

# **THESE**

**pour l'obtention du Grade de  
Docteur de l'Université de POITIERS**

(E.N.S.M.A. et FACULTE DES SCIENCES FONDAMENTALES ET APPLIQUEES)

(Diplôme National - Arrêté du 25 Avril 2002)

**Ecole Doctorale Sciences pour l'Ingénieur  
Secteur de Recherche : Energie, Thermique, Combustion**

**Présentée par :**

**Cherkaoui ROUDANI**

\*\*\*\*\*

**Modélisation à l'échelle microscopique des  
transferts thermiques radiatifs en milieu poreux**

\*\*\*\*\*

**Directeurs de Thèse :**

**Valéri MOURZENKO et Jean-François THOVERT**

\*\*\*\*\*

**Soutenance prévue le 5 Juin 2008**

**devant la Commission d'Examen**

\*\*\*\*\*

**– Jury –**

**Mr P.M. ADLER, Directeur de Recherche CNRS, Paris**

**Rapporteur**

**Mme M. El HAFI, Professeur, ENSTIMAC, Albi**

**Rapporteur**

**Mr V. MOURZENKO, Chargé de Recherche CNRS, Poitiers**

**Mr B. ROUSSEAU, Chargé de Recherche CNRS, Orléans**

**Mr J.-F. THOVERT, Directeur de Recherche CNRS, Poitiers**

# Sommaire

---

Sommaire	v
<b>PART 1</b>	
<b>Généralités</b>	<b>1</b>
<b>1 Introduction générale</b>	<b>2</b>
1.1 Présentation, Objectifs	2
1.2 Organisation du mémoire	3
<b>2 Objectifs, position du problème</b>	<b>6</b>
2.1 Introduction	6
2.2 Le modèle numérique existant de smoldering	9
2.2.1 Mécanismes pris en comptes	9
2.2.2 Modèle et représentation géométrique	13
2.2.3 Conduite des simulations	14
2.2.4 Exemples de résultats	16
2.3 Conclusion	19
<b>3 Transferts radiatifs. Aspects théoriques</b>	<b>20</b>
3.1 Introduction aux transferts radiatifs	20
3.2 Généralités sur les transferts radiatifs	21
3.2.1 Grandeurs descriptives du rayonnement thermique	23
3.2.2 Absorption, émission et diffusion dans un milieu Semi-Transparent	24
3.2.3 Équation de Transferts Radiatif monochromatique	27
3.2.4 Emission Volumique	27
3.3 Traitement des conditions aux limites radiatives	28
3.4 Conclusion	29
<b>4 Transferts radiatifs en milieux poreux</b>	<b>30</b>
4.1 Forme d'une description macroscopique	31
4.2 Approximation de Rosseland	33
4.3 Traitement de l'équation de transfert radiatif	34
4.3.1 Méthodes	34

4.3.2	Applications	36
	<b>Conclusion</b>	<b>40</b>
	<b>PART 2</b>	
	<b>Développement des outils numériques</b>	<b>41</b>
<b>5</b>	<b>Principe de la méthode de simulation</b>	<b>43</b>
5.1	Introduction	43
5.2	Support géométrique et distribution des propriétés	44
5.3	Emission	45
5.3.1	Emission surfacique	45
5.3.2	Emission volumique	46
5.4	Propagation	48
5.4.1	Traversée d'un élément de volume, Absorption	48
5.4.2	Passage des interfaces, Réfraction	49
5.5	Assemblage, choix des paramètres numériques	51
<b>6</b>	<b>Gestion de la simulation</b>	<b>53</b>
6.1	Pas de temps et quantum fixes	54
6.2	Paramètres adaptatifs	56
6.3	Méthode quasi continue	57
<b>7</b>	<b>Validations, Applications dans des situations simples</b>	<b>60</b>
7.1	Paramètres de discrétisation	60
7.1.1	Discrétisation spatiale	60
7.1.2	Bruit thermique	64
7.2	Applications dans quelques cas simples	66
7.2.1	Lame semi-transparente	66
7.2.2	Sphère	67
<b>8</b>	<b>Lois de Snell-Descartes et de Fresnel généralisées</b>	<b>74</b>
8.1	Introduction	74
8.2	Généralités	75
8.2.1	Equations de Maxwell	75
8.2.2	Conditions limites	76
8.2.3	Flux d'énergie électromagnétique	76
8.2.4	Ondes harmoniques planes	77
8.3	Les Lois de Snell-Descartes	80
8.3.1	Les propriétés de la réflexion d'une onde électromagnétique	81
8.3.2	Les propriétés de la réfraction d'une onde électromagnétique	83
8.3.3	La réciprocité entre une onde incidente et une onde transmise	84

8.4	Les Lois de Fresnel	84
8.5	Bilan d'énergie	87
8.5.1	La polarisation PE	87
8.5.2	La polarisation PM	90
8.5.3	Transmission de l'énergie	91
8.6	Exemples de l'application des règles de transmission	92
8.6.1	Direction de l'onde transmise	93
8.6.2	Intensité de l'interférence entre les ondes incidentes et réfléchies	94
8.6.3	La transmittivité angulaire d'une onde homogène et hétérogène dans un milieu absorbant	96
8.6.4	La direction du vecteur de Poynting	99
8.7	La Transmission des ondes et l'équilibre thermique	100
8.7.1	L'équation du transfert radiatif à l'équilibre	100
8.7.2	Milieu non absorbant	105
8.7.3	Milieu absorbant	106
8.7.4	La transmittivité hémisphérique	107
8.8	Conclusions finales concernant le modèle numérique	108
	<b>Conclusion</b>	<b>110</b>
	 <b>PART 3</b>	
	<b>Applications</b>	<b>111</b>
<b>9</b>	<b>Cadre de l'étude</b>	<b>113</b>
9.1	Situation de référence	113
9.2	Quelques éléments techniques concernant les simulations	117
9.2.1	Déroulement d'une simulation type	117
9.2.2	Prise en compte de la conduction	120
9.3	Plage de paramètres explorés	121
9.4	Résultats théoriques dans deux situations simples	124
9.4.1	Milieu continu	124
9.4.2	Milieu alvéolaire	126
<b>10</b>	<b>Transferts radiatifs dans le milieu granulaire : phénoménologie</b>	<b>129</b>
10.1	Introduction	129
10.2	Galerie de résultats	135
<b>11</b>	<b>Transferts radiatifs dans le milieu granulaire : analyse quantitative</b>	<b>141</b>
11.1	Introduction	141
11.2	Première approche : fit global des profils de température	142
11.3	Deuxième approche : analyse locale	146

<b>12 Transferts radiatifs dans les milieux reconstruits</b>	<b>150</b>
12.1 Description des milieux reconstruits	150
12.1.1 Principe de la reconstruction	150
12.1.2 Application	151
12.2 Résultats : Phénoménologie	155
12.2.1 Comparaison Milieu reconstruit/empilement	155
12.2.2 Galerie de résultats.	157
12.3 Analyse quantitative	169
<b>Conclusion</b>	<b>172</b>
<b>Références</b>	<b>174</b>
<b>A Appendice au Chapitre 8</b>	<b>177</b>
A.1 Une onde incidente à partir d'un milieu non absorbant	177
A.2 La vérification du bilan de l'énergie	178
A.2.1 Ondes polarisées en PE-mode	178
A.2.2 Ondes polarisées en PM-mode	179
A.3 Procédure d'évaluation des paramètres de transmission et les ondes réfléchies	180
A.4 La réflectivité et l'intensité des interférences	181
A.4.1 La polarisation PE	181
A.4.2 La polarisation PM	181
A.5 Les relations entre deux systèmes d'angles	182
A.6 Le vecteur de Poynting	183

PART 1

---

GÉNÉRALITÉS

# Chapitre 1

---

## Introduction générale

### 1.1 Présentation, Objectifs

Ce travail porte sur la caractérisation de l'incidence des échanges radiatifs sur les propriétés de transport thermiques des milieux poreux. Une des premières motivations concerne une situation rencontrée dans d'autres travaux de l'équipe d'accueil, la combustion en lit fixe de combustibles solides, et plus particulièrement de schistes bitumineux. De puissants outils de simulation ont été mis en place, qui opèrent à l'échelle microscopique, en trois dimensions, et qui prennent en compte de façon détaillée les processus de transport par convection, diffusion et conduction de la chaleur et des espèces chimiques, ainsi que leurs couplages locaux avec les mécanismes de réaction (Debenest , 2003, Elayeb , 2008). Toutefois, les transferts radiatifs ne sont pas explicitement inclus dans le modèle, qui suppose qu'ils n'introduisent qu'un éventuel surcroît d'échanges entre des grains voisins, qui sont la plupart du temps déjà en contact mécanique et donc thermique par conduction. L'hypothèse du caractère mineur et local de ces échanges n'est toutefois pas assise sur une véritable quantification de leurs caractéristiques. Le premier objectif de ce travail est donc d'aborder directement ces questions, de déterminer si et dans quelles circonstances le rayonnement contribue significativement, et dans ce cas de quantifier et modéliser cette contribution.

