenant en compte les possibles liens de corrélations qui existent entre les coefficients. De plus, ces propriétés étant homogénéisées, de telles fonctions dépendent de la géométrie des hétérogénéités (taille, distribution, répartition, fraction volumique) et de leurs propriétés optiques (indices de réfraction) au travers de leur composition. Ces informations sur les hétérogénéités ne sont généralement pas accessibles à haute température ; ainsi il est fréquent de supposer que la structure d'un matériau hétérogène est peu dépendante de la température.

L'analyse via MCS a permis de conclure quant à la pertinence de mesures de transmittance ou de réflectance à haute température pour rendre le problème bien-posé. Bien que nous ayons conscience des difficultés métrologiques que pose une mesure de transmittance à haute température, une mesure de transmittance ajoutée à une mesure d'émission rendrait possible l'identification de κ_η et de σ_η .

La problématique qui consiste à identifier les propriétés radiatives homogénéisées d'un matériau hétérogène à partir de mesures spectrales d'émission reste à ce jour un verrou scientifique qui nécessite de poursuivre et d'approfondir cette présente étude. Comme nous l'avons abordé

dans le chapitre 5, l'outil MCS peut être utilisé pour analyser la pertinence d'autres types de modèles ou d'autres types de mesures. Nous tentons ici de proposer quelques perspectives de recherche en s'appuyant sur les potentialités de l'outil MCS.

Supposons dans un premier temps que la structure hétérogène du matériau à haute température est connue. Lorsqu'il s'agit d'identifier un spectre de propriétés radiatives homogénéisées à partir d'un spectre d'émission, nous proposons comme perspective à court-terme d'adapter l'approche proposée par Rozenbaum *et. al.* [36] en développant un algorithme symbolique en géométrie réelle sous l'approximation de l'optique géométrique :

1. Ne connaissant pas les indices de réfraction ($m_1(\eta), m_2(\eta), \dots$) des phases constituant le matériau hétérogène, nous cherchons à identifier ces indices.
2. Nous proposons donc de développer un algorithme MCS en gardant les indices de réfraction sous forme symbolique pour exprimer, sur tout le spectre, la transmittance, la réflectance et le facteur d'émission comme une fonction polynomiale de $m_1(\eta)$, $m_2(\eta)$, etc.

$$T(\eta) = f(m_1(\eta), m_2(\eta), \dots) \quad R(\eta) = g(m_1(\eta), m_2(\eta), \dots) \quad F(\eta) = h(m_1(\eta), m_2(\eta), \dots)$$

en sachant qu'une seule simulation MCS dans la géométrie complexe du matériau (sans homogénéisation) permet d'obtenir ces trois expressions.

3. L'évolution spectrale des indices de réfraction ($m_1(\eta), m_2(\eta), \dots$) est déduite de la modélisation des fonctions diélectriques des phases composant le milieu hétérogène, et ce modèle de fonctions détermine le nombre de paramètres N_p à identifier.
4. Nous comparons puis minimisons les écarts entre les facteurs d'émission mesurés et calculés à partir de $F(\eta)$ pour identifier les N_p paramètres.
5. Enfin, nous calculons $T(\eta)$ et $R(\eta)$ en utilisant les paramètres identifiés pour obtenir les spectres d'absorption et de diffusion.

L'approche symbolique en géométrie réelle peut être étendue au cas où l'approximation de l'optique géométrique n'est pas valable en résolvant les équations de Maxwell. Les temps de calculs seraient en revanche plus longs, mais la procédure reste la même.

La proposition précédente a pour limite de supposer une structure hétérogène connue à haute température. Quelles pistes pouvons-nous explorer lorsque la structure des hétérogénéités à haute température est inconnue ?

Comme nous l'avons proposé au chapitre 5, une mesure de transmittance ou de réflectance à haute température peut rendre le problème bien-posé et permettre d'identifier simultanément κ_η et σ_η . Cette perspective n'est pas encore envisageable du fait des difficultés métrologiques que pose actuellement une mesure de transmittance à haute température.

Une seconde piste consiste à travailler sur la modélisation de fonctions spectrales $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ du milieu homogénéisé. Une analyse inverse préliminaire réalisée à température ambiante avec des mesures de transmittance et de réflectance peut permettre de mettre en évidence des fonctions

spectrales adéquates pour $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$, de type :

$$\kappa(\eta) = \sum_n c_n f_n(\eta) \quad \sigma(\eta) = \sum_m d_m g_m(\eta)$$

Les coefficients c_m et d_n ne dépendent pas du nombre d'onde mais de la température. Ainsi, nous pourrions considérer que les fonctions d'évolution spectrales modélisant $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ ont la même forme quelle que soit la température, la dépendance vis-à-vis de celle-ci étant incluse dans la définition des coefficients c_n et d_m . La méthode MCS peut alors être mise en oeuvre pour exprimer une luminance émise en fonction des coefficients c_n et d_m intervenant dans la définition des fonctions d'évolution spectrale $\kappa(\eta)$ et $\sigma(\eta)$ (voir équation 5.13 du chapitre 5). Enfin, l'utilisation de tout le spectre d'émission expérimental peut permettre d'identifier les coefficients c_n et d_m . Toutefois, les différentes corrélations qui peuvent exister entre les coefficients c_n et d_m peuvent rendre l'identification difficile.

En plus des applications concernant la modélisation et la détermination des propriétés radiatives, les méthodes MCS peuvent être mises en oeuvre pour exprimer des flux radiatifs en conservant des paramètres géométriques décrivant la structure hétérogène sous forme symbolique (comme la porosité, la fraction volumique des hétérogénéités, leurs distributions de taille ou d'orientation, etc.). La fonction résultant de l'algorithme symbolique fait intervenir les paramètres géométriques, et peut déterminer le rôle de la structure hétérogène sur le comportement radiatif du milieu d'étude. Cette perspective a été rendue possible grâce à l'approche symbolique basée sur le développement en séries de polynômes orthogonaux (voir section 3 du chapitre 2). Un exemple d'étude consisterait à optimiser la forme d'un matériau (par exemple un absorbeur volumique) pour améliorer ses performances (thermiques, mécaniques, etc.). Cette démarche peut également avoir un intérêt dans d'autres domaines liés aux transferts radiatifs (atmosphère, imagerie médicale, etc.).

Sur le plan expérimental, la précision et l'incertitude sur les mesures d'émission peuvent être améliorées en réalisant un balayage du chemin optique entre les sources (échantillon chauffé ou corps noir) et le détecteur du spectromètre avec un gaz neutre (azote par exemple) ou avec de l'air sec purgé constituant une atmosphère contrôlée et constante au cours de la mesure de spectre. Pour le Quartz dont le nombre d'onde de Christiansen est localisé dans une gamme spectrale où l'absorption par la vapeur d'eau est importante, un tel système de balayage peut réduire l'absorption atmosphérique dans cette gamme spectrale et réduire l'incertitude sur la détermination de la température de surface de la face avant des échantillons chauffés.

Nous avons conscience que le porte échantillon conçu dans le cadre de ce travail présente des conditions d'adiabaticité imparfaites à la périphérie de l'échantillon. L'amélioration des conditions aux limites pour constituer une véritable garde thermique implique le choix d'un autre matériau ayant une conductivité thermique encore plus faible que celle de la mullite composant l'actuel porte échantillon pour travailler sur des matériaux très isolants. Cela risque cependant d'être difficile de trouver des matériaux à haute résistance mécanique et pouvant être portés à haute température, usinables et plus isolants que les échantillons caractérisés en émission. Une

solution consisterait à conserver la mullite comme matériau du porte-échantillon et à travailler sur sa forme et ses dimensions afin d'optimiser les conditions d'adiabaticité à la périphérie des échantillons.

Bibliographie

- [1] L. Robin Carillon, *Etude expérimentale et théorique de l'émission infrarouge de céramiques à haute température : application aux barrières thermiques*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2007.
- [2] S. Le Foll, *Modélisation du couplage conduction/rayonnement dans les systèmes de protection thermique soumis à de très hauts niveaux de température*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2014.
- [3] Y. Dauvois, *Modélisation du transfert thermique couplé conductif et radiatif au sein de milieux fibreux portés à haute température*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, 2016.
- [4] O. Farges, *Conception optimale de centrales solaires à concentration : application aux centrales à tour et aux installations "beam down"*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines d'Albi-Carmaux, 2014.
- [5] S. Mey, *Absorbeur solaire volumique haute température à propriétés optiques contrôlées*. PhD thesis, Université de Perpignan, 2016.
- [6] S. Guevelou, *Characterization of the thermal-radiative properties of foams with numerically controlled structures : towards the design of solar absorbers*. PhD thesis, Université de Nantes, 2015.
- [7] M. Laurent-Sans, *Caractérisation des propriétés thermophysiques de mousses céramiques à haute température*. PhD thesis, Université de Lorraine, 2019.
- [8] F. Achchaq, K. Djellab, and H. Beji, "Hydric, morphological and thermo-physical characterization of glass wools : From macroscopic to microscopic approach," *Construction and Building Materials*, vol. 23, 2009.
- [9] V. Nicolau, *Identification des propriétés radiatives des matériaux semi-transparents diffusants*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1994.
- [10] D. Baillis, *Modélisation des transferts thermiques dans des matériaux semi-transparents de type mousse à pores ouverts et prédiction des propriétés radiatives*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1995.
- [11] L. Moura, *Identification des propriétés radiatives des matériaux semi-transparents diffusants en situation de non symétrie azimutale du champ radiatif*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1998.
- [12] R. Lopes, *Mesure et prediction du facteur d'émission de matériaux semi-transparents à haute température*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1998.
- [13] M. Galtier, M. Roger, F. André, and A. Delmas, "A symbolic approach for the identification of radiative properties," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 196, 2017.
- [14] M. Roger, M. Galtier, F. André, and A. Delmas, "Symbolic Monte Carlo methods : an analysis tool for the experimental identification of radiative properties at high temperature," *Eurotherm Seminar 110 - Computational Thermal Radiation in Participating Media - April 11-13, Cascais, Portugal*, 2018.
- [15] Y. Maanane, M. Roger, A. Delmas, M. Galtier, and F. André, "Symbolic Monte Carlo method applied to the identification of radiative properties of a heterogeneous material," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 249, 2020.

- [16] W. Dunn, "Inverse Monte Carlo solution for radiative transfer in inhomogeneous media," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 29, 1983.
- [17] W. Dunn and J. Shultis, *Exploring Monte Carlo Methods*. Elsevier, 2012.
- [18] Y. Maanane, M. Roger, A. Delmas, M. Galtier, and F. André, "Identification of radiative properties of a Quartzel sample based on Symbolic Monte Carlo Methods," *Proceedings of the 9th International Symposium on Radiative Transfer (RAD19) - June 3-7, Athens, Greece, 2019*.
- [19] M. Roger, Y. Maanane, M. Galtier, F. André, and A. Delmas, "Symbolic Monte Carlo Method based on orthogonal polynomial series : application to phase function," *Proceedings of the 9th International Symposium on Radiative Transfer (RAD19) - June 3-7, Athens, Greece, 2019*.
- [20] M. F. Modest, *Radiative Heat Transfer (Third Edition)*. Elsevier, 2013.
- [21] J. Howell, M. Menguc, and R. Siegel, *Thermal Radiation Heat Transfer, 5th Edition*. Taylor Francis, 2010.
- [22] L. Dombrowsky and D. Baillis, *Thermal Radiation in Disperse Systems : An Engineering Approach*. Begell House Publishers Inc. US, 2010.
- [23] Optical Society of America, *Handbook of Optics Third Edition, 5 Volume Set*. McGraw-Hill's Access Engineering, McGraw-Hill Education, 2010.
- [24] P. Chang, J. Walker, and K. Hopcraft, "Ray tracing in absorbing media," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 96, 2005.
- [25] M. A. Dupertuis, M. Proctor, and B. Acklin, "Generalization of complex Snell–Descartes and Fresnel laws," *Journal of Optical Society of America A*, vol. 11, 1994.
- [26] H. C. Van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*. John Wiley and Sons, 1957.
- [27] M. Kerker, *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*. Ernest M. Loeb, 1969.
- [28] C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley & Sons, 1983.
- [29] S. Lee, "Radiative transfer through a fibrous medium : allowance for fiber orientation," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 36, 1986.
- [30] S. Lee, "Radiation heat-transfer model for fibers oriented parallel to diffuse boundaries," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 2, 1988.
- [31] S. Lee, "Effect of fiber orientation on thermal radiation in fibrous media," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 32, 1989.
- [32] S. Lee, "Scattering phase function for fibrous media," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 33, 1990.
- [33] P. Boulet, G. Jeandel, and G. Morlot, "Model of radiative transfer in fibrous media - Matrix Method," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 36, 1993.
- [34] G. Jeandel, P. Boulet, and G. Morlot, "Radiative transfer through a medium of silica fibres oriented in parallel planes," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 36, 1993.
- [35] S. Le Foll, A. Delmas, and F. André, "Identification of radiative properties for heterogeneous materials at high temperature," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 120, 2017.
- [36] O. Rozenbaum, C. Blanchard, and D. De Sousa Meneses, "Determination of high-temperature radiative properties of porous silica by combined image analysis, infrared spectroscopy and numerical simulation," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 137, 2019.
- [37] L. Rayleigh, "X. On the electromagnetic theory of light," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 12, 1881.