Cette application spécifique fournit une motivation initiale et un cas de référence qui est utilisé ici pour délimiter une plage de paramètres à explorer. Toutefois, le problème traité est bien entendu d'un intérêt beaucoup plus général, et la formulation d'une description des échanges radiatifs en milieu poreux, ainsi que la détermination des coefficients effectifs qui les caractérisent sont d'un grand intérêt pratique dans nombre de situations.

Le travail comporte donc deux parties principales. Dans la première, on tente de mettre en place un outil de simulation numérique des transferts thermiques radiatifs couplés à la conduction, en milieu poreux. Cet outil devrait à terme pouvoir être greffé sur le simulateur de la combustion en lit, ce qui lui impose certaines caractéristiques. La première est qu'on opère à l'échelle des pores, et non à une échelle où le milieu est homo-

générisé et muni de propriétés optiques effectives (dont la détermination est d'ailleurs l'un des objectifs des simulations microscopiques).<sup>1</sup> Une autre est que les simulations sont conduites en régime transitoire, puisque le processus de combustion en lit est essentiellement instationnaire. Par ailleurs, on cherche à être le plus général et détaillé possible, c'est à dire notamment en incluant le cas de solide semi-transparent, puisqu'il s'avère que les solides (majoritairement silice et/ou calcite) sont semi-transparentes dans une plage de longueurs d'onde dans le proche infrarouge.

Le caractère instationnaire de l'application visée et la complexité de la géométrie du domaine dans lequel elle prend lieu guident le choix de l'approche numérique. On utilise une méthode de simulation directe, par lancer de rayons, par pas de temps successifs. Au cours d'un pas de temps, chaque élément de surface ou de volume émet une quantité de "paquets", dont la trajectoire qui peut faire intervenir des réflexions et réfractions est suivie jusqu'à absorption ou sortie du domaine de simulation. Le bilan entre les énergies émises et absorbées pour chaque élément de volume pourrait être directement ajouté au bilan des mécanismes de transport thermiques déjà pris en compte dans le simulateur.

Sans être nécessairement la plus efficace numériquement pour un cas donné, cette approche présente une grande souplesse, notamment parce qu'elle ne requiert pas le pré-calcul de matrices d'interactions entre éléments, tâche écrasante dans un domaine étendu et de géométrie aléatoire, surtout si les matériaux sont semi-transparentes et qu'on ne peut pas se limiter aux éléments de surface. En quelque sorte, seule la partie "utile" de cette matrice est calculée en cours de simulation, celle qui concerne les éléments qui émettent le plus. La contrepartie de cette souplesse est le bruit, comme dans toute méthode de Monte Carlo. Un compromis doit être trouvé entre le coût et la finesse de la simulation, quantifiée par la taille des paquets. Plus ceux-ci sont petits, plus leur nombre augmente, ce qui réduit le bruit mais augmente le temps de calcul.

## 1.2 Organisation du mémoire

Le mémoire est scindé en trois grande parties.

La première regroupe des éléments généraux. On y reprend plus en détail l'exposé des objectifs poursuivis, et on en définit plus précisément le contexte. Le modèle existant pour la simulation du smoldering est rapidement décrit, notamment pour mettre en évidence certaines contraintes auxquelles les outils que nous développons doivent se plier. Le reste de cette partie est consacré à des rappels théoriques et à une revue bibliographique

<sup>1</sup> Il est à noter que les grains solides sont eux-mêmes des matériaux complexes, microporeux et multiconstituants. Cependant, il n'est pas dans notre objectif d'inclure cet aspect dans le modèle et ils sont considérés ici comme des matériaux homogènes équivalents. Dans le principe, les simulations qui sont conduites à l'échelle des grains pourraient être appliquées à l'échelle intragranulaire pour déterminer leurs propriétés optiques effectives. Toutefois, leur texture très fine, micronique ou submicronique, nécessiterait de sortir du cadre de l'optique géométrique où nous nous plaçons ici.

concernant les transferts radiatifs, avec un fort accent mis sur leur traitement en milieu poreux.

La seconde partie concerne le développement des outils de simulation numérique. Bien que le projet initial, dans toute sa généralité, n'ait pas entièrement abouti, en partie par manque de temps mais également du fait d'obstacles théoriques qui n'ont pas pu être surmontés, la plupart des éléments ont été mis en place. Du reste, les éléments manquants concernent des corrections à faire dans le cas où le caractère semi-transparent des matériaux doit être pris en compte, et on montre qu'ils sont généralement inutiles : soit les corrections auraient un effet négligeable, soient la prise en compte de la semi-transparence elle-même serait de peu d'utilité compte tenu de limitations en résolution spatiale.

A l'intérieur d'une boucle temporelle, où le champ de température est actualisé par pas de temps successifs, une émission est effectuée à partir de chaque élément de volume ou de surface, selon les cas, en fonction de la température locale selon la loi de Stefan-Boltzmann. Elle prend la forme d'un ensemble de paquets, porteurs de quanta d'énergie. Ces paquets peuvent éventuellement être dotés de caractéristiques (longueur d'onde) différentes, suivant la loi de Planck. Des procédures ont été conçues pour gérer de façon adaptative le pas de temps et la taille des paquets en optimisant le niveau de bruit en fonction de l'état courant du système. Les trajectoires des paquets émis sont ensuite calculées, dans le cadre de l'optique géométrique. Une absorption peut survenir lors de la traversée de chaque élément de volume, de façon probabiliste en fonction du coefficient d'absorption local et de la longueur de la traversée. L'énergie correspondante est alors ajoutée au bilan pour cet élément qui détermine l'évolution de sa température. En l'état actuel, on opère dans une description géométrique du milieu par éléments de volumes cubiques, puisque c'est la représentation utilisée dans les autres modules du simulateur global. Néanmoins, le passage à un autre type de discrétisation, par exemple sous forme d'éléments tétraédriques, ne pose pas de problème de principe (même si quelques opérations très répétitives, telles le calcul du point de sortie d'un rayon qui pénètre dans un élément de volume, deviendraient plus complexes et donc plus coûteuses en temps de calcul). Les interfaces peuvent donner lieu à une réflexion ou à une transmission, selon les lois de Fresnel, et dans le second cas la réfraction est décrite par les lois de Snell-Descartes. Dans le cas où le matériau atteint est opaque, on peut aussi avoir absorption dans l'élément de volume correspondant.

Certains éléments nécessaires dans le cas général n'ont pas été incorporés. Les propriétés optiques effectives des matériaux solides, quand ils représentent en réalité des milieux hétérogènes à petite échelle, devraient inclure une diffusion, de même que les propriétés de leurs interfaces, pour rendre compte de la rugosité des surfaces réelles, quand il s'agit par exemple de schistes concassés. Ces deux points ne présentent pas de difficulté de principe, et pourraient être incorporés. Toutefois, il est apparu que pour les applications faites dans

la troisième partie de mémoire la prise en compte de la semi-transparence des matériaux était soit inutile soit illusoire, au vu de la finesse de la résolution spatiale. Nous avons donc laissé ces points de côté provisoirement, ainsi qu'un autre pour lequel nous avons rencontré un obstacle de nature plus fondamentale. En effet, les formulations standard des lois de Snell-Descartes et de Fresnel doivent être généralisées, pour les appliquer dans des milieux semi-transparentes, et nous n'avons pas pu aboutir à une formulation consistante.

Les situations considérées dans la suite du travail ne font pas intervenir les obstacles mentionnés précédemment. Un ensemble d'applications a été effectué, avec une version simplifiée du code de calcul, et ceci fait l'objet de la troisième partie du mémoire.

On considère ici que le solide est opaque, et se comporte comme un corps noir. Les simplifications que cela procure permettent de traiter des échantillons 3d de tailles respectables, en examinant divers types de microstructures et en explorant une plage étendue de paramètres. Ceci permet d'aborder notre second objectif initial. Outre la simulation directe du fonctionnement d'un réacteur ou d'autres cas spécifiques, l'approche microscopique permet de statuer sur la forme sous laquelle se manifeste à l'échelle macroscopique l'influence des transferts radiatifs, d'en quantifier les effets sous une forme applicable dans un modèle homogénéisé, et de déterminer les coefficients effectifs qu'elle fait intervenir en relation avec les paramètres microstructuraux du milieu poreux.