- [38] C. Chu and S. Churchill, "Representation of the angular distribution of radiation scattered by a spherical particle," *Journal of the Optical Society of America*, vol. 45, 1955.
- [39] G. Clark, C. Chu, and S. Churchill, "Angular distribution coefficients for radiation scattered by a spherical particle," *Journal of the Optical Society of America*, vol. 47, 1957.
- [40] B. Davison, *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press, 1958.
- [41] L. Dombrovsky, J. Randrianalisoa, and D. Baillis, "Modified two-flux approximation for identification of radiative properties of absorbing and scattering media from directional-hemispherical measurements," *Journal of Optical Society in America*, vol. 23, 2006.
- [42] L. Dombrovsky, J. Randrianalisoa, W. Lipiński, and D. Baillis, "Approximate analytical solution to normal emittance of semi-transparent layer of an absorbing, scattering and refracting medium," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 112, 2011.
- [43] J. H. Joseph, W. J. Wiscombe, and J. A. Weinman, "The Delta-Eddington Approximation for Radiative Flux Transfer," *Journal of Atmospheric Sciences*, vol. 33, 1976.
- [44] L. G. Henyey and J. L. Greenstein, "Diffuse radiation in the galaxy," *The Astrophysical Journal*, vol. 93, 1941.
- [45] R. Kitamura, L. Pilon, and M. Jonasz, "Optical constants of silica glass from extreme ultraviolet to far infrared at near room temperature," *Journal of Applied Optics*, vol. 46, 2007.
- [46] J. Jeans, "The equations of radiative transfer of energy," *Monthly Notices Royal Astronomical Society*, vol. 78, 1917.
- [47] A. Sommerfeld, *Partial Differential Equations of Physics*. Academic Press, 1964.
- [48] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*. Dover Publications, 1960.
- [49] C. Lee, "The discrete S-N approximation to transport theory," *Technical Information Series Report, Lawrence Livermore Laboratory*, vol. LA2595, 1962.
- [50] K. Lathrop and B. Carlson, "Discrete-ordinates angular quadrature of the neutron transport equation," *Technical Information Series Report, Los Alamos Scientific Laboratory*, vol. LASL-3186, 1965.
- [51] A. Schuster, "Radiation through a foggy atmosphere," *The Astrophysical Journal*, 1905.
- [52] P. Kubelka, "New contributions to the optics of intensely light-scattering materials, part I," *Journal of the Optical Society of America*, vol. 38, 1948.
- [53] L. Silbertstein, "The transparency of turbid media," *Journal of the Optical Society of America*, vol. 15, 1927.
- [54] J. R. Howell, "Application of Monte Carlo to Heat Transfer Problems," vol. 5 of *Advances in Heat Transfer*, Elsevier, 1969.
- [55] M. Chahlaoui, *Modélisation du rayonnement thermique dans un coeur de réacteur nucléaire dégradé en présence de vapeur et de gouttes d'eau*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2011.
- [56] M. Zarrouati, *Modélisation des transferts radiatifs dans des milieux poreux non Beeriens au voisinage des parois : Application aux procédés de vaporeformage de méthane*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2015.
- [57] J. Petrasch, P. Wyss, and A. Steinfeld, "Tomography-based Monte Carlo determination of radiative properties of reticulate porous ceramics," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 105, 2007.
- [58] S. Haussener, W. Lipiński, J. Petrasch, P. Wyss, and A. Steinfeld, "Tomographic Characterization of a Semitransparent-Particle Packed Bed and Determination of its Thermal Radiative Properties," *Journal of Heat Transfer*, vol. 131, 2009.

- [59] S. Haussener, W. Lipiński, P. Wyss, and A. Steinfeld, "Tomography-based analysis of radiative transfer in reacting packed beds undergoing a solid-gas thermochemical transformation," *Journal of Heat Transfer*, vol. 132, 2010.
- [60] N. Diascorn, *Elaboration and characterization of silica and polyurethane based thermal superinsulating hybrid aerogels*. Phd thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2014.
- [61] J. Taine, F. Bellet, V. Leroy, and E. Iacona, "Generalized radiative transfer equation for porous medium upscaling : Application to the radiative Fourier law," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 53, 2010.
- [62] J. Taine and F. Enguehard, "Statistical modelling of radiative transfer within non-Beerian effective phases of macroporous media," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 139, 2019.
- [63] M. Tancrez and J. Taine, "Direct identification of absorption and scattering coefficients and phase function of a porous medium by a Monte Carlo technique," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 47, 2004.
- [64] B. Zeghondy, E. Iacona, and J. Taine, "Determination of the anisotropic radiative properties of a porous material by radiative distribution function identification (RDFI)," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 49, 2006.
- [65] B. Zeghondy, E. Iacona, and J. Taine, "Experimental and RDFI calculated radiative properties of a mullite foam," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 49, 2006.
- [66] J.-L. Consalvi, B. Porterie, and J. Loraud, "A formal averaging procedure for radiation heat transfer in particulate media," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 45, 2002.
- [67] W. Lipiński, J. Petrasch, and S. Haussener, "Application of the spatial averaging theorem to radiative heat transfer in two-phase media," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 111, 2010.
- [68] J. Sacadura, "Thermal radiative properties of complex media : theoretical prediction versus experimental identification," *Heat Transfer Engineering*, vol. 32, 2011.
- [69] P. Parthasarathy, P. Habisreuther, and N. Zarzalis, "Identification of radiative properties of reticulated ceramic porous inert media using ray tracing technique," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 113, 2012.
- [70] R. Arambakam, H. Valedi Tafreshi, and B. Pourdeyhimi, "Dual-Scale 3D approach for modeling radiative heat transfer in fibrous insulations," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 64, 2013.
- [71] J. Randrianalisoa and D. Baillis, "Radiative properties of densely packed spheres in semitransparent media : A new geometric optics approach," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 111, 2010.
- [72] A. Delmas, L. Robin-Carillon, and F. Oelhoffen, "Experimental and Theoretical Characterization of Emission from Ceramics at High Temperature : Investigation on Yttria-Stabilized Zirconia and Alumina," *International Journal of Thermophysics*, vol. 31, 2010.
- [73] P. Boulet, J. Gérardin, Z. Acem, G. Parent, A. Collin, Y. Pizzo, and B. Porterie, "Optical and radiative properties of clear PMMA samples exposed to a radiant heat flux," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 82, 2014.
- [74] D. De Sousa Meneses, M. Malki, and P. Echegut, "Structure and lattice dynamics of binary lead silicate glasses investigated by infrared spectroscopy," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 352, 2006.
- [75] D. Baillis, M. Arduini-Schuster, and J. Sacadura, "Identification of spectral radiative properties of polyurethane foam from hemispherical and bi-directional transmittance and reflectance measurements," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 67, 2002.

- [76] A. Tilioua, L. Libessart, G. Jeandel, and S. Lassue, "Determination of radiative properties of polyester batting insulation material from hemispherical transmittance and reflectance measurements," *Applied Thermal Engineering*, vol. 105, 2016.
- [77] D. De Sousa Meneses, M. Balat-Pichelin, O. Rozenbaum, L. del Campo, and P. Echegut, "Optical indices and transport scattering coefficient for pyrolytic boron nitride : a natural thermal barrier coating for solar shields," *Journal of Materials Science*, vol. 51, 2016.
- [78] L. Dombrovsky, B. Rousseau, J. Randrianalisoa, and D. Baillis, "High Temperature Infrared Properties of YSZ Electrolyte Ceramics for SOFCs : Experimental Determination and Theoretical Modeling," *Journal of American Ceramics Society*, vol. 94, 2011.
- [79] M. Galtier, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, J. Gautrais, A. Khuong, B. Piaud, and G. Terrée, "Integral formulation of null-collision Monte Carlo algorithms," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 125, 2013.
- [80] V. Eymet, D. Poitou, M. Galtier, M. El Hafi, G. Terrée, and R. Fournier, "Null-collision meshless Monte Carlo : Application to the validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 127, 2013.
- [81] M. Galtier, *Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines d'Albi-Carmaux, 2014.
- [82] N. Metropolis and S. Ulam, "The Monte Carlo Method," *Journal of the American Statistical Association*, vol. 44, 1949.
- [83] R. Fournier, S. Blanco, V. Eymet, E. H. Mouna, and C. Spiesser, "Radiative, conductive and convective heat-transfers in a single Monte Carlo algorithm," *Journal of Physics : Conference Series*, vol. 676, 2016.
- [84] L. Ibarrart, C. Caliot, M. E. Hafi, R. Fournier, S. Blanco, S. Dutour, J. Dauchet, J.-M. Tregan, V. Eymet, and V. Forest, "Combined conductive-convective-radiative heat transfer in complex geometry using the Monte Carlo Method : Application to solar receivers," *International Heat Transfer Conference 16*, 2018.
- [85] L. Penazzi, S. Blanco, C. Caliot, C. Coustet, E. H. Mouna, R. Fournier, M. Galtier, L. Ibarrart, and M. Roger, "Toward the use of Symbolic Monte Carlo for conduction-radiation coupling in complex geometries," *Proceedings of the 9th International Symposium on Radiative Transfer (RAD19) - June 3-7, Athens, Greece*, 2019.
- [86] J. Novák, I. Georgiev, J. Hanika, and W. Jarosz, "Monte Carlo Methods for Volumetric Light Transport Simulation," *Computer Graphics Forum*, vol. 37, 2018.
- [87] J. Novák, I. Georgiev, J. Hanika, J. Krivanek, and W. Jarosz, "Monte Carlo methods for physically based volume rendering," *ACM SIGGRAPH Courses*, 2018.
- [88] J. Farmer and J. Howell, "Comparison of Monte Carlo strategies for radiative transfer in participating media," *Advances in heat transfer*, vol. 31, 1998.
- [89] N. Shamsundar, E. Sparrow, and R. Heinisch, "Monte Carlo radiation solutions : effect of energy partitioning and number of rays," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 16, 1973.
- [90] J. Dauchet, J.-J. Beziau, S. Blanco, C. Caliot, J. Charon, C. Coustet, M. El Hafi, V. Eymet, O. Farges, V. Forest, R. Fournier, M. Galtier, J. Gautrais, A. Khuong, L. Pelissier, B. Piaud, M. Roger, G. Terrée, and S. Weitz, "Addressing nonlinearities in Monte Carlo," *Scientific Reports*, vol. 8, 2018.
- [91] M. Galtier, S. Blanco, J. Dauchet, M. El Hafi, V. Eymet, R. Fournier, M. Roger, C. Spiesser, and G. Terrée, "Radiative transfer and spectroscopic databases : A line-sampling Monte Carlo approach," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 172, 2016.