Pour délimiter un peu le domaine d'étude en se plaçant dans une plage de paramètres réaliste, nous sommes partis d'une situation inspirée de la combustion en lit des schistes bitumineux. Un milieu granulaire est placé dans un four à température imposée. Une source de chaleur est introduite à la surface d'un grain au voisinage du centre, qui simule le dégagement dû à la réaction exothermique de combustion. Par la suite, d'autres types de milieux poreux ont été considérés, mais en conservant ce dispositif. La chaleur est évacuée vers les parois du four par conduction dans le solide, et par rayonnement dans les pores. Nous cherchons à déterminer des coefficients applicables en régime permanent ou quasi-statique, mais la méthode de simulation ne permet d'atteindre ce régime qu'en simulant l'évolution du système jusqu'à stabilisation à partir d'un état initial arbitraire. Une fois cette stabilisation atteinte, l'analyse des champs de température et de flux permet de quantifier l'effet du rayonnement.

Il apparaît que sur une plage très étendue, elle se manifeste comme un surcroît de conductivité thermique apparente. Cette formulation est couramment employée, mais elle est validée ici par l'examen direct des processus à l'échelle locale, dans une variété de milieux poreux de géométries complexes et tridimensionnelles. En outre, les résultats permettent d'aboutir à une modélisation assez précise de ce surcroît de conductivité, en fonction de paramètres morphologiques simples, ce qui est bien sûr d'un grand intérêt pratique.

# Chapitre 2

---

## Objectifs, position du problème

### 2.1 Introduction

Ce travail porte sur l'impact des effets radiatifs dans le transfert d'énergie en milieux poreux. Sur un plan fondamental, on cherche bien sûr à obtenir des résultats généraux par exemple sous la forme de lois de comportements. Elles peuvent se baser sur des lois éventuellement heuristiques reliant les coefficients effectifs aux paramètres du milieu afin de rendre l'ensemble applicable dans le cadre le plus général possible. Pour ce faire, une approche numérique est utilisée, où l'on tente de mettre en place des outils de simulation assez généraux et opérant à la microéchelle, qui peuvent ensuite être appliqués pour des études paramétriques.

Toutefois, le travail a initialement été motivé par des besoins concrets pour une application particulière, concernant la combustion en lit fixe de schistes bitumineux. Cette application est rappelée en premier lieu, car elle permet de fixer les idées et elle fournit un cas de référence et une plage de paramètres réaliste dans laquelle se placer.

L'intérêt pour l'étude de la combustion de combustibles solides (pour la production d'énergie mais aussi pour l'incinération de déchets), avec des préoccupations d'optimisation en termes de rendement et de réduction des émissions d'espèces nocives se manifeste par exemple par la mise en place de l'ACI "Combustion en milieu poreux", à laquelle l'équipe a participé. Cette ACI a abordé le cas des schistes bitumineux sous trois angles, expérimentalement (ENSTIMAC, Albi), par simulations numériques macroscopiques (IMFT, Toulouse), et par simulations numériques détaillées à l'échelle microscopique (LCD, Poitiers).

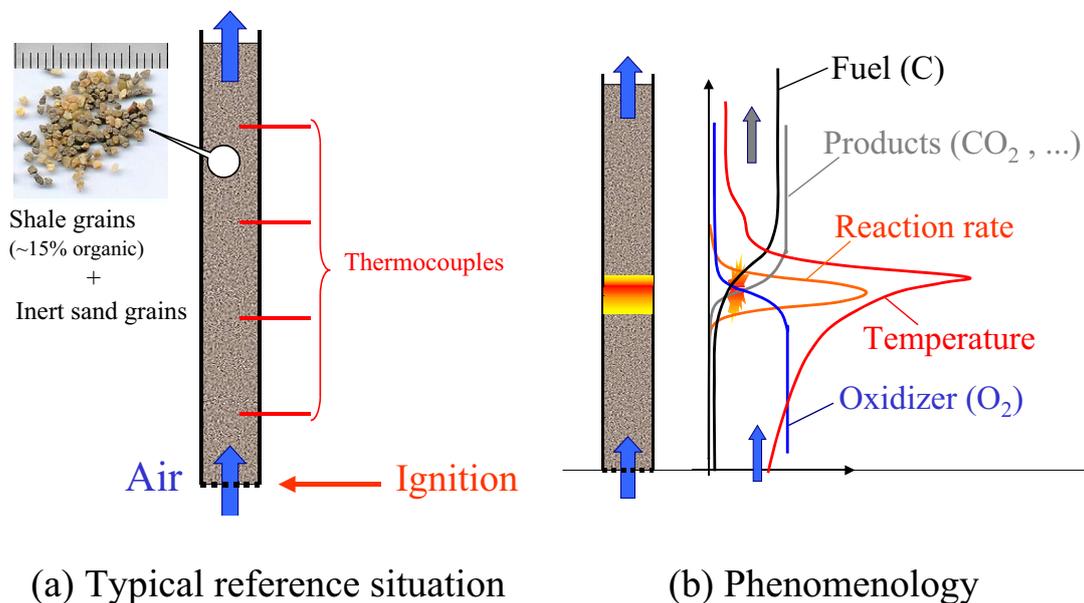
L'intérêt industriel pour les schistes bitumineux concerne l'exploitation de ces roches pour la production d'huile ou directement d'énergie. Il est stimulé par l'importance des réserves connues (réserves mondiales de 2.6 trillions de barils de pétrole potentiellement exploitables selon l'United States Energy Information Administration, ainsi que par le renchérissement des autres sources d'énergie fossiles. Outre la production d'énergie par combustion, la matière organique (kérogène) présente dans les schistes bitumineux est susceptible de permettre la production d'huile et de gaz via des processus pyrolytiques,

en vue d'une combustion ultérieure ou d'une utilisation en pétrochimie.

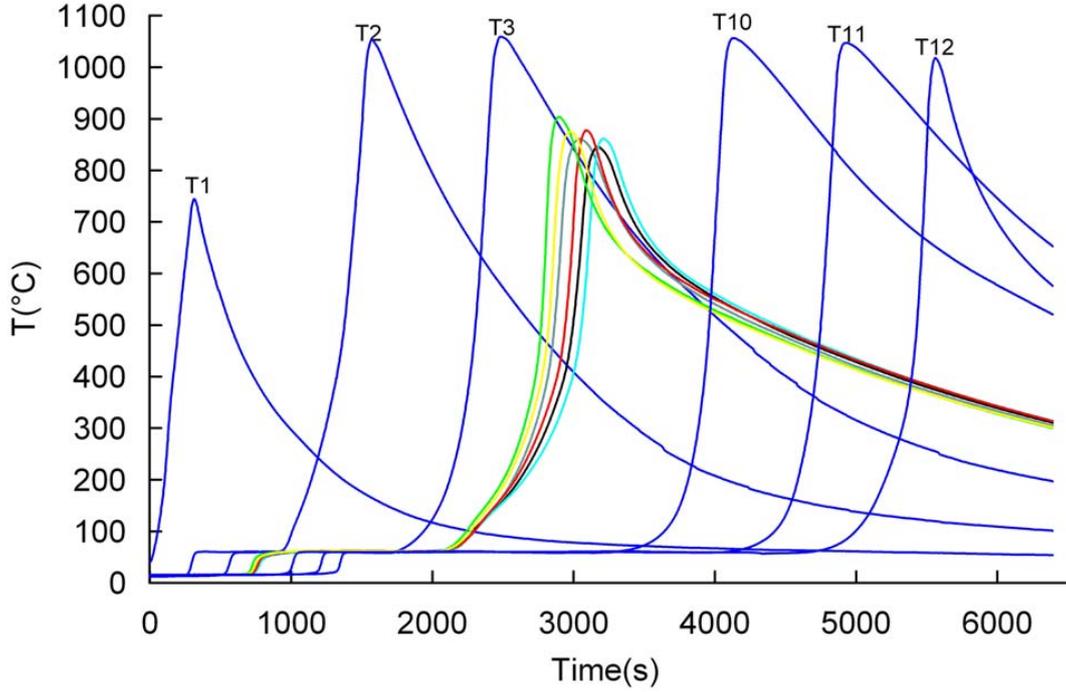
La figure 2.1 montre la situation typique de référence (a), et la phénoménologie des mécanismes dans le réacteur (b). Les grains de schistes sont déposés dans une colonne cylindrique, alimentée en air par le bas. L'allumage s'effectue en pied de colonne, puis un régime quasi-stationnaire est atteint assez rapidement. Un front d'oxydation se propage dans la direction de l'écoulement, où la température dépasse largement 1000K. En aval du front, l'élévation de la température cause la pyrolyse du kérogène. Des hydrocarbures légers se dégagent et sont emportés par l'écoulement, et un résidu carbonneux subsiste. C'est ce carbone qui est plus tard oxydé par l'oxygène en provenance du bas de la colonne, quand il est rejoint par le front. En amont du front (en bas), le combustible est épuisé, il ne subsiste que le substrat inerte.

La figure 2.2 présente des exemples de mesures de températures, au cours du temps, en différents thermocouples situés le long de la colonne (Martins et al. , 2008).

Le phénomène de smoldering (combustion sans flamme de solide) a fait l'objet de deux thèses récentes dans l'équipe, par Debenest (2003), et dans son prolongement, Elayeb (2008). Dans les deux cas, des simulations sont conduites à l'échelle des pores. Le modèle numérique est très détaillé et sera rapidement présenté plus loin (Section 2.2).



**Figure 2.1.** Situation de référence et phénoménologie des mécanismes dans le lit de grains de schiste.



**Figure 2.2.** Températures relevées en différents thermocouples, en fonction du temps. Les pics correspondent au passage du front d'oxydation. T4 à T9 sont placés près de la paroi transversal. Les autres thermocouples sont placés sur l'axe de la colonne. T1 a une réponse différente car il est très proche du pied de la colonne (Martins et al. , 2008).

Mentionnons simplement à ce stade qu'il ne prend pas en compte les transferts thermiques radiatifs, malgré les températures élevées qui peuvent être atteintes (supérieures à 1200K). Les raisons pour cela étaient de deux ordres : (i) l'absence d'outils de simulation ; (ii) la conviction mal étayée que ces transferts entre solides opaques ne se manifestaient qu'à courte portée, et ne modifiaient donc pas le comportement essentiellement conductif du lit de grains. Ceci conduit à l'approximation de Rosseland (voir Section 4.1), qui est couramment employée. Ainsi, dans des situations similaires, traitées d'un point de vue macroscopique, Whale et Matkowsky (2001) et Schult et al. (1995) ont effectivement inclus les transferts radiatifs sous la forme d'un surplus d'échange, en les intégrant dans un coefficient de conductivité thermique apparente

$$\lambda_{rad} = \lambda_r T^3 \quad (2.1)$$

Toutefois, le second point (ii) est potentiellement remis en question par le fait que la matière inerte des schistes (essentiellement silice et carbonates) peut être semi transparente dans une plage importante du proche infrarouge.

Les objectifs concrets initiaux de ce travail peuvent donc se résumer par les questions suivantes.

- Quelle est l'importance réelle de ces transferts ? Est-il nécessaire de les prendre en compte ?
- Quelle forme prennent-ils dans une vision macroscopique ?
- Comment en rendre compte dans des simulations numériques, aux échelles micro- et macroscopiques ?

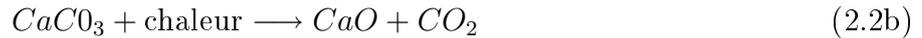
La réponse à ces questions passe par le développement et l'application d'un outil de simulation à l'échelle des pores, et par l'analyse de ses résultats.

Nous décrivons plus en détail dans la Section suivante le cadre dans lequel nous nous plaçons en pratique, c'est-à-dire d'une part les caractéristiques des constituants et du réacteur, et d'autre part les caractéristiques de l'outil de simulation, dans lequel notre apport doit à terme pouvoir se greffer, et qui constitue donc une sorte de cahier des charges.

## 2.2 Le modèle numérique existant de smoldering

### 2.2.1 Mécanismes pris en comptes

La composition chimique des schistes bitumineux est très complexe, souvent mal connue, et variable suivant leur origine. Les processus chimiques qui interviennent incluent beaucoup d'étapes et d'espèces différentes. Néanmoins, pour notre propos, une vision extrêmement simplifiée est suffisante, qui est du reste celle adoptée par Debenest (2003). Le schiste se compose initialement d'inerte (I) et de kérogène (K). On distinguera d'une part les réactions de type pyrolytique généralement endothermiques, craking et dévolatilisation des hydrocarbures, et éventuellement décarbonatation des inertes.



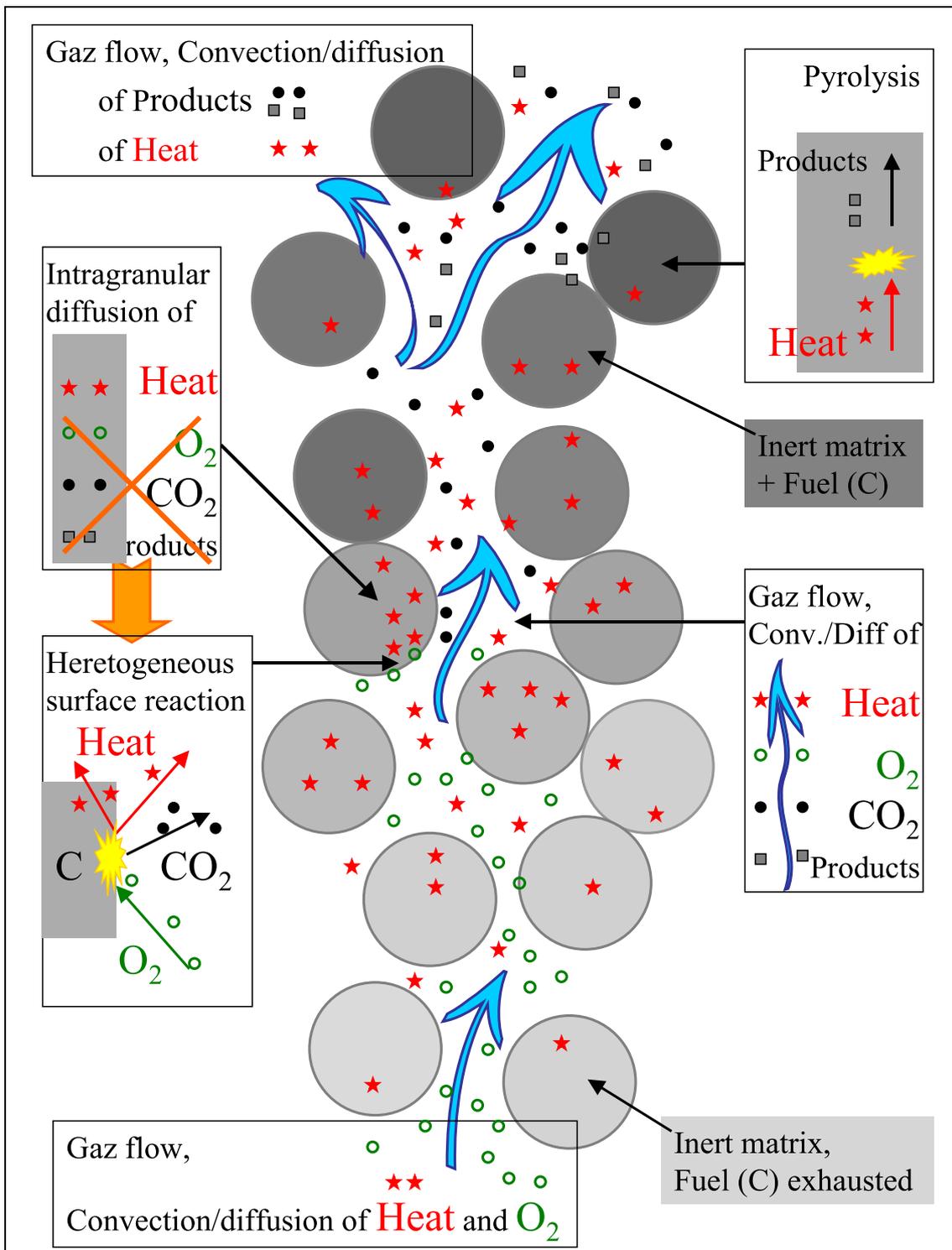
Du point de vue thermique, ces réactions se traduisent par des termes puits volumiques. C désigne le résidu carbonneux.

D'autre part, on résume toutes les réactions d'oxydation dans le schéma extrêmement simplifié



On considère la réaction comme surfacique, entre l'oxygène apporté par l'écoulement, et le carbone contenu dans les grains. Dans ce cas, la réaction exothermique introduit donc un terme source, à la surface des grains ( $\Delta h_c = 395 \text{ KJ/mol}$  à  $T = 1000 \text{ K}$ ). Il est à noter que Elayeb (2008) a enrichi le modèle d'un schéma réactionnel plus élaboré, qui fait notamment intervenir la production de monoxyde, mais cela est sans incidence pour nous.

Les cinétiques de ces réactions obéissent à des lois d'Arrhenius, et dépendent donc fortement de la température, en plus de la concentration en réactifs. Les taux de réactions



**Figure 2.3.** Zoom sur la microstructure du lit de grains, et illustration des mécanismes inclus dans la formulation microscopique du problème. Les symboles se réfèrent aux quantités transportées : chaleur (★), oxygène (○), dioxyde de carbone (●) et produits de pyrolyse (■).

s'écrivent sous la forme

$$r = A e^{-E/RT} \quad (2.4)$$

où  $E$  est l'énergie d'activation et  $R$  la constante des gaz parfaits. Ces taux de réactions sont évalués à partir des valeurs *locales* des concentrations et températures, qui résultent de la résolution des équations de transport des constituents et de la chaleur.