- [92] S. Subramaniam and M. P. Menguc, "Solution of the inverse radiation problem for inhomogeneous and anisotropically scattering media using a Monte Carlo technique," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 34, 1991.
- [93] R. H. Cameron and W. T. Martin, "The Orthogonal Development of Non-Linear Functionals in Series of Fourier-Hermite Functionals," *Annals of Mathematics*, vol. 48, 1947.
- [94] P. Kubelka, "New Contributions to the Optics of Intensely Light-Scattering Materials. Part II : Nonhomogeneous Layers," *Journal of the Optical Society of America*, vol. 44, 1954.
- [95] P. Honnerová, J. Martan, Z. Veselý, and M. Honner, "Method for emissivity measurement of semitransparent coatings at ambient temperature," *Scientific Reports*, vol. 7, 2017.
- [96] D. Kechemair, *Contribution à l'étude de l'interaction laser-matière : instrumentation et optimisation de la trempe superficielle des aciers par laser CO₂ continu*. PhD thesis, Université Paris 11, 1989.
- [97] *Bruker IFS 66v Working manual*.
- [98] B. Rousseau, A. Canizares, D. De Sousa Meneses, G. Matzen, P. Echegut, M. Di Michiel, and J. Thovert, "Direct simulation of the high temperature optical behaviour of a porous medium based on a CT image," *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 300, 2007. Proceedings of the Fourth International TRI/Princeton Workshop "Characterization of Porous Materials : from Angstroms to Millimeters".
- [99] K. Joulain, Y. Ezzahri, J. Drevillon, B. Rousseau, and D. De Sousa Meneses, "Radiative thermal rectification between SiC and SiO₂," *Optics Express*, vol. 23, 2015.
- [100] B. Rousseau, J. Brun, D. Meneses, and P. Echegut, "Temperature Measurement : Christiansen Wavelength and Blackbody Reference," *International Journal of Thermophysics*, vol. 26, 2005.
- [101] D. De Sousa Meneses, M. Eckes, L. Campo, and P. Echegut, "Phase transformations of crystalline sio₂ versus dynamic disorder between room temperature and liquid state," *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 26, 2014.
- [102] J. Beck, B. Blackwell, and C. Saint Clair, *Inverse Heat Conduction : Ill-Posed Problems*. Wiley-Interscience publication, Wiley, 1985.
- [103] J. Hadamard, *Lectures on the Cauchy Problem in Linear Partial Differential Equations*. Yale University Press, 1923.
- [104] A. Kirsch, *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Springer, 2011.
- [105] J. Battaglia, J. Bauzin, M. Dal, S. Demeyer, Y. Favennec, J. Gardarein, B. Garnier, J. Gaspar, N. Horny, F. Joly, L. Ibos, J. Krapez, F. Lanzetta, N. Laraqi, P. Le Masson, C. Le Niliot, D. Maillet, J. Meulemans, M. Nguyen, H. Orlande, L. Pérez, T. Pierre, H. Pron, O. Quéméner, B. Rémy, F. Rigollet, C. Rodiet, S. Rouchier, Y. Rouizi, and P. Salagnac, "METTI : Advanced Autumn School in Thermal Measurements and Inverse Techniques, 7th edition," 2019.
- [106] N. McCormick, "Methods for solving inverse problems for radiation transport : an update," *Transport Theory and Statistical Physics*, vol. 15, 1990.
- [107] N. McCormick, "Inverse Radiative Transfer Problems : A Review," *Nuclear Science Engineering*, vol. 112, 1992.
- [108] B. Sumlin, W. Heinson, and R. Chakrabarty, "Retrieving the aerosol complex refractive index using PyMieScatt : A Mie computational package with visualization capabilities," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 205, 2018.
- [109] E. Nichelatti, "Complex refractive index of a slab from reflectance and transmittance : analytical solution," *Journal of Optics A : Pure and Applied Optics*, vol. 4, 2002.

- [110] D. De Sousa Meneses, J.-F. Brun, P. Echegut, and P. Simon, "Contribution of Semi-Quantum Dielectric Function Models to the Analysis of Infrared Spectra," *Applied Spectroscopy*, vol. 58, 2004.
- [111] "FOCUS - Curve Fitting Software." <https://www.cemhti.cnrs-orleans.fr/pot/software/focus.html>.
- [112] P. Griffiths and J. De Haseth, *Fourier transform infrared spectrometry*. Chemical analysis, Wiley, 1986.

Annexe A

Ecart-type MCS

Dans le chapitre 2, nous avons développé la méthode MCS afin d'exprimer une grandeur radiative I sous la forme de polynômes dans lesquels les paramètres symboliques apparaissent de manière explicite. Dans cette annexe, nous détaillerons les calculs symboliques des écarts-types.

De manière générale, l'écart-type de l'estimation de la luminance par MCS est approximé par :

$$s_{\tilde{I}} \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{\text{mc}} - 1)} \left\{ \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i^2 - \tilde{I}^2 \right\}} \quad (\text{A.1})$$

① ②

où w_i correspond au poids de Monte Carlo retenu pour le i -ème échantillonnage et \tilde{I} est une estimation de I calculée à partir des moyennes des poids w_i :

$$\tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i$$

1 Un paramètre symbolique

Dans le cas où un seul paramètre α est conservé sous forme symbolique, le poids w_i prend la forme générale suivante :

$$w_i = \sum_j a_{j,i} f_j(\alpha) \quad (\text{A.2})$$

où f_j est une fonction de α (par exemple un polynôme) et $a_{j,i}$ un coefficient retenu lors du i -ème échantillonnage et qui ne dépend pas du paramètre symbolique. La moyenne de ces poids donne une estimation de I :

$$\tilde{I}(\alpha) = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} w_i = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} \left(\sum_j a_{j,i} f_j(\alpha) \right) = \sum_j \left(\frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} a_{j,i} \right) f_j(\alpha) = \sum_j \bar{a}_j f_j(\alpha)$$

avec :

$$\bar{a}_j = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mc}}} a_{j,i}$$

Pour estimer l'écart-type MCS associé, il suffit de développer chacun des termes de l'expression A.1. Commençons par développer le premier terme :

$$\begin{aligned}
 \textcircled{1} : \quad \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i^2 &= \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(\sum_j a_{j,i} f_j(\alpha) \right)^2 \\
 &= \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(\sum_j \sum_k a_{j,i} f_j(\alpha) a_{k,i} f_k(\alpha) \right) \\
 &= \sum_j \sum_k \left(\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{j,i} a_{k,i} \right) f_j(\alpha) f_k(\alpha) \\
 &= \sum_j \sum_k \overline{a_j a_k} f_j(\alpha) f_k(\alpha)
 \end{aligned}$$

où les coefficients $\overline{a_j a_k}$ sont donnés par :

$$\overline{a_j a_k} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{j,i} a_{k,i}$$

Développons ensuite le second terme :

$$\begin{aligned}
 \textcircled{2} : \quad \tilde{I}^2 &= \left(\sum_j \overline{a_j} f_j(\alpha) \right)^2 \\
 &= \sum_j \sum_k \overline{a_j} f_j(\alpha) \overline{a_k} f_k(\alpha)
 \end{aligned}$$

La dernière étape consiste à regrouper les termes $\textcircled{1}$ et $\textcircled{2}$:

$$\begin{aligned}
 \textcircled{1} - \textcircled{2} : \quad \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i^2 - \tilde{I}^2 &= \sum_j \sum_{k=0} \overline{a_j a_k} f_j(\alpha) f_k(\alpha) - \sum_j \sum_{k=0} \overline{a_j} f_j(\alpha) \overline{a_k} f_k(\alpha) \\
 &= \sum_j \sum_k (\overline{a_j a_k} - \overline{a_j} \overline{a_k}) f_j(\alpha) f_k(\alpha)
 \end{aligned}$$

Lorsqu'un seul paramètre α est conservé sous forme symbolique, l'écart-type MCS s'écrit comme une fonction de α :

$$\boxed{s_I(\alpha) \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \sum_j \sum_k (\overline{a_j a_k} - \overline{a_j} \overline{a_k}) f_j(\alpha) f_k(\alpha)}} \quad (\text{A.3})$$

Le calcul des coefficients $\overline{a_j a_k}$ est réalisé dans le même algorithme permettant de générer les coefficients $\overline{a_j}$. Ainsi, une seule simulation permet d'obtenir simultanément les coefficients $\overline{a_j}$ et les coefficients $\overline{a_j a_k}$ et donc la grandeur I et son incertitude numérique.

2 Deux paramètres symboliques

Lorsque deux paramètres α et ξ sont conservés sous forme symbolique, le poids w_i peut s'écrire sous la forme polynomiale suivante :

$$w_i = \sum_j \sum_k a_{j,k,i} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) \quad (\text{A.4})$$

où f_j et g_k sont des fonctions de α et ξ et $a_{j,k,i}$ un coefficient retenu lors du i -ème échantillonnage et qui ne dépend pas des paramètres symboliques. La moyenne de ces poids donne une estimation de I :

$$\tilde{I} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i = \sum_j \sum_k \overline{a_{j,k}} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi)$$

avec :

$$\overline{a_{j,k}} = \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{j,k,i}$$

Nous reprenons ici la démonstration faite dans la section précédente afin d'exprimer l'écart-type MCS sous la forme d'une fonction de α et ξ . Pour cela, nous allons à nouveau développer chacun des termes ① et ② de l'équation A.1.

$$\begin{aligned} \text{①} : \quad \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} w_i^2 &= \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(\sum_j \sum_k a_{j,k,i} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) \right)^2 \\ &= \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \left(\sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} a_{j,k,i} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) a_{j',k',i} f_{j'}(\alpha, \xi) g_{k'}(\alpha, \xi) \right) \\ &= \sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} \left(\frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{j,k,i} a_{j',k',i} \right) f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) f_{j'}(\alpha, \xi) g_{k'}(\alpha, \xi) \\ &= \sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} \overline{a_{j,k} a_{j',k'}} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) f_{j'}(\alpha, \xi) g_{k'}(\alpha, \xi) \end{aligned}$$

où les coefficients $\overline{a_{j,k} a_{j',k'}}$ sont donnés par :

$$\overline{a_{j,k} a_{j',k'}} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} a_{j,k,i} a_{j',k',i}$$

Développons ensuite le second terme :

$$\begin{aligned} \text{②} : \quad \tilde{I}^2 &= \left(\sum_j \sum_k \overline{a_{j,k}} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) \right)^2 \\ &= \sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} \overline{a_{j,k}} f_j(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) \overline{a_{j',k'}} f_{j'}(\alpha, \xi) g_{k'}(\alpha, \xi) \end{aligned}$$

En regroupant chacun des termes ① et ②, l'écart-type MCS s'écrit comme une fonction de α et ξ :

$$s_I(\alpha, \xi) \simeq \sqrt{\frac{1}{(N_{mc} - 1)} \sum_j \sum_k \sum_{j'} \sum_{k'} \left(\overline{a_{j,k} a_{j',k'}} - \overline{a_{j,k}} \overline{a_{j',k'}} \right) f_j(\alpha, \xi) f_{j'}(\alpha, \xi) g_k(\alpha, \xi) g_{k'}(\alpha, \xi)} \quad (\text{A.5})$$

3 Trois paramètres symboliques

L'extension des développements précédents aux cas où plus de trois paramètres sont conservés sous forme symbolique ne pose aucune difficulté supplémentaire puisque la méthodologie pour obtenir une estimation de l'écart-type comme une fonction des paramètres symboliques est

identique. En effet, pour trois paramètres symboliques α , ξ et ζ , le poids peut être écrit sous la forme générale suivante :

$$w_i = \sum_j \sum_k \sum_n a_{j,k,n,i} t_j(\alpha, \xi, \zeta) u_k(\alpha, \xi, \zeta) v_n(\alpha, \xi, \zeta) \quad (\text{A.6})$$

où t_j , u_k et v_n sont des fonctions de α , ξ et ζ et $a_{j,k,n,i}$ un coefficient retenu lors du i -ième échantillonnage et qui ne dépend pas des paramètres symboliques. Une estimation de I par MCS est donnée par la moyenne des poids :

$$\tilde{I} = \frac{1}{N_{\text{mcs}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mcs}}} w_i = \sum_j \sum_k \sum_n \overline{a_{j,k,n}} t_j(\alpha, \xi, \zeta) u_k(\alpha, \xi, \zeta) v_n(\alpha, \xi, \zeta)$$

avec :

$$\overline{a_{j,k,n}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{mcs}}} a_{j,k,n,i}$$

Sans développer à nouveau l'expression A.1, nous pouvons facilement montrer que l'écart-type MCS prend la forme suivante :

$$s_{\tilde{I}}(\alpha, \xi, \zeta) \simeq \left\{ \frac{1}{(N_{\text{mcs}} - 1)} \sum_j \sum_k \sum_n \sum_{j'} \sum_{k'} \sum_{n'} \left(\overline{a_{j,k,n} a_{j',k',n'}} - \overline{a_{j,k,n}} \overline{a_{j',k',n'}} \right) t_j(\alpha, \xi, \zeta) t_{j'}(\alpha, \xi, \zeta) u_k(\alpha, \xi, \zeta) u_{k'}(\alpha, \xi, \zeta) v_n(\alpha, \xi, \zeta) v_{n'}(\alpha, \xi, \zeta) \right\}^{1/2} \quad (\text{A.7})$$

où les coefficients $\overline{a_{j,k,n} a_{j',k',n'}}$ sont donnés par :

$$\overline{a_{j,k,n} a_{j',k',n'}} = \frac{1}{N_{\text{mcs}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{mcs}}} a_{j,k,n,i} a_{j',k',n',i} \quad (\text{A.8})$$

Annexe B

Spectrométrie Infrarouge à Transformée de Fourier (FTIR)

Interféromètre de Michelson

L'interféromètre de Michelson est considéré comme le coeur des FTIR. Il est utilisé pour diviser un faisceau de rayonnement infrarouge en deux de telle sorte que les chemins optiques soient différents. Les deux faisceaux sont ensuite recombinaés, interférant à cause de leur différence de marche, puis acheminés vers un détecteur qui mesure un interférogramme comme expliqué ci-après.