L'ensemble des mécanismes pris en compte est résumé dans la Figure 2.3. Le transport de masse fait intervenir la convection et la diffusion dans le gaz, ainsi que les termes puits/sources dûs aux réactions chimiques. Le champ de vitesse du gaz est calculé par une méthode de volumes finis, tandis qu'une technique de marche aléatoire est appliquée pour décrire le transport des espèces chimiques. Celles-ci sont représentées par un ensemble de marcheurs aléatoires, dont la trajectoire est construite par pas de temps successifs, en cumulant des déplacements déterministes (convection, proportionnels à la vitesse locale) et aléatoire (diffusion).

Pour être complet, les paramètres physicochimiques des constituents sont donnés dans la Table 2.1. La porosité du lit est  $\varepsilon \approx 0.4$  et il contient une fraction  $p_s$  de schistes, complétées par  $1 - p_s$  de grains inertes (sable).

Propriétés physiques du gaz				
Paramètres	Unités	T=300K	T=1000K	
$\rho_g$	kg m <sup>-3</sup>	1.16	0.348	Densité
$c_{pg}$	J g <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	1.01	1.14	capacité thermique
$C_g$	J m <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>	1170	397	capacité thermique
$\lambda_g$	W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	0.026	0.0707	conductivité thermique
$D_{Tg}$	m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>	2.2 10 <sup>-5</sup>	1.8 10 <sup>-4</sup>	coefficient de diffusion thermique
$D_O$	m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>	2.0 10 <sup>-5</sup>	2.0 10 <sup>-4</sup>	coefficient de diffusion de l'oxygène
Propriétés physiques du solide				
Paramètres	Unités	T=300K	T=1000K	
$\rho_s$	kg m <sup>-3</sup>	2700	2700	Densité
$c_{ps}$	J g <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	0.84	1.25	capacité thermique
$C_s$	J m <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>	2.27 10 <sup>6</sup>	3.375 10 <sup>6</sup>	capacité thermique
$\lambda_s$	W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	0.979	0.979	conductivité thermique
$D_{Ts}$	m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>	2.9 10 <sup>-7</sup>	2.9 10 <sup>-7</sup>	coefficient de diffusion thermique
Propriétés du schiste bitumineux				
$c_C$	mol/l	9.19	9.19	contenu en carbone dans le schiste
$c_C \Delta h_c$	GJ/m <sup>3</sup>	3.63	3.63	dégagement de chaleur volumique
$T_{ad}$	K	1076	1076	température adiabatique
quelques rapports intéressants				
paramètres	Unités	T=300K	T=1000K	
$C_s/C_g$	-	1940	8500	rapport des capacités thermiques
$\frac{C_s \sqrt{D_s}}{C_g \sqrt{D_g}}$	-	223	341	
$U_F/v^*$	-	7 10 <sup>-4</sup>	2 10 <sup>-4</sup>	vitesse du front / vitesse du gaz ( $p_S=1$ )
$U_F/v^*$	-	14 10 <sup>-4</sup>	4 10 <sup>-4</sup>	vitesse du front / vitesse du gaz ( $p_S=1/2$ )

**Table 2.1.** Constantes physiques des milieux solides et fluides, à la température ambiante et à 1000K, température typique de la zone de réaction, propriétés des schistes bitumineux et quelques rapports intéressants adimensionnels. Les valeurs de vitesse de front  $U_F$  dans les dernières lignes sont données en estimant que tout le carbone et l'oxygène sont consommés.

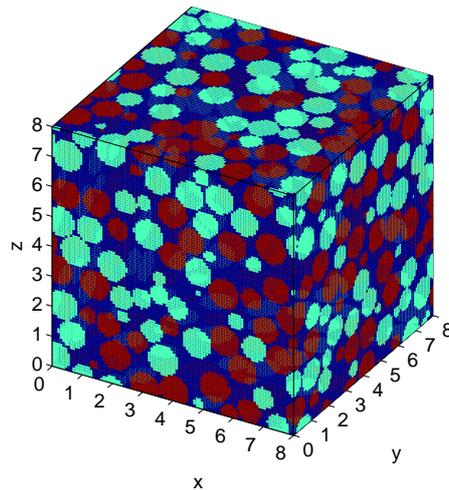
### 2.2.2 Modèle et représentation géométrique

Les simulations sont nécessairement conduites dans une représentation discrétisée de la géométrie du milieu poreux. Ici, la distribution spatiale des différentes phases est décrite par un tableau d'éléments cubiques, de taille  $a^3$ . Ce maillage sert également de support à tous les tableaux décrivant les champs de concentrations, température, propriétés, etc.

Pour des raisons de coût de calcul, on opère dans un domaine dont les dimensions transversales sont bien inférieures à celles du réacteur, en appliquant des conditions de périodicités dans ces directions. On suppose donc de ce fait qu'on se situe au coeur du réacteur, où les effets perturbateurs des parois ne sont pas perceptibles.

Debenest (2003) et Elayeb (2008) représentent la géométrie du milieu par des empilements aléatoires de grains sphériques obtenus par déposition séquentielle selon l'algorithme de Coelho et al. (1997). Par la suite, nous utiliserons entre autres des milieux du même types. Un exemple en est donné dans la Figure 2.4. Les dimensions transversales du domaine sont généralement de  $8\Phi$ , où  $\Phi$  est le diamètre des grains. Les travaux antérieurs de l'équipe (Coelho, 1996, Coelho et al., 1997) ont montré que cette dimension est suffisante pour fournir des valeurs représentatives des propriétés géométriques et des propriétés de transport de l'empilement. Dans la direction de propagation du front, le domaine est généralement beaucoup plus étendu, pour permettre l'établissement du régime stationnaire.

Dans ces applications, les grains sont de taille millimétrique ( $\Phi = 600\mu m$ ), et relativement finement discrétisés, avec  $\Phi/a = 8$  ou 12.



**Figure 2.4.** Un échantillon 3D de milieu poreux, sous la forme d'un empilement de sphères déposées aléatoirement. Les couleurs dénotent des matériaux solides de natures différentes (schistes et sables),

### 2.2.3 Conduite des simulations

Les simulations sont conduites en régime transitoire, depuis la période d'allumage, par pas de temps successifs  $\delta t_p$ .

Les espèces chimiques, telles que l'oxygène transporté par l'air en circulation, sont représentées par des particules browniennes. Chacune de ces particules représente un certain quantum de matière, i.e. un certain nombre de moles. Leur taille résulte d'un compromis entre le niveau de bruit statistique, qui s'améliore quand on utilise un plus grand nombre de particules plus petites, et le coût des calculs, qui augmente avec le nombre de particules dans le système.

Les trajectoires de ces particules sont explicitement suivies par pas de temps successifs qu'on note  $\delta t_p$ , au cours desquels elles subissent un déplacement  $\delta \mathbf{r}$ , comprenant une composante déterministe dû au champ de vitesse local du fluide convecteur et un déplacement aléatoire qui correspond à la diffusion (2.5).

$$\mathbf{r}(t + \delta t_p) = \mathbf{r}(t) + \delta \mathbf{r} = \mathbf{v}(\mathbf{r})\delta t_p + \delta_d \quad (2.5)$$

ou  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  est la vitesse du fluide convecteur à la position  $\mathbf{r}$  de la particule, et  $\delta_d$  est un déplacement d'orientation aléatoire dont l'amplitude est liée au coefficient de diffusion  $D$  des particules transportées :

$$\delta_d = \sqrt{6D\delta t_p} \quad (2.6)$$

Quand une particule rencontre une paroi solide, des conditions de rebonds sont appliquées, à moins qu'il ne s'agisse d'une paroi potentiellement réactive. Dans ce cas, la particule peut réagir (et disparaître) avec une probabilité qui est calculée à partir du taux de réaction attendu en fonction des concentrations et températures locales.

Les concentrations peuvent être évaluées par simple comptage des particules par élément de volumes. En pratique, un lissage temporel est utilisé pour stabiliser leurs valeurs.

Cette description lagrangienne du transport des espèces a l'avantage d'être conservative par construction, et de n'introduire aucune dispersion numérique. Il est à noter que la valeur du pas de temps  $\delta t_p$  est dictée par la contrainte que  $\delta \mathbf{r}$  doit rester inférieur à la résolution du maillage. En pratique, ceci conduit à des pas très brefs, de l'ordre de  $10^{-6}$ s.

Nous décrivons plus en détail le transport de la chaleur, puisque c'est à ce niveau que notre apport doit intervenir. Il fait intervenir à la fois la conduction dans le solide et la convection/diffusion dans le gaz, ainsi que des termes puits ou sources dû aux réactions chimiques. Le couplage des ses équations qui vont décrire le transport se fait en respectant les conditions de raccord et de continuité de flux à l'interface gaz/solide.

Dans les pores :

$$C_g \frac{\partial T_g}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{T,g} = S_P \quad (2.7a)$$

$$\mathbf{J}_{T,g} = C_g \mathbf{v} T_g - \lambda_g \nabla T_g \quad (2.7b)$$

Dans le solide :

$$C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_{T,s} = S_S \quad (2.8a)$$

$$\mathbf{J}_{T,s} = -\lambda_s \nabla T_s \quad (2.8b)$$

Aux interfaces :

$$T_g = T_S \quad (2.9a)$$

$$\mathbf{n}_I \cdot (\mathbf{J}_{T,g} - \mathbf{J}_{T,s}) = S_I \quad (2.9b)$$

où  $S_P$ ,  $S_S$  et  $S_I$  sont respectivement les termes sources dans l'espace des pores, dans le solide et à l'interface dûs aux réactions chimiques.  $C_i$  est la capacité thermique volumique  $\rho_i C_{p,i}$  de la phase  $i$  et  $\lambda_i$  sa conductivité thermique.  $\mathbf{n}_I$  est le vecteur unitaire normal à l'interface solide-fluide, orienté positivement du solide vers le fluide. On peut introduire les coefficient de diffusion thermiques

$$D_{T,s} = \frac{\lambda_s}{C_s}, \quad D_{T,g} = \frac{\lambda_g}{C_g} \quad (2.10)$$

Dans le cas de la réaction d'oxydation (2.3), le terme source pour la chaleur  $S_{T,I}$  est proportionnel au terme puits  $\mathbf{J}_0$  de l'oxygène,

$$S_{T,I} = \Delta h_c \mathbf{n}_I \cdot \mathbf{J}_0 \quad (2.11)$$

Le transport dans le gaz est simulé exactement de la même façon que pour les espèces chimiques, avec des particules qui représentent un certain quantum d'énergie, déplacées selon (2.5). Les termes sources dans (2.7a-2.9) sont traduits par l'insertion ou la suppression de particules. Toutefois, à la différence du transport de masse, des échanges sont possibles entre les phases solides. Pour satisfaire les conditions de raccord (2.9), les particules parvenant à l'interface gaz solide sont réémises dans l'une ou l'autre phase proportionnellement à leurs effusivités  $E = C_i \sqrt{D_{T,i}}$ .

La même technique est applicable dans le solide (où le terme convectif de (2.5) n'interviendrait pas), en principe mais pas en pratique dans le cas présent du fait de la capacité calorifique très supérieure,  $C_s \sim 10^4 C_g$ , qui imposerait un nombre prohibitif de particules. Une simple simulation par volume finis, au deuxième ordre en espace et au premier ordre explicite en temps est donc utilisée. Du fait de l'inertie thermique bien supérieure du solide, un pas de temps  $\Delta t \gg \delta t_p$  peut être utilisé.

Il en résulte donc une discrétisation temporelle à deux niveaux. Pour chaque volume de contrôle (correspondant aux cubes élémentaires du maillage, dans le gaz ou le solide), un bilan des flux thermiques entrants et sortants est effectué. Les apports par conduction

(solide) sont évalués avec la périodicité  $\Delta t$ . Ceux par convection et diffusion (gaz) ainsi que ceux résultants des réactions chimiques sont cumulés de façon quasi-continue, avec le pas de temps  $\delta t_p$ . A la fin de chaque période,  $\Delta t$  dans le solide ou  $\delta t_p$  dans le gaz, ce bilan est converti en variation de température, en le divisant par la capacité calorifique du volume concerné.

C'est dans ce cadre que doit s'inscrire notre prise en compte des transferts radiatifs. Ils doivent venir s'ajouter aux mécanismes déjà pris compte dans les bilans thermiques des éléments de volumes. Le travail effectué est donc "simplement" d'évaluer les bilans radiatifs pour chaque élément de volume, pendant la période correspondante. On verra dans la suite qu'on utilise pour cela à nouveau une méthode de Monte Carlo, où l'énergie échangée est représentée sous formes de "grains", qui se déplacent selon les lois de l'optique géométrique. Chaque élément émet en fonction des conditions locales et absorbe une partie de ce qu'il reçoit en provenance d'autres éléments. Le bilan radiatif souhaité est obtenu par simple comptage.

On voit clairement ici qu'aucune hypothèse n'est faite quant à la forme sous laquelle se manifesteront à la grande échelle les transferts radiatifs. On opère à l'échelle locale, en simulant les processus élémentaires d'émission, propagation et absorption.

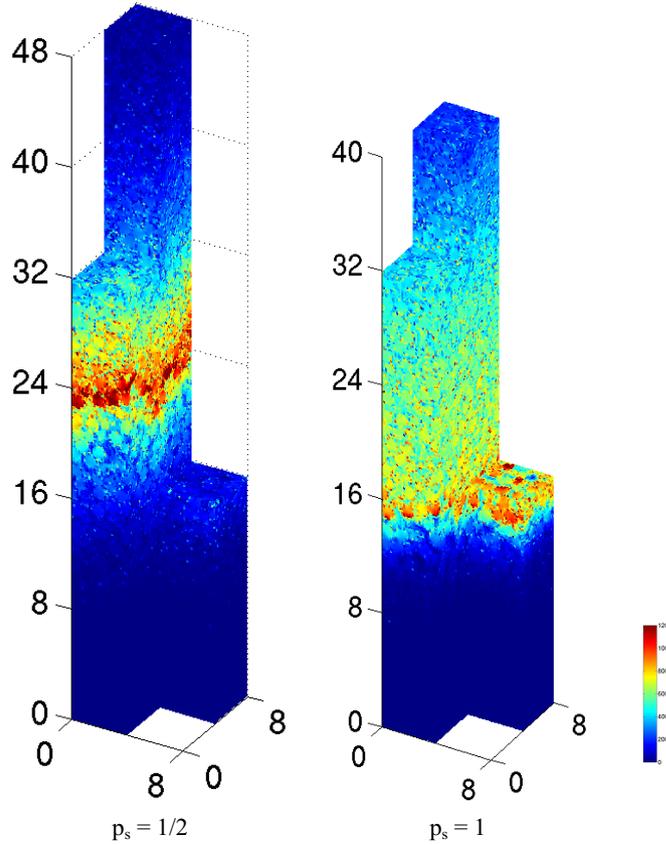
### 2.2.4 Exemples de résultats

Tous les exemples présentés ici proviennent de Debenest et al. , 2005a,b. Le premier (Fig. 2.5) illustre l'importance et le niveau de détail des simulations. Les champs de températures sont présentés, dans deux cas où le schiste bitumineux est mêlé avec une proportion égale de sable inerte ( $p_s = 1/2$ ) ou non ( $p_s = 1$ ). Toutes les distances sont mesurées en diamètres  $\Phi$  de grain. L'écoulement de l'air et la propagation du front d'oxydation s'effectuent du bas vers le haut. Des zones très chaudes et d'étendue limitée, dans le front de réaction, sont clairement visibles. Les températures y atteignent des valeurs qui laissent supposer que les effets radiatifs peuvent être significatifs.

Outre les simulations tridimensionnelles, Debenest et al. (2005b) ont considéré des cas 2d pour une exploration plus systématique des possibles régimes de fonctionnement. Ils résultent pour l'essentiel de deux nombres adimensionnel. Le nombre de Péclet

$$\text{Pe} = \frac{\Phi v^*}{D_O} \tag{2.12}$$

où  $v^*$  est la vitesse intersticielle moyenne du fluide et  $D_O$  le coefficient de diffusion de l'oxygène dans l'air, compare les temps caractéristiques de diffusion  $\Phi^2/D_O$  et de convection  $\Phi/v^*$  pour l'oxygène. Il est utilisé comme mesure adimensionnelle du débit de gaz, et c'est un paramètre de fonctionnement (dépendant des conditions opératoires, via