La figure B.1 représente un schéma simplifié d'un interféromètre de Michelson. Il est constitué de deux miroirs perpendiculaires et d'une lame séparatrice. Un des deux miroirs est fixe tandis que l'autre miroir est mobile et dont la position est contrôlée. La lame séparatrice est dimensionnée de manière à transmettre la moitié du faisceau de lumière incident et à réfléchir la moitié restante. En conséquence, le faisceau transmis et le faisceau réfléchi atteignent le miroir fixe et le miroir mobile qui les réfléchissent en retour. Les faisceaux réfléchis par le miroir fixe et par le miroir mobile sont ensuite recombinaés au niveau de la lame séparatrice pour être redirigés vers le capteur.

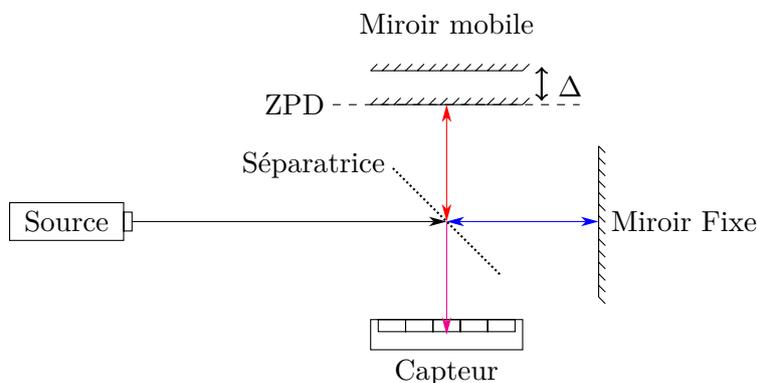


Figure B.1 – Schéma de principe d'un interféromètre de Michelson

Si le chemin parcouru par les deux faisceaux est le même, cela signifie que la distance séparant le miroir fixe et la lame séparatrice est égale à la distance séparant le miroir mobile et la lame séparatrice. Cette situation est définie comme étant une différence de marche nulle (*zero path difference* ZPD). Lorsque le miroir mobile s'éloigne de la lame séparatrice, le faisceau réfléchi par le miroir mobile parcourt un chemin plus long comparé à la distance parcourue par le faisceau réfléchi par le miroir fixe. L'écart de position par rapport à ZPD est défini comme étant le déplacement noté Δ . La distance supplémentaire parcourue par le faisceau (différence de marche ou *optical path difference*, dorénavant appelée OPD) notée δ est donc $\delta = 2\Delta$.

Considérons tout d'abord que la source de rayonnement est monochromatique (l'intensité F est un spectre composé d'une seule longueur d'onde λ ou nombre d'onde $\eta = 1/\lambda$). Lorsque l'OPD est un multiple de la longueur d'onde ($\delta = n\lambda$), une intensité maximale est mesurée au niveau du détecteur puisque nous sommes en présence d'interférences constructives. A l'opposé, lorsque l'OPD est un demi-multiple de la longueur d'onde ($\delta = (n + 1/2)\lambda$), l'interférence est destructive et le détecteur mesure une intensité minimale. Puisque le miroir mobile se déplace, l'intensité du signal mesuré par le détecteur oscille de manière sinusoïdale. Un interférogramme représente l'évolution de l'intensité du signal mesuré en fonction de la différence de marche OPD. Lorsque la source de lumière est polychromatique, un pic à la différence de marche nulle (ZPD) est observé car, pour toutes les longueurs d'onde constituant la source polychromatique, l'intensité du signal détecté par le capteur est maximale.

Transformée de Fourier

La transformation de Fourier associe à une fonction f définie sur \mathfrak{R} et à valeurs réelles ou complexes, une autre fonction F définie sur \mathfrak{R} appelée transformée de Fourier dont la variable indépendante peut être interprétée comme une fréquence ou une pulsation. L'équation ci-après donne l'expression de F , transformée de Fourier de f :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\exp(-j\omega t)dt \quad (\text{B.1})$$

avec $j^2 = -1$. Dans le cas où la fonction f admet uniquement des valeurs réelles, sa transformée de Fourier s'écrit :

$$F(\omega) = \text{Re} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\exp(-j\omega t)dt \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\cos(j\omega t)dt \quad (\text{B.2})$$

Approche intuitive : Avant de détailler la transformée de Fourier dans le cadre de mesures spectrométriques, essayons d'établir une analogie entre le déplacement du miroir mobile de l'interféromètre de Michelson et l'aspect spectral de l'intensité lumineuse mesurée par le détecteur. L'interférogramme obtenu est une courbe de l'intensité du signal mesuré en fonction de la différence de marche. La transformation de Fourier peut être vue comme l'inversion de la

variable indépendante d'une fonction. En conséquence, la transformation de Fourier d'un interférogramme peut être vue comme l'inversion de la différence de marche. Comme la différence de marche a la dimension d'une longueur (déplacement du miroir mobile), son inverse a pour dimension l'inverse d'une longueur. Si la différence de marche est exprimée en cm, son inverse est exprimé en cm^{-1} : il s'agit du nombre d'onde η . La courbe de la transformée de Fourier de l'interférogramme correspond au spectre du signal mesuré en fonction du nombre d'onde.

Approche mathématique : Soit ϕ le déphasage entre les deux faisceaux réfléchis par le miroir fixe et le miroir mobile. La longueur d'onde λ (ou le nombre d'onde $\eta = 1/\lambda$), le déphasage ϕ et la différence de marche δ sont liés par la relation :

$$\frac{\phi}{2\pi} = \frac{\delta}{\lambda} \Rightarrow \phi = 2\pi\eta\delta \quad (\text{B.3})$$

L'onde plane incidente est polychromatique, donc composée d'une distribution spectrale $F(\eta)$. Soit F_η l'intensité de la composante spectrale caractérisée par son nombre d'onde η . La lame séparatrice divise l'onde incidente en deux ondes d'intensités égales. En conséquence, l'intensité de la composante spectrale de chacune des ondes émergentes est $I_{0,\eta} = F(\eta)/4$. Comme les deux faisceaux sont issus de la même source, ceux-ci sont cohérents et leurs amplitudes s'additionnent. Pour une différence de marche δ entre les 2 miroirs, pour chaque nombre d'onde η , la notation complexe de l'amplitude du signal capté par le détecteur est :

$$\begin{aligned} \underline{I}(\eta) &= \underline{I}_1(\eta) + \underline{I}_2(\eta) = 2I_{0,\eta} (1 + \exp(j\phi)) \\ I(\eta) &= \text{Re}(\underline{I}(\eta)) = 2I_{0,\eta} (1 + \cos(2\pi\eta\delta)) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

La contribution élémentaire dI provenant d'un intervalle spectrale $d\eta$ centré sur η est :

$$dI(\eta) = 2\frac{F(\eta)}{4} (1 + \cos(2\pi\eta\delta)) d\eta \quad (\text{B.5})$$

Pour une source polychromatique de densité spectrale $F(\eta)$, l'intensité totale au point M où interfèrent les ondes et où le signal est capté par détecteur est :

$$\begin{aligned} I(M) &= \int_0^\infty dI \\ &= \int_0^\infty \frac{F(\eta)}{2} (1 + \cos(2\pi\eta\delta)) d\eta \\ &= \int_0^\infty \frac{F(\eta)}{2} d\eta + \frac{1}{2} \int_0^\infty F(\eta)\cos(2\pi\eta\delta) d\eta \\ &= \frac{I_0}{2} + \frac{1}{2}I(\delta) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Le premier terme de l'équation précédente est une constante indépendante de la différence de marche δ . Si l'on mesure uniquement la partie variable de l'intensité du signal au point où interfèrent les ondes, on obtient la courbe $I(\delta)$ en fonction de la différence de marche δ aussi appelée l'interférogramme de la source.

L'équation qui lie $I(\delta)$ à $F(\eta)$ ressemble à la formulation de la transformée de Fourier. Il reste à réaliser quelques traitements mathématiques pour se rapporter à la définition exacte

de la transformée de Fourier. D'abord, les deux bornes de l'intégrale doivent être infinies. La fonction $F(\eta)$ n'a de sens physique que pour des valeurs positives du nombre d'onde η . Pour cela, nous pouvons définir deux fonctions intermédiaires F^+ et F^- telles que :

$$\begin{aligned} F^+(\eta) &= F(\eta) \text{ pour } \eta > 0 \quad \text{et} \quad F^+(\eta) = 0 \text{ pour } \eta < 0 \\ F^-(\eta) &= 0 \text{ pour } \eta > 0 \quad \text{et} \quad F^-(\eta) = F(-\eta) \text{ pour } \eta < 0 \end{aligned}$$

Dans ces conditions, on peut également définir la fonction auxiliaire $F_p(\eta)$ telle que :

$$\begin{aligned} F_p(\eta) &= \frac{1}{2} (F^+(\eta) + F^-(\eta)) \\ F_p(\eta) &= \frac{1}{2} F^+(\eta) \text{ pour } \eta > 0 \\ F_p(\eta) &= \frac{1}{2} F^-(\eta) \text{ pour } \eta < 0 \end{aligned}$$

A partir de la fonction auxiliaire, essayons d'établir un lien entre sa transformée de Fourier et l'interférogramme :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} F_p(\eta) \cos(2\pi\eta\delta) d\eta &= \frac{1}{2} \left(\int_{-\infty}^0 F^-(\eta) \cos(2\pi\eta\delta) d\eta + \int_0^{\infty} F^+(\eta) \cos(2\pi\eta\delta) d\eta \right) \\ &= \int_0^{\infty} F(\eta) \cos(2\pi\eta\delta) d\eta = \text{Re} \left(\int_0^{\infty} F(\eta) \exp(j2\pi\eta\delta) d\eta \right) \\ &= 2I(\delta) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

L'intensité I est la transformée de Fourier de la fonction spectrale auxiliaire F_p . La méthode de spectrométrie de Fourier consiste à obtenir expérimentalement la fonction $I(\delta)$, et à en déduire la fonction spectrale par la transformée de Fourier inverse :

$$F_p(\eta) \propto \text{TF}^{-1}(I(\delta)) \quad (\text{B.8})$$

La figure B.2 résume le principe général de la spectroscopie à transformée de Fourier pour le cas d'une source monochromatique et d'une source polychromatique.