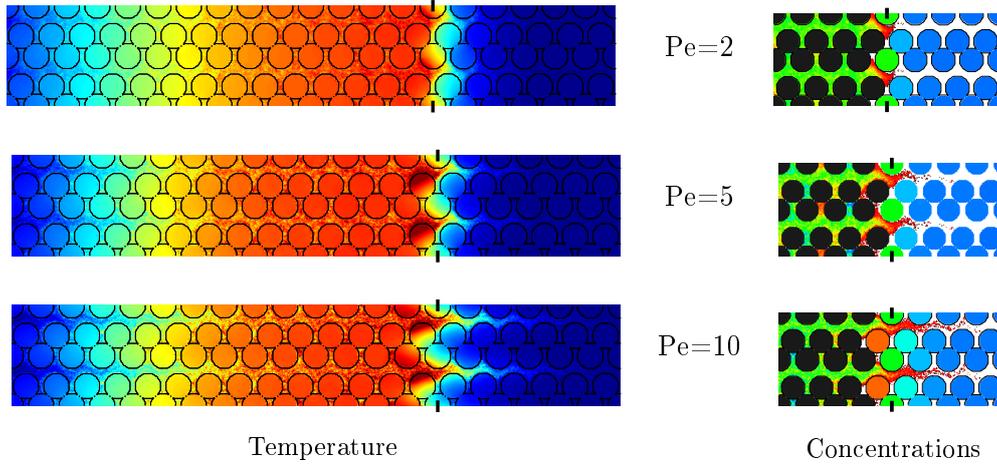
**Figure 2.5.** Champs de température dans la simulation du smoldering dans des empilements 3d de grains, avec 50% d’inerte ( $p_s = 1/2$ ) ou uniquement du schiste bitumineux  $p_s = 1$ , quand le front de réaction a atteint la position  $X_F = 26 \Phi$  ou  $17\Phi$ , respectivement.

le débit). En revanche, le nombre  $\Delta$

$$\Delta = \frac{\epsilon_g C_g v^*}{\widehat{C} U_F} = \frac{\epsilon_s C_g}{\widehat{C}} \frac{c_C}{c_O} \approx \frac{C_g}{C_s} \frac{c_C}{c_O} \quad (2.13)$$

ne dépend quant à lui que des caractéristiques et proportions des composants du système, tels que les capacités calorifiques volumiques  $C_g$ ,  $C_s$  et  $\widehat{C}$  du gaz, du solide et du milieu dans son ensemble, les fractions volumiques  $\epsilon_g$  et  $\epsilon_s$ , ou les concentrations en carbone dans le lit  $c_C$  et en oxygène dans l’air injecté  $c_O$ .  $V_F$  est la vitesse de propagation du front, mais  $v^*/V_F$  résulte en première approximation du rapport  $c_C/c_O$ , pour des raisons de stochiométrie.  $\Delta$  détermine notamment si la vitesse de transport de la chaleur est inférieure ou supérieure à la vitesse d’avancement du front, et quand il est proche de 1, on se trouve dans les conditions de superadiabaticité où les températures peuvent atteindre des niveaux très élevés.

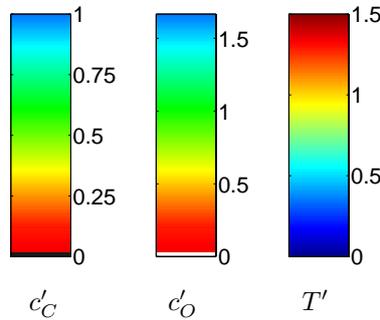
L’influence de  $Pe$  est illustrée dans la Figure 2.6, en le faisant varier à  $\Delta$  constant. On voit qu’il influence les niveaux de températures atteint, ainsi que l’étalement du front



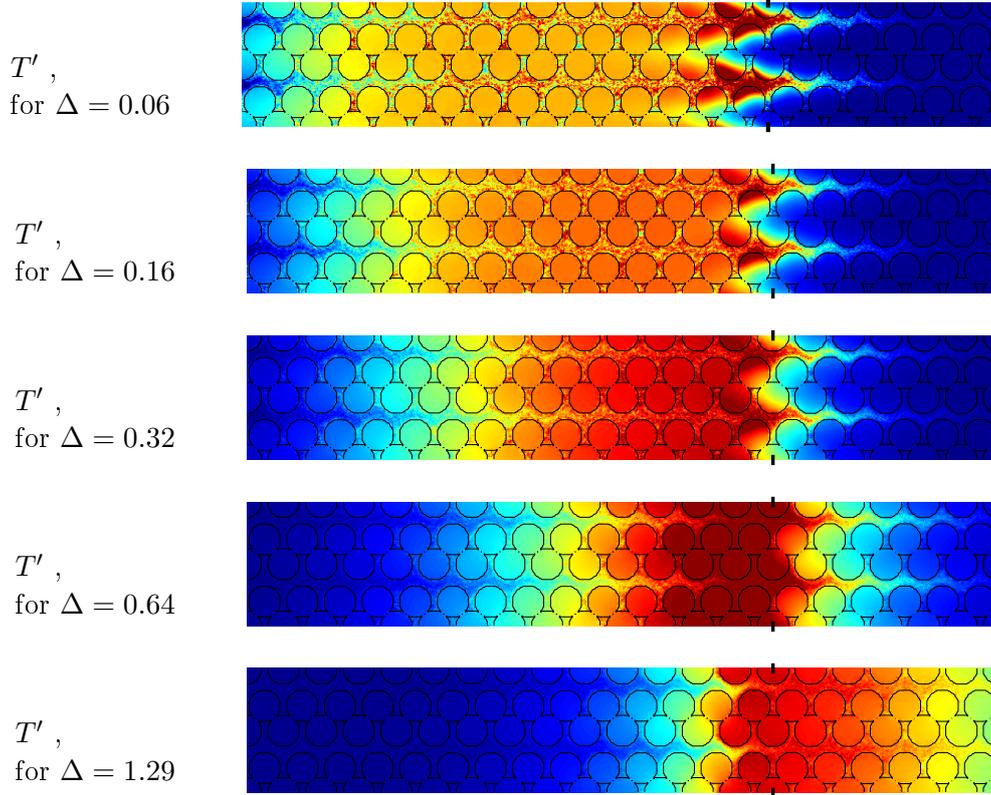
**Figure 2.6.** Champs de température (gauche) et de concentration (droite), pour  $\Delta = 0.2175$  et  $Pe_O = 2, 5$  et  $10$ . Les codes de couleur sont donnés dans la figure 2.7. La marque verticale dénote la position  $X_F$  du front.

de réaction et de la zone chaude. La vue de gauche est le champ de température, normé par la température adiabatique  $T_{ad}$ , celle de droite donne les concentrations en oxygène dans le gaz et de carbone dans le solide, normées par leurs valeurs initiales. Les échelles de couleurs sont définies dans la figure 2.7. Le front et l'écoulement se propagent de la gauche vers la droite.

La figure 2.8 illustre l'effet de  $\Delta$ , à  $Pe$  constant. On observe une bascule de la zone chaude de l'arrière vers l'avant du front, avec des températures plus élevées quand  $\Delta$  est de l'ordre de l'unité. On constate également que des situations d'équilibre thermique local peuvent exister ( $\Delta > 1$ ), mais que souvent, et dans les cas les plus réalistes où  $\Delta < 1$ , de forts déséquilibre apparaissent entre les deux phases solide et fluide.



**Figure 2.7.** Codes de couleur utilisés dans les figures 2.6 et 2.8. Les concentrations sont normées par leur valeur initiale. La température est normée par la température adiabatique  $T_{ad}$ .



**Figure 2.8.** Champs de température quand  $Pe_O = 10$  pour diverses valeurs de  $\Delta$ . Les codes de couleur sont donnés dans la figure 2.7. La marque verticale dénote la position  $X_F$  du front.

### 2.3 Conclusion

Ce chapitre introductif nous a permis de définir nos objectifs, d'en illustrer l'importance au vu des résultats de simulations antérieures, et d'en fixer le contexte et certaines contraintes d'ordre pratique, du fait de la façon dont les simulations sont conduites.

Dans les chapitres suivants de cette première partie générale, nous allons aborder plus en détail les transferts radiatifs, d'abord par l'introduction rapide de quelques éléments théoriques, puis par un examen plus spécifique de leur traitement dans les milieux poreux.

# Chapitre 3

---

## Transferts radiatifs. Aspects théoriques

### 3.1 Introduction aux transferts radiatifs

Lorsque deux systèmes sont à des températures différentes, le système le plus chaud cède de la chaleur au plus froid. Il y a échange thermique ou encore transfert thermique entre ces deux systèmes. Ce phénomène est omniprésent, et sur lui repose de nombreux procédés, utilisés aux plans industriels ou domestiques, dont l'optimisation est donc d'un immense intérêt.

Très souvent, les modes de transmission de chaleur prépondérants nécessitent un contact entre les deux systèmes (conduction) où le transport par de la matière (convection). Toutefois, nous sommes aussi familiers avec un autre mode de transmission, qui ne requiert pas de support matériel. On peut penser dans notre expérience quotidienne à la chaleur que nous procure un radiateur ou un feu de cheminée. Plus important encore, la chaleur du soleil qui atteint notre planète, alors qu'il n'y a aucun support solide, liquide ou gazeux au delà de l'atmosphère terrestre. Ceci signifie que l'énergie thermique peut traverser le vide.

Ce mode de transfert s'appelle le rayonnement. Il correspond à un flux d'ondes électromagnétiques émises par tout corps, quelle que soit sa température. Le rayonnement émis par un corps est d'autant plus élevé que sa température est grande. Comme pour la conduction, ce sont les interactions entre atomes et molécules qui sont à l'origine de ce rayonnement. Elles peuvent le générer, induisant une perte d'énergie, ou encore l'absorber, et absorber l'énergie correspondante.