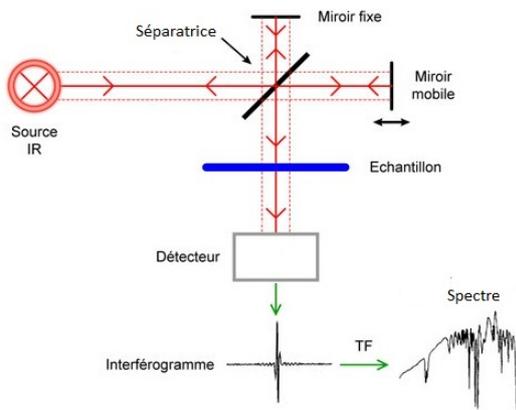


Figure B.2 – Principe de la mesure à base de transformée de Fourier

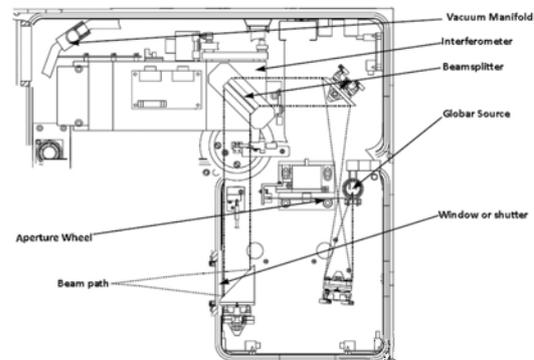


Figure B.3 – Vue schématique du spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) Bruker IFS-66v/S [97]

Lors de la transformation de Fourier, quelques traitements numériques nécessaires sont réalisés :

- **Apodisation** ("*to cut off the feet of the spectrum*"). La transformation de Fourier suppose un déplacement infini du miroir. Cela ne peut être possible expérimentalement. En conséquence, la troncature de l'interférogramme entraîne une perte d'information sur le signal mesuré. Lorsque le signal mesuré ne peut être infini, on le multiplie par une fonction fenêtre d'observation (également appelée fenêtre de pondération ou fenêtre d'apodisation). La plus simple est la fenêtre rectangulaire (ou porte), définie comme un Heaviside sur le domaine considéré. Il existe des fonctions d'apodisation plus complexes et ne feront pas l'objet de détails ici. Le lecteur se référera au livre de Griffiths [112] pour plus d'explications.
- **Correction de phase**. La transformée de Fourier d'un interférogramme produit un spectre complexe au lieu du spectre réel souhaité. Afin d'avoir un spectre réaliste et exploitable, la correction de phase permet de traiter mathématiquement les deux parties réelles et imaginaires. A titre d'illustration, la méthode de Mertz calcule la partie réelle du produit du spectre complexe par l'inverse de l'exponentielle de la phase.
- **Zerofilling**. Comme son nom l'indique, il permet d'augmenter artificiellement la résolution spectrale. En pratique, l'augmentation de la résolution spectrale est réalisée en ajoutant des valeurs nulles sur les bords de l'interférogramme et en multipliant le nombre total de points de l'interférogramme par un multiple de 2. Cela revient à réaliser une interpolation entre chaque point du spectre sans apporter d'information supplémentaire sur le spectre.

Annexe C

Estimation des incertitudes expérimentales

Dans le chapitre 3, les différentes mesures radiatives effectuées au cours de cette thèse ont été présentées. A température ambiante, l'utilisation d'une sphère intégrante a permis d'acquérir des mesures spectrales de transmittance T_η et de réflectance R_η directionnelles-hémisphériques dans la gamme spectrale $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 5000 \text{ cm}^{-1}]$. Pour porter des échantillons à haute température, de multiples optiques ont été utilisées le long des divers trajets optiques et pour mesurer le flux radiatif émis par ces échantillons. Cette annexe détaille le calcul des incertitudes liées aux mesures de transmittance et de réflectance directionnelles-hémisphériques à température ambiante et des mesures d'émission à haute température.

1 Transmittance et réflectance directionnelles-hémisphériques

La transmittance et la réflectance fournies par le spectromètre sont le rapport de la transformée de Fourier de l'interférogramme du signal transmis ou réfléchi par l'échantillon sur la transformée de Fourier de l'interférogramme du signal dit de référence (source interne au spectromètre). Le calcul de la transmittance et de la réflectance dépend donc du signal fourni par le détecteur et des paramètres qui interviennent dans le calcul de la transformée de Fourier (voir annexe B) :

- Le signal fourni par le détecteur DTGS de la sphère intégrante prend en compte un nombre important de paramètres qui peuvent être sources d'erreur. Pour n'en citer que quelques uns, le signal dépend essentiellement de la concentration d'absorbants atmosphériques (absorption atmosphérique le long du trajet entre la source et le détecteur), du réglage de l'interféromètre, de la température des optiques (miroirs, diaphragmes, séparatrice).
- La transformée de Fourier permet de convertir un interférogramme dans l'espace des longueurs (cm) en un signal dans l'espace des nombres d'onde (cm^{-1}). Le calcul exact de la transformée de Fourier suppose un déplacement infini du miroir mobile. Le déplacement limité du miroir mobile induit l'utilisation de traitements numériques qui sont sources d'incertitudes.

Soit M une grandeur mesurée qui dépend d'un ensemble de paramètres $\underline{\beta} = \{\beta_1, \dots, \beta_n\}$. Chaque paramètre β_i constitue une source individuelle et indépendante d'incertitudes. L'incertitude étendue U_e et l'incertitude-type U_t sur la grandeur mesurée M sont données par :

$$U_e(M) = \sum_{i=1}^{i=n} \left| \frac{\partial M(\underline{\beta})}{\partial \beta_i} \right| \Delta \beta_i \quad \& \quad U_t(M) = \sqrt{\sum_{i=1}^{i=n} \left(\frac{\partial M(\underline{\beta})}{\partial \beta_i} \Delta \beta_i \right)^2} \quad (\text{C.1})$$

où $\Delta \beta_i$ est l'incertitude sur le paramètre β_i . Lorsque la grandeur mesurée M correspond à la transmittance et à la réflectance directionnelles-hémisphériques, la majorité des sources d'erreur sont dépendantes et il est difficile d'évaluer individuellement l'impact de chaque paramètre β_i sur la grandeur mesurée.

En première approche, nous pouvons estimer les incertitudes sur la transmittance et la réflectance par une analyse statistique. Cette analyse consiste à considérer l'incertitude expérimentale comme une dispersion d'un ensemble de mesures individuelles et indépendantes. Cela revient à considérer toutes les sources d'erreur comme aléatoires. En pratique, l'incertitude associée aux erreurs aléatoires peut être représentée par l'écart-type d'un nombre important de mesures N_m :

$$\Delta T_\eta = \frac{k}{\sqrt{N_m}} \sqrt{\frac{1}{N_m - 1} \sum_{i=1}^{i=N_m} (T_{\eta,i} - \overline{T}_\eta)^2} \quad (\text{C.2})$$

k est un facteur permettant d'avoir une incertitude élargie (intervalle de confiance plus ou moins large), $T_{\eta,i}$ correspond à une mesure de transmittance au nombre d'onde η et \overline{T}_η est la moyenne de toutes les transmittances mesurées à η :

$$\overline{T}_\eta = \frac{1}{N_m} \sum_{i=1}^{N_m} T_{\eta,i} \quad (\text{C.3})$$

Pour l'échantillon feutre Quartzel caractérisé dans le chapitre 3, dans chacune des configurations de transmittance et de réflectance, $N_m = 100$ mesures ont été réalisées sur une période étendue sur une semaine et à différents moments de la journée afin de prendre en compte la majorité des sources d'erreur dans le calcul de la transmittance et de la réflectance (variation des conditions atmosphériques dans la salle, échauffement des optiques, dérèglement de l'interféromètre, etc.).

Sur la figure C.1 sont représentées 100 mesures de transmittance et 100 mesures de réflectance. Pour toutes les mesures, le comportement spectral global du feutre est respecté. Pour chaque nombre d'onde, la dispersion des mesures renseigne sur l'incertitude de la mesure. La figure 3.6 du chapitre 3 illustre la moyenne de 100 spectres ainsi que l'incertitude associée aux mesures de transmittance et de réflectance. Le facteur k a été pris égal à 2 pour avoir un intervalle de confiance de 95%.

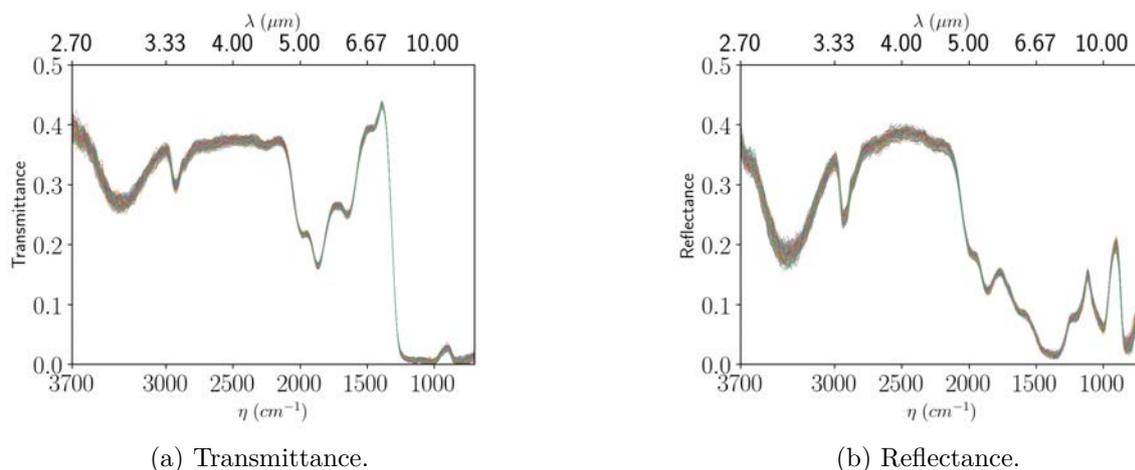


Figure C.1 – 100 mesures (a) de transmittance et (b) de réflectance d'un feutre faible densité.

2 Mesures d'émission haute température

Dans la configuration haute température, la grandeur d'intérêt est la luminance émise par l'échantillon. Le protocole expérimental complet décrivant l'acquisition d'une mesure de luminance est donné dans le chapitre 3. Dans cette annexe, nous détaillerons tous les calculs d'incertitudes ayant servi à l'estimation de la luminance, de la température et du facteur d'émission présentés dans le chapitre 3.

Fonction d'appareil

Avant d'obtenir la luminance émise, la première étape a été de déterminer la fonction d'appareil H_η qui convertit le signal fourni par le détecteur, noté S_η et exprimé en unité arbitraire (UA), en une luminance. Cette fonction d'appareil est calculée à partir du signal $S_{\eta, T_{CN}}$ émis par le corps noir à la température T_{CN} , la transmittance du hublot en CaF_2 notée $\text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}$ et de la loi de Planck à la température du corps noir T_{CN} . Ainsi, le calcul de la fonction d'appareil résulte de trois mesures : une mesure de signal brut, une mesure de transmittance et une mesure de température. Nous pouvons alors écrire :

$$H_\eta = H_\eta(S_{\eta, T_{CN}}; T_{CN}; \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}) = \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \frac{S_{\eta, T_{CN}}}{B_\eta(T_{CN})} \quad (\text{C.4})$$

Pour différents niveaux de température T_{CN} du corps noir, la fonction d'appareil est rappelée figure C.2a. L'incertitude-type de la fonction d'appareil est :

$$\Delta H_\eta = \sqrt{\left(\frac{\partial H_\eta}{\partial T_{CN}} \Delta T_{CN} \right)^2 + \left(\frac{\partial H_\eta}{\partial S_{\eta, T_{CN}}} \Delta S_{\eta, T_{CN}} \right)^2 + \left(\frac{\partial H_\eta}{\partial \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}} \Delta \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \right)^2} \quad (\text{C.5})$$

où :

$$\frac{\partial H_\eta}{\partial T_{CN}} = \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} S_{\eta, T_{CN}} \frac{\partial}{\partial T_{CN}} \left(\frac{1}{B_\eta(T_{CN})} \right)$$

$$\frac{\partial H_\eta}{\partial \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}} = S_{\eta, T_{\text{CN}}} \frac{1}{B_\eta(T_{\text{CN}})}$$

$$\frac{\partial H_\eta}{\partial S_{\eta, T_{\text{CN}}}} = \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \frac{1}{B_\eta(T_{\text{CN}})}$$

Les incertitudes du signal brut $\Delta S_{\eta, T_{\text{CN}}}$ ont été déterminées de manière statistique : elles correspondent à la dispersion d'un nombre important de mesures autour d'une valeur moyenne. Cette approche considère toutes les sources d'erreurs liées à la mesure d'un signal brut comme aléatoires. La figure C.4 illustre l'incertitude absolue ΔS_η et relative $\frac{\Delta S_\eta}{S_\eta}$ pour une mesure S_η fournie par le DTGS du spectromètre. Ensuite, l'incertitude absolue sur la transmittance du hublot en CaF_2 a été prise égale à 0,01 et correspond à l'ordre de grandeur de l'incertitude observée sur les mesures de transmittance et de réflectance d'un feutre Quartzel à température ambiante. Enfin, la température du corps noir dépend de l'incertitude du thermocouple K ($\Delta T_{\text{regulation}} = 1^\circ\text{C}$) servant à la régulation, de la précision du pyromètre $1 \mu\text{m}$ (précision constructeur $\epsilon_{\text{pyr}} = 0,4\%$ de la température en Kelvins) et de la fonction d'étalonnage du pyromètre fournie par le LNE. Avec ces paramètres, la contribution de chaque incertitude (signal, température du corps noir et transmittance du hublot CaF_2) sur l'incertitude-type de la fonction d'appareil est donnée figure C.3c.

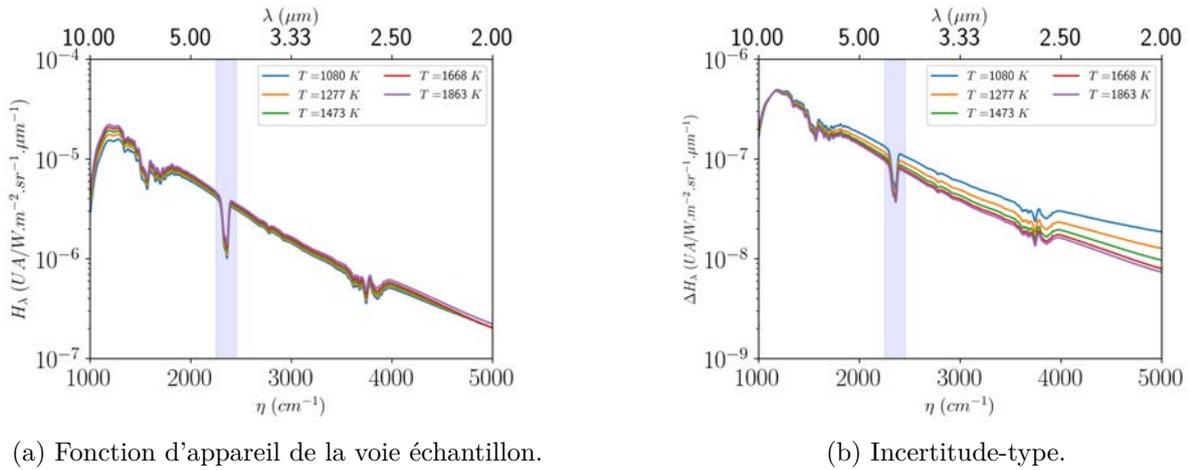


Figure C.2 – (a) Fonction d'appareil de la voie échantillon et (b) incertitude type calculée à partir de l'équation C.5.

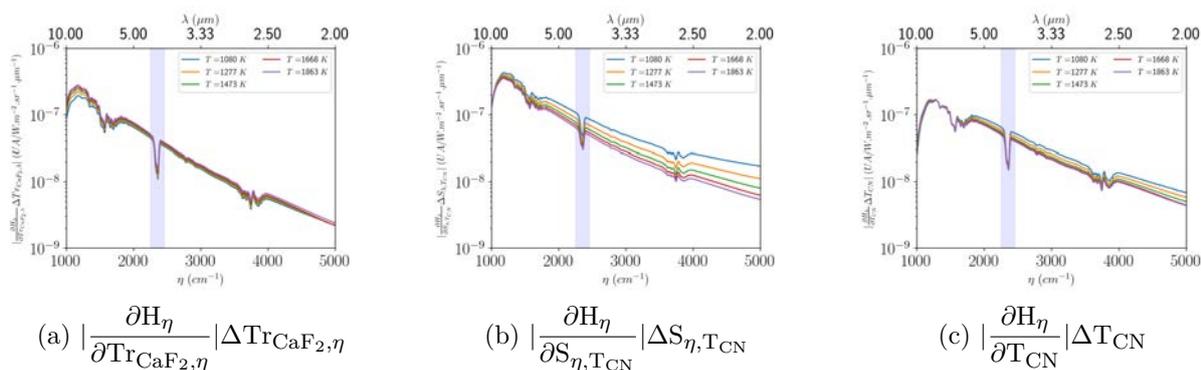


Figure C.3 – Contribution des incertitudes individuelles sur l'estimation de l'incertitude-type de la fonction d'appareil : (a) transmittance du hublot CaF_2 , (b) signal corps noir et (c) température du corps noir.

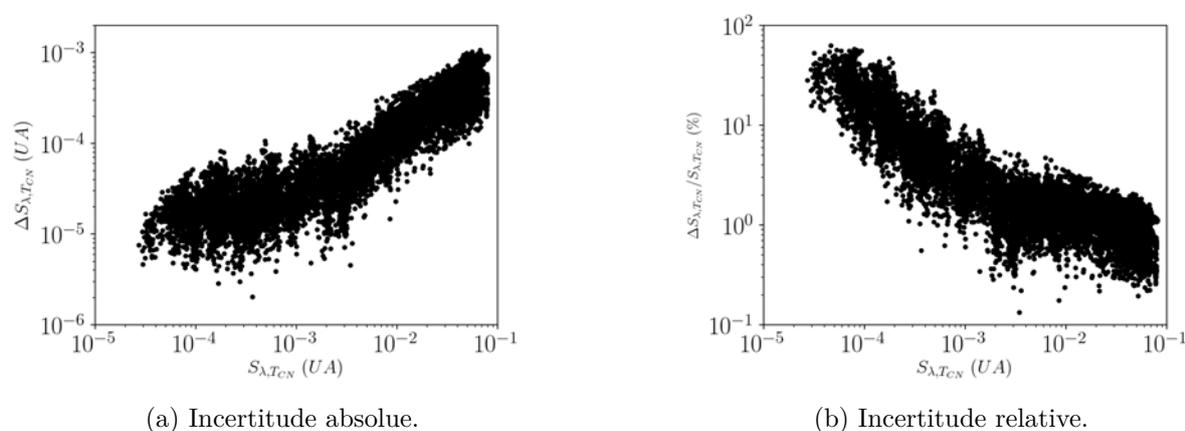


Figure C.4 – (a) Incertitude absolue $\Delta S_{\eta, T_{\text{CN}}}$ et (b) incertitude relative $\frac{\Delta S_{\eta, T_{\text{CN}}}}{S_{\eta, T_{\text{CN}}}}$ du signal brut fourni par le détecteur DTGS.

Fonction d'appareil moyenne

La variation de la fonction d'appareil avec la température est de l'ordre de grandeur de la variation de la fonction d'appareil induite par une incertitude sur la température du corps noir utilisée pour le calcul de la Loi de Planck. Nous pouvons alors considérer que la fonction d'appareil est indépendante de la température et prendre une fonction d'appareil moyenne pour calculer la luminance émise par un échantillon porté à haute température. La fonction d'appareil moyenne est définie par :

$$\overline{H}_\eta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H_\eta(S_{\eta, T_{\text{CN}, i}}; T_{\text{CN}, i}; \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \frac{S_{\eta, T_{\text{CN}, i}}}{B_\eta(T_{\text{CN}, i})} \quad (\text{C.6})$$

où N est le nombre de mesures à différentes températures de corps noir $T_{\text{CN}, i}$. L'incertitude sur la fonction d'appareil moyenne dépend des incertitudes de chaque température $T_{\text{CN}, i}$, des

signaux du corps noir $S_{\eta, T_{CN,i}}$ et de la transmittance du hublot en CaF_2 :

$$\Delta \overline{H}_\eta = \sqrt{\sum_{j=1}^{j=N} \left(\frac{\partial \overline{H}_\eta}{\partial T_{CN,j}} \Delta T_{CN,j} \right)^2 + \sum_{j=1}^{j=N} \left(\frac{\partial \overline{H}_\eta}{\partial S_{\eta, T_{CN,j}}} \Delta S_{\eta, T_{CN,j}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{H}_\eta}{\partial \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}} \Delta \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \right)^2} \quad (\text{C.7})$$

On note $H_{\eta,i} = H_\eta(S_{\eta, T_{CN,i}}; T_{CN,i}; \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta})$. Développons à présent chaque terme de l'équation C.7.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{H}_\eta}{\partial \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}} \Delta \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} &= \frac{\partial}{\partial \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} S_{\eta, T_{CN,i}} B_\eta(T_{CN,i}) \right) \Delta \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \\ &= \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_{\eta, T_{CN,i}} B_\eta(T_{CN,i}) \right) \Delta \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial H_{\eta,i}}{\partial \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta}} \Delta \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial \overline{H}_\eta}{\partial S_{\eta, T_{CN,j}}} \Delta S_{\eta, T_{CN,j}} \right)^2 &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial S_{\eta, T_{CN,j}}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} S_{\eta, T_{CN,i}} B_\eta(T_{CN,i}) \right) \Delta S_{\eta, T_{CN,j}} \right)^2 \\ &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial S_{\eta, T_{CN,j}}} \frac{1}{N} \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} S_{\eta, T_{CN,j}} B_\eta(T_{CN,j}) \Delta S_{\eta, T_{CN,j}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \left(\text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} B_\eta(T_{CN,j}) \Delta S_{\eta, T_{CN,j}} \right)^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial H_{\eta,j}}{\partial S_{\eta, T_{CN,j}}} \Delta S_{\eta, T_{CN,j}} \right)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial \overline{H}_\eta}{\partial T_{CN,j}} \Delta T_{CN,j} \right)^2 &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial T_{CN,j}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \frac{S_{\eta, T_{CN,i}}}{B_\eta(T_{CN,i})} \right) \Delta T_{CN,j} \right)^2 \\ &= \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial T_{CN,j}} \left(\frac{1}{N} \text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} \frac{S_{\eta, T_{CN,j}}}{B_\eta(T_{CN,j})} \right) \Delta T_{CN,j} \right)^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \left(\text{Tr}_{\text{CaF}_2, \eta} S_{\eta, T_{CN,j}} \frac{\partial}{\partial T_{CN,j}} \left(\frac{1}{B_\eta(T_{CN,j})} \right) \Delta T_{CN,j} \right)^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial H_{\eta,j}}{\partial T_{CN,j}} \Delta T_{CN,j} \right)^2 \end{aligned}$$

Les calculs de luminance, de température et de facteur d'émission présentés dans le chapitre ont tous été obtenus en utilisant la fonction d'appareil moyenne dont le spectre est donné figure C.5.

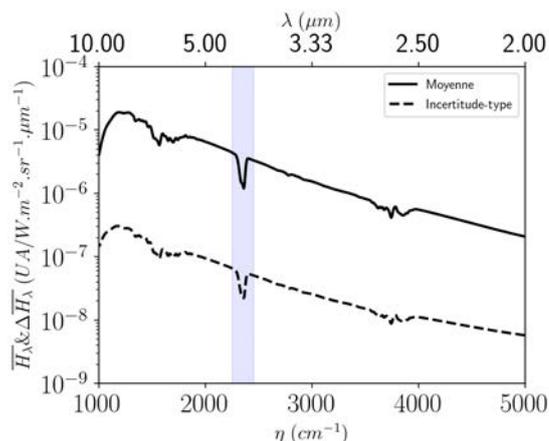


Figure C.5 – Fonction d'appareil moyenne et incertitude-type associée.

Luminance émise

La luminance émise par l'échantillon est calculée à partir de la fonction d'appareil moyenne et du signal fourni par le détecteur DTGS :

$$L_{\eta,\text{ech}}(S_{\eta,\text{ech}}; \overline{H}_{\eta}) = \frac{S_{\eta,\text{ech}}}{\overline{H}_{\eta}} \quad (\text{C.8})$$

Son incertitude-type dépend de l'incertitude du signal brut (figure C.4) et de l'incertitude de la fonction d'appareil moyenne :

$$\Delta L_{\eta,\text{ech}} = \sqrt{\left(\frac{\partial L_{\eta,\text{ech}}}{\partial \overline{H}_{\eta}} \Delta \overline{H}_{\eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial L_{\eta,\text{ech}}}{\partial S_{\eta,\text{ech}}} \Delta S_{\eta,\text{ech}}\right)^2} = \sqrt{\left(-\frac{L_{\eta,\text{ech}}}{\overline{H}_{\eta}^2} \Delta \overline{H}_{\eta}\right)^2 + \left(\frac{1}{\overline{H}_{\eta}} \Delta S_{\eta,\text{ech}}\right)^2} \quad (\text{C.9})$$

Pour cinq puissances de chauffage laser allant de 30 W à 67 W en sortie de cavité, la luminance émise par les échantillons de céramique Quartzel chauffés symétriquement et leurs incertitudes-types associées (courbes en pontillés) sont données figure C.6

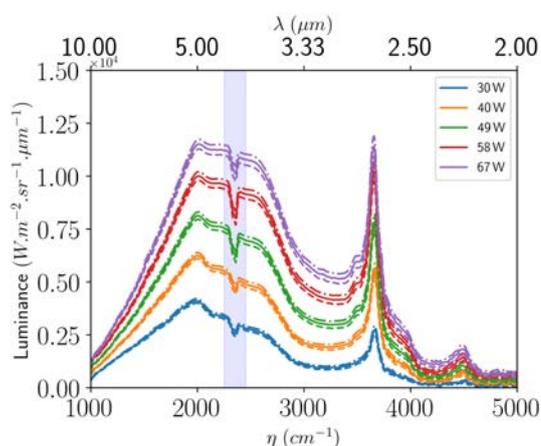


Figure C.6 – Luminance émise par les échantillons de céramique Quartzel à différentes puissances de chauffage laser.

Température au point de Christiansen

Au nombre d'onde de Christiansen η_{Ch} , l'échantillon se comporte comme un corps noir. La température de la surface de mesure notée T_{Ch} s'obtient en inversant la loi de Planck :

$$T_{\text{Ch}}(L_{\eta_{\text{Ch}},\text{ech}}; \eta_{\text{Ch}}) = \frac{h c \eta_{\text{Ch}}}{k_{\text{B}} \ln \left(\frac{2 h c^2 \eta_{\text{Ch}}^3}{L_{\eta_{\text{Ch}},\text{ech}}} + 1 \right)} \quad (\text{C.10})$$

Son incertitude-type dépend de l'incertitude sur la luminance émise au nombre d'onde de Christiansen et de l'incertitude sur le nombre d'onde de Christiansen (plage de nombres d'onde dans laquelle l'absorption de l'échantillon est supérieure à 99%). Pour la céramique Quartzel, le nombre d'onde de Christiansen est localisé à 1244 cm^{-1} et son incertitude a été prise égale à 31 cm^{-1} correspondant à la demi-largeur de l'intervalle pour lequel l'absorption de la céramique est supérieure à 99%. L'incertitude-type de la température de Christiansen est donnée par :

$$\Delta T_{\text{Ch}} = \sqrt{\left(\frac{\partial T_{\text{Ch}}}{\partial L_{\eta_{\text{Ch}},\text{ech}}} \Delta L_{\eta_{\text{Ch}},\text{ech}} \right)^2 + \left(\frac{\partial T_{\text{Ch}}}{\partial \eta_{\text{Ch}}} \Delta \eta_{\text{Ch}} \right)^2} \quad (\text{C.11})$$

L'évolution de la la température de surface de la face avant de l'échantillon en fonction de la puissance du chauffage laser (en sortie de cavité) est représentée sur la figure C.7. Lorsque l'échantillon est chauffé de manière symétrique, celui-ci est quasi-isotherme et sa température est considérée égale à la température de surface de la face avant mesurée par pyrométrie au point de Christiansen.

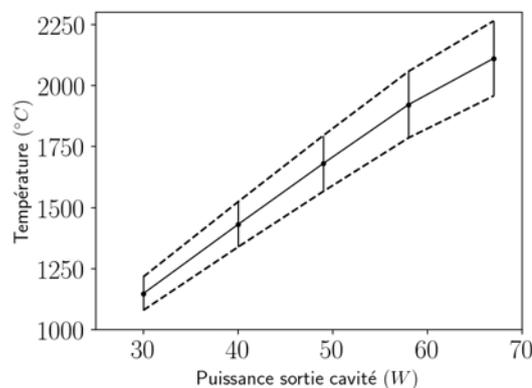


Figure C.7 – Température de surface de la face avant déterminée par pyrométrie au point de Christiansen $\eta_{\text{Ch}} = 1244 \pm 31 \text{ cm}^{-1}$ et incertitude-type associée.

Liste des figures

1.1	Représentation schématique d'une interface lisse séparant deux milieux d'indices n_1 et n_2 . Réflexion spéculaire et réfraction.	15
1.2	Représentation schématique d'une interface rugueuse séparant deux milieux d'indices n_1 et n_2 . Réflexion diffuse et réfraction.	15
1.3	Représentation schématique d'un milieu constitué de plusieurs hétérogénéités.	15
1.4	Exemples de matériaux poreux ou fibreux.	19
1.5	Contributions aux variations de la luminance spectrale dans la direction \mathbf{u} à la traversée du volume dV de milieu semi-transparent.	21
1.6	Notations utilisées pour la formulation intégrale de l'ETR.	25
1.7	Exemples de fonctions de phase usuelles.	30
1.8	Echelles de représentation d'un milieu homogénéisé. Exemple d'un feutre faible densité constitué de fibres de Quartz [60].	33
2.1	algorithme Monte Carlo appliqué au calcul approché de π	44
2.2	algorithme Monte Carlo appliqué au calcul approché de l'intégrale de Dirichlet.	46
2.3	Schéma du cas test. La luminance est calculée au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 correspondant au centre de la surface $x = L_x$ ayant \mathbf{n} comme normale.	47
2.4	Notations utilisées pour l'algorithme Monte Carlo (vue 2D).	47
2.5	Algorithme MCC correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant et diffusant à haute température". Approche standard. Toutes les propriétés radiatives sont connues.	50
2.6	Algorithme MCC correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant et diffusant à haute température". Approche <i>energy partitioning</i> . Toutes les propriétés radiatives sont connues.	52
2.7	Ajout d'un champ de coefficient de collision nulle γ_η pour rendre le champ d'extinction global $\hat{\beta}_\eta$ uniforme.	54
2.8	Algorithme MCC avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant diffusant à haute température". Approche standard. Toutes les propriétés radiatives sont connues. On note $\omega_{\text{abs}} = \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$ et $\omega_{\text{sca}} = \frac{\sigma_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$	56
2.9	Algorithme MCC avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant et diffusant à haute température". Approche <i>energy partitioning</i> . Toutes les propriétés radiatives sont connues. On note $\omega_{\text{abs}} = \frac{\kappa_\eta}{\hat{\beta}_\eta}$	59
2.10	Deux milieux homogènes et isothermes.	61
2.11	Deux milieux homogènes et isothermes.	63
2.12	Exemple d'analyse d'identification permises par MCS. Application à l'identification de la température.	64
2.13	Algorithme MCS avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant non-diffusant à haute température". Le coefficient d'absorption est conservé comme grandeur symbolique.	69
2.14	(a) Exemple de coefficients polynomiaux obtenus grâce à MCS et (b) Facteur d'émission modélisé par le polynôme MCS pour $\hat{\beta}_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$	70
2.15	Notations utilisées pour l'algorithme Monte Carlo (vue 2D). "CN" et "Sca" représentent les collisions nulles et les diffusions.	73

2.16	Algorithme MCS avec collisions nulles correspondant au cas test "Milieu homogène émettant, absorbant diffusant à haute température". Les coefficients d'absorption et de diffusion sont conservés comme grandeurs symboliques.	75
2.17	Représentation graphique des coefficients $\overline{a_{jk}}$	76
2.18	Iso-lignes du facteur d'émission.	76
2.19	Facteur d'émission estimé par MCS pour (a) $\tilde{P}_{s\eta} = 0,1$, (b) $\tilde{P}_{s\eta} = 0,5$ et (c) $\tilde{P}_{s\eta} = 0,9$. Les paramètres des simulations MCS sont $N_{mc} = 10^5$, $\hat{\beta}_{\eta} = 10 \text{ cm}^{-1}$ et $\kappa_{\eta} = 1 \text{ cm}^{-1}$	78
2.20	Evolution du facteur d'émission en fonction du paramètre d'asymétrie de la fonction de phase linéaire anisotrope. Un trait plein correspond à une simulation MCS pour un couple $(\kappa_{\eta}; \sigma_{\eta})$, tandis que chaque cercle a été obtenu avec un calcul MCC pour un triplet $(\kappa_{\eta}, \sigma_{\eta}; A_{\eta})$ donné.	81
2.21	Algorithme MCS générique correspondant au développement d'une grandeur radiative quelconque en une série de polynômes orthogonaux. Le paramètre d'asymétrie g_{η} est conservé comme grandeur symbolique. Un algorithme Monte Carlo classique est utilisé pour générer aléatoirement les chemins dans la partie colorée.	86
2.22	Facteur d'émission estimé par MCS pour (a) $N_p = 5$, (b) $N_p = 10$ et (c) $N_p = 20$. Paramètres fixés : $\kappa_{\eta} = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $\sigma_{\eta} = 5 \text{ cm}^{-1}$	88
2.23	Facteur d'émission estimé par MCS pour (a) $\kappa_{\eta} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$, (b) $\kappa_{\eta} = 1 \text{ cm}^{-1}$ et (c) $\kappa_{\eta} = 5 \text{ cm}^{-1}$. Paramètres fixés : $\sigma_{\eta} = 5 \text{ cm}^{-1}$ et $N_p = 10$	89
2.24	Facteur d'émission estimé par MCS pour (a) $\sigma_{\eta} = 1 \text{ cm}^{-1}$, (b) $\sigma_{\eta} = 5 \text{ cm}^{-1}$ et (c) $\sigma_{\eta} = 50 \text{ cm}^{-1}$. Paramètres fixés : $\kappa_{\eta} = 1 \text{ cm}^{-1}$ et $N_p = 10$	89
3.1	Schéma de principe d'une sphère intégrante [6]. (a) Transmittance. (b) Réflectance.	94
3.2	Effet de la purge sur les spectres de la source interne du spectromètre mesurés par le détecteur DTGS de la sphère intégrante.	95
3.3	Exemple de feutres Quartzel fournis par Saint-Gobain Recherche.	96
3.4	Représentation schématique d'un système tri-couche.	97
3.5	Echantillon Quartzel contraint entre deux fenêtres ZnSe.	98
3.6	Moyenne de 100 spectres de (a) transmittance et de (b) réflectance d'un échantillon de feutre Quartzel. La bande spectrale grisée correspond à la bande d'absorption du CO_2 entre $\eta \simeq 2220 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,5 \mu\text{m}$) et $\eta \simeq 2400 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,17 \mu\text{m}$).	98
3.7	Photos illustratives de la céramique Quartzel.	100
3.8	Moyenne de 20 spectres de (a) transmittance et de (b) réflectance d'un échantillon de céramique Quartzel. (c) L'absorptance est calculée à partir de la Loi de Kirchhoff.	101
3.9	Banc d'émission du CETHIL : (a) schéma 3D et (b) photo.	103
3.10	Système optique de chauffage au laser CO_2 [2]. Vue de dessus.	104
3.11	Schéma de conception du porte échantillon en mullite.	105
3.12	Vue schématique des chemins optiques dans une configuration de mesure d'émission [2,97]. Les échelles de longueur ne sont pas respectées.	106
3.13	Evolution de la température affichée par le pyromètre en fonction de la température de consigne du corps noir.	108
3.14	(a) Mesures d'émission du corps noir et (b) fonction d'appareil de la voie échantillon incluant la transmittance du hublot en CaF_2 . Le détecteur utilisé est le DTGS.	109
3.15	(a) Mesures d'émission du corps noir et (b) fonction d'appareil de la voie échantillon incluant la transmittance du hublot en CaF_2 . Le détecteur utilisé est le MCT.	110
3.16	Emission d'une céramique Quartzel chauffée symétriquement.	111
3.17	Luminance d'une céramique Quartzel chauffée symétriquement pour différentes puissances de chauffage laser : (a) 30 W, (b) 40 W et (c) 49 W. Les courbes en pointillés noirs représentent $L_{\eta} \pm \Delta L_{\eta}$	112
3.18	Facteur d'émission d'une céramique Quartzel chauffée symétriquement pour différentes puissances de chauffage laser : (a) 30 W, (b) 40 W et (c) 49 W. Les courbes en pointillés noirs représentent $F_{\eta} \pm \Delta F_{\eta}$	115
3.19	Chauffage face arrière.	116
3.20	Chauffage face avant.	116

3.21	Comparaison des luminances émises par la céramique Quartzel en configuration de chauffage symétrique, avant et arrière. La puissance en sortie de cavité laser est 49 W.	117
4.1	Stratégie d'inversion basée sur les méthodes Monte Carlo Symbolique.	124
4.2	Schéma de la configuration étudiée.	125
4.3	Représentation graphique des coefficients $\overline{a_{j,k}}$ et $\overline{b_{j,k}}$	128
4.4	Iso-lignes de (a) T_η et (b) R_η dans l'espace κ_η et σ'_η . Un seul calcul MCS a permis de générer toutes les courbes en trait plein tandis que chaque croix a été obtenue par un calcul MCC pour chacun des couples $(\kappa_\eta; \sigma'_\eta)$	130
4.5	Spectres moyens de (a) transmittance et de (b) réflectance d'un échantillon de feutre Quartzel. La bande spectrale grisée correspond à la bande d'absorption du CO_2 entre $\eta \simeq 2220 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,5 \mu\text{m}$) et $\eta \simeq 2400 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,17 \mu\text{m}$).	130
4.6	Solutions possibles κ_η et σ'_η à (a) $\eta = 900 \text{ cm}^{-1}$ et (b) $\eta = 1188 \text{ cm}^{-1}$ en prenant en compte les incertitudes expérimentales et l'écart-type de Monte Carlo dans l'analyse du problème inverse.	131
4.7	Sensibilités de la transmittance et de la réflectance aux coefficients d'absorption et de diffusion réduit.	134
4.8	(a) Déterminant et (b) conditionnement de la matrice d'information dans l'espace des paramètres κ_η et σ'_η	135
4.9	Algorithme d'identification des propriétés radiatives.	135
4.10	Coefficients (a) d'absorption et (b) de diffusion réduit identifiés à température ambiante en utilisant les polynômes obtenus par MCS. Les bandes grises ($\eta \in [950 \text{ cm}^{-1}; 1245 \text{ cm}^{-1}]$ et $\eta \in [660 \text{ cm}^{-1}; 870 \text{ cm}^{-1}]$) correspondent aux zones spectrales où l'identification n'est pas possible.	136
4.11	(a-b) Comparaison des spectres de transmittance et de réflectance après inversion et (c) probabilité arbitraire idéale après identification des propriétés radiatives.	137
4.12	Sensibilités de (a) la transmittance et de la (b) réflectance aux coefficients d'absorption et de diffusion réduit ; et (c) conditionnement de la matrice d'information après identification des propriétés radiatives.	138
4.13	Iso-lignes de (a) $\frac{s(T_\eta)}{T_\eta}$, (b) $\frac{s(R_\eta)}{R_\eta}$ et (c) P_s dans l'espace κ_η et σ'_η	139
4.14	Ecart-type relatif MCS de (a) la transmittance et de (b) la réflectance après identification des propriétés radiatives.	140
4.15	Coefficients (a) d'absorption et (b) de diffusion identifiés en utilisant les polynômes obtenus par MCS pour différentes valeurs de \tilde{P}_s	141
4.16	Ecart-type relatif MCS de (a) la transmittance et de (b) la réflectance, et (c) probabilité idéale de diffusion après identification des propriétés radiatives pour différentes valeurs de \tilde{P}_s	142
4.17	Coefficients (a) d'absorption et (b) de diffusion identifiés en utilisant les polynômes obtenus par MCS pour différentes valeurs de $\hat{\beta}$	143
4.18	Ecart-type relatif MCS de (a) la transmittance et de la (b) réflectance, et (c) probabilité idéale de diffusion après identification des propriétés radiatives pour différentes valeurs de $\hat{\beta}$	144
5.1	Schéma du cas étudié. Le milieu homogène est absorbant, émettant et diffusant. La luminance est calculée au point \mathbf{x}_0 dans la direction \mathbf{u}_0 correspondant au centre de la surface $x = L_x$ ayant \mathbf{n} comme normale. L'angle θ considéré est de 30°	148
5.2	Iso-lignes du facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$	149
5.3	Iso-lignes des sensibilités du facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$	151
5.4	Iso-valeurs du facteur d'émission dans l'espace $\mathfrak{R}(m_\eta) - \mathfrak{I}(m_\eta)$. L'axe $\mathfrak{I}(m_\eta)$ est représenté en échelle logarithmique.	154
5.5	(a) Transmittance directionnelle-hémisphérique simulée et (b) facteur d'émission mesuré (chapitre 3) d'une céramique Quartzel portée à haute température.	161
5.6	Iso-valeurs de (a) la transmittance directionnelle-hémisphérique et du (b) facteur d'émission dans l'espace $\kappa_\eta - \sigma'_\eta$	161
5.7	Identifiabilité de κ_η et de σ'_η à partir de mesures d'émission et de transmittance à haute température. Lorsque $T_\eta \leq U(T_\eta)$, seule l'iso-surface correspondant à l'intervalle $[U(T_\eta); T_\eta + U(T_\eta)]$ est représentée, l'iso-surface de l'intervalle $[0; U(T_\eta)]$ n'admettant pas de borne supérieure.	162

5.8	Exemple de spectres de (a) κ_η et de (b) σ'_η identifiés à partir d'une pseudo-mesure de transmittance et d'une mesure de luminance émise à 1148°C. La bande spectrale grisée correspond à la bande d'absorption du CO ₂ entre $\eta \simeq 2220 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,5 \mu\text{m}$) et $\eta \simeq 2400 \text{ cm}^{-1}$ ($\lambda \simeq 4,17 \mu\text{m}$). Dans les autres bandes spectrales grisées, l'identification n'est pas possible. Les courbes en pointillés noirs correspondent représente $\kappa_\eta \pm \Delta\kappa_\eta$ et $\sigma'_\eta \pm \Delta\sigma'_\eta$	163
B.1	Schéma de principe d'un interféromètre de Michelson	183
B.2	Principe de la mesure à base de transformée de Fourier	186
B.3	Vue schématique du spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) Bruker IFS-66v/S [97]	186
C.1	100 mesures (a) de transmittance et (b) de réflectance d'un feutre faible densité.	191
C.2	(a) Fonction d'appareil de la voie échantillon et (b) incertitude type calculée à partir de l'équation C.5.	192
C.3	Contribution des incertitudes individuelles sur l'estimation de l'incertitude-type de la fonction d'appareil : (a) transmittance du hublot CaF ₂ , (b) signal corps noir et (c) température du corps noir.	193
C.4	(a) Incertitude absolue $\Delta S_{\eta, \text{TCN}}$ et (b) incertitude relative $\frac{\Delta S_{\eta, \text{TCN}}}{S_{\eta, \text{TCN}}}$ du signal brut fourni par le détecteur DTGS.	193
C.5	Fonction d'appareil moyenne et incertitude-type associée.	195
C.6	Luminance émise par les échantillons de céramique Quartzel à différentes puissances de chauffage laser.	195
C.7	Température de surface de la face avant déterminée par pyrométrie au point de Christiansen $\eta_{\text{Ch}} = 1244 \pm 31 \text{ cm}^{-1}$ et incertitude-type associée.	196

Liste des tableaux

2.1	Ecarts relatifs entre π et son estimation par Monte Carlo.	44
2.2	Intervalles de confiance de la loi normale.	46
2.3	Ecarts relatifs entre l'intégrale de Dirichlet et son estimation par Monte Carlo.	46
2.4	Mesure p et coefficient normatif h_n de différentes familles de polynômes orthogonaux	87
2.5	Résumé des différentes formes polynomiales obtenues.	91
3.1	Température de surface de la face avant au nombre d'onde de Christiansen $\eta = 1244 \text{ cm}^{-1}$. Configuration chauffage symétrique.	113



FOLIO ADMINISTRATIF

THESE DE L'UNIVERSITE DE LYON OPEREE AU SEIN DE L'INSA LYON

NOM : MAANANE	DATE de SOUTENANCE : 12/11/2020
Prénom : Yassine	
TITRE : IDENTIFICATION EXPERIMENTALE DE PROPRIETES RADIATIVES A PARTIR DE METHODES MONTE CARLO SYMBOLIQUE : APPLICATION A DES MATERIAUX HETEROGENES A HAUTE TEMPERATURE.	
Nature : Doctorat	Numéro d'ordre : 2020LYSEI093
Ecole doctorale : MEGA (Mécanique – Energétique – Génie civil – Acoustique)	
Spécialité : Thermique, énergétique	
<p>RESUME : Ce travail s'inscrit dans le cadre de l'étude des transferts de chaleur par rayonnement dans des matériaux hétérogènes utilisés dans des applications haute température, comme la sécurité incendie dans le bâtiment, l'isolation de fours ou la protection thermique dans l'aérospatial. Ces matériaux hétérogènes en structure et/ou en composition s'avèrent être des milieux semi-transparents qui absorbent et qui diffusent le rayonnement thermique, et leurs propriétés radiatives à haute température sont souvent inconnues. Afin de modéliser avec précision le rayonnement au sein de ces matériaux et de quantifier la part du rayonnement par rapport aux autres modes de transferts de chaleur, il est nécessaire de déterminer leurs propriétés radiatives d'absorption et de diffusion. Dans le cadre de cette thèse, ces propriétés sont identifiées par méthode inverse à partir de modèles de rayonnement et de mesures spectrométriques. L'identification expérimentale permet d'accéder aux propriétés radiatives dans des conditions de température proches des conditions d'utilisation du matériau d'intérêt. Pour mener à bien l'analyse du problème inverse, nous proposons et développons ici une méthodologie se basant sur des méthodes Monte Carlo Symbolique (MCS). Celles-ci permettent d'exprimer les flux radiatifs sous la forme d'une fonction simple de paramètres dits symboliques. Un seul calcul permet ainsi d'exprimer les flux sur tout l'espace des paramètres, ce qui s'avère très utile dans une démarche d'inversion. Ces méthodes sont particulièrement adaptées pour exprimer des grandeurs radiatives en fonction de la température, du coefficient d'absorption et du coefficient de diffusion. Dans cette thèse, nous proposons une nouvelle méthode symbolique basée sur un développement en séries de polynômes orthogonaux, permettant d'étendre la méthode MCS à d'autres types de paramètres (géométriques, fonction de phase, etc.). Les expressions de flux radiatif en fonction des propriétés radiatives obtenues par MCS permettent de déterminer si le problème inverse est bien-posé et d'identifier rapidement les propriétés radiatives, tout en prenant en compte les incertitudes expérimentales et numériques. D'autre part, dans le cas où le problème inverse est mal-posé, l'outil proposé permet d'analyser l'apport d'informations supplémentaires par d'autres modèles ou d'autres types de mesures pour l'identification. Dans cette thèse, nous appliquons cette méthodologie à l'identification des propriétés radiatives du Quartzel, famille de matériaux hétérogènes constitués de fibres de Quartz.</p>	
MOTS-CLÉS : émission infrarouge, transferts radiatifs, propriétés radiatives, méthodes inverses, identification expérimentale, méthodes Monte Carlo Symbolique, matériaux hétérogènes, haute température.	
Laboratoire de recherche : CETHIL UMR5008 (Centre d'Energétique et de Thermique de Lyon)	
Directrice de thèse : Agnès DELMAS	
Président de jury :	
Le Niliot, Christophe	Professeur (Aix-Marseille Université, IUSTI) Examineur
Composition du jury :	
De Sousa Meneses, Domingos	Professeur (Université d'Orléans, CEMHTI) Rapporteur
Enguehard, Franck	Professeur (Université de Poitiers, Institut Pprime ENSMA) Rapporteur
El Hafi, Mouna	Professeure (IMT Mines Albi Carmaux, Rapsodee) Examinatrice
Delmas, Agnès	Maître de Conférences HDR (INSA Lyon, CETHIL) Directrice de thèse
Roger, Maxime	Maître de Conférences (INSA Lyon, CETHIL) Co-directeur de thèse
Galtier, Mathieu	Maître de Conférences (INSA Lyon, CETHIL) Invité
Dhima, Dhionis	Expert Scientifique Feu (CSTB) Invité