De par sa nature, le rayonnement n'intervient que dans les milieux transparents (tels que le vide, ou en première approximation les gaz, le verre) ou semi-opaque (gaz + fumées, divers solides). Nous allons revenir sur ces interactions à l'échelle de l'onde pour mettre en lumière leur importance. Nous rencontrerons souvent deux grandeurs : la température et la chaleur.

La température  $T$  : C'est une mesure de la quantité d'énergie contenue dans les molécules d'une substance. C'est une mesure relative de la façon dont une substance chaude ou froide peut être employée pour prévoir la direction du transfert thermique.

La chaleur Q : La chaleur est une énergie en transit. Le transfert de l'énergie sous forme de chaleur se produit au niveau moléculaire en conséquence d'une différence de la température. La chaleur est capable d'être transmise par conduction (interactions des atomes ou des molécules d'une substance matérielle), par convection (par le mouvement macroscopique de matière) et par rayonnement, sous forme d'ondes électromagnétiques vecteur d'énergie dans l'espace vide.

Comme on le verra par la suite, le flux de chaleur dont la densité locale est notée  $\mathbf{q}_r$  est une grandeur vectorielle, caractérisée non seulement par son intensité mais aussi par sa direction. Il est défini en chaque point de l'espace et a pour dimension une densité surfacique de puissance ( $[W/m^2]$ ).

### 3.2 Généralités sur les transferts radiatifs

La physique du rayonnement peut être décrite selon deux modèles, ondulatoires (ondes électromagnétiques) ou corpusculaires (photons). Bien que l'émission d'énergie se produise toujours par paquets discrets, le premier point de vue permet plus simplement de décrire des phénomènes physiques tels que la réflexion, la réfraction ou la polarisation, grâce à sa formulation basée sur les équations de Maxwell dont résultent les lois de l'optique géométrique.

L'accélération d'une charge provoque l'émission d'un photon (Fig. 3.1), qui peut se voir comme un train d'onde, composée d'un champ électrique périodique  $\mathbf{E}$  et d'un champ magnétique  $\mathbf{H}$  associé. La façon dont s'orientent les deux vecteurs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  décrit ce qu'on appelle la polarisation (Thorsos, 1987, Sanchez-Gil et Nieto Vesperinas, 1992). La fréquence de l'onde est liée à l'énergie portée par le photon (ou par le train d'onde) par

$$E = h\nu \quad (3.1)$$

où  $h = 6.626075510^{-34}$  *Joule.s* est la constante de Planck.

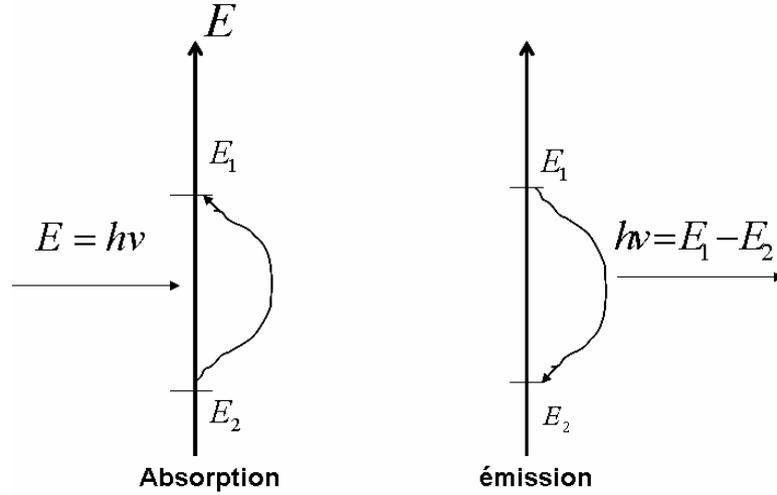
La distance moyenne  $l_m$  que peut parcourir un photon (ou train d'onde) dans un milieu sans être absorbé s'appelle le libre parcours moyen des photons. On mesure le pouvoir d'absorption du milieu par le coefficient d'absorption  $\kappa = 1/l_m$  ( $[m^{-1}]$ ), Il permet de classer des objets d'épaisseur  $l$  selon leur épaisseur optique  $\kappa l$  :

- Milieu Optiquement mince, lorsque  $l < l_m$ , i.e,  $\kappa l < 1$  ;
- Milieu optiquement épais, lorsque  $l > l_m$ , i.e,  $\kappa l > 1$ .

Si l'atténuation est quasiment complète lors de la traversée du milieu ( $\kappa l \gg 1$ ), on parle de milieu opaque. A l'inverse, si elle est très faible ( $\kappa l \ll 1$ ), on qualifie le milieu de transparent. Les cas intermédiaires sont qualifiés de semi-transparentes.

Les ondes électromagnétiques se propagent dans un milieu matériel à la vitesse  $c$  de la lumière pour ce milieu, liée à la vitesse  $c_0$  dans le vide par l'indice de réfraction  $n$ ,

$$c = \frac{c_0}{n} \quad (3.2)$$



**Figure 3.1.** Le mécanisme des phénomènes d'absorption et d'émission. Le changement de niveau d'énergie de l'électron correspond à l'énergie  $E$  portée par le photon (3.1).

Ainsi, on peut associer à une onde quatre quantités

- La fréquence,  $\nu$  ( $[\text{s}^{-1}]$ , ou Hz)
- La longueur d'onde,  $\lambda$  ( $[\text{m}]$ )
- Le nombre d'onde,  $\eta$  ( $[\text{m}^{-1}]$ )
- La pulsation  $\omega$  ( $[\text{s}^{-1}]$ )

qui sont liées entre elles par les relations

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{c}{\lambda} = c\eta \quad (3.3)$$

La combinaison de l'indice de réfraction et du coefficient d'absorption permet d'introduire l'indice complexe d'un milieu,

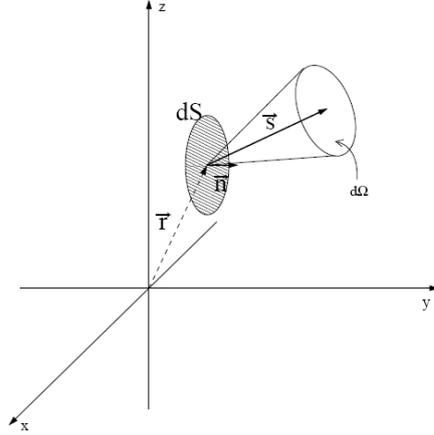
$$n_\nu^* = n_\nu + jk_\nu \quad (3.4)$$

dont la partie imaginaire est appelée l'indice d'extinction. Il est lié au coefficient d'absorption par (Siegel et Howell , 1992) :

$$k_\nu = \frac{\lambda}{4\pi} \kappa \quad (3.5)$$

Lorsque une surface opaque a la faculté d'absorber toute la radiation qui vient de l'extérieur, cette surface est dite noire. Ce genre de surface, absorbant parfait, sert de une base de référence pour d'autres surfaces qui n'ont pas cette propriété.

Par ailleurs, un corps à l'équilibre doit restituer dans la même direction et à la même fréquence l'énergie qu'il reçoit. Le corps noir est donc un absorbant parfait, mais également celui présentant à une température donnée l'émission maximale.



**Figure 3.2.** La luminance.  $dS$  est une surface élémentaire fictive perpendiculaire à la direction  $\mathbf{s}$ . La puissance du rayonnement qui traverse  $dS$  à l’instant  $t$ , dans l’angle solide  $d\omega$  centrée autour de  $\mathbf{s}$ , et dans la bande de fréquence  $d\nu$  centrée autour de la fréquence  $\nu$  est :  $d\Phi = L(\mathbf{x}, t, \mathbf{s}, \nu)dSd\Omega d\nu$

Ceci permet de définir par référence au corps noir certaines grandeurs, telles que l’absorptivité ( $\alpha_\lambda$ ), l’émissivité( $\epsilon_\lambda$ ) et la réflectivité( $\rho_\lambda$ ) (pouvoir d’une surface d’un corps de réfléchir une onde électromagnétique incidente). Il est a noter que ces grandeurs dépendent en général de la température  $T$ , et de la direction  $\Delta$  et longueur d’onde  $\lambda$  du rayonnement considéré. On parle de matériau gris quand ces trois coefficients ne dépendent pas de  $\lambda$ , et isotrope quand ils ne dépendent pas de  $\Delta$ .

### 3.2.1 Grandeurs descriptives du rayonnement thermique

Nous introduisons ici les définitions des grandeurs macroscopiques descriptives du phénomène de rayonnement. Il est à noter que le terme "macroscopique" est pris ici par rapport à l’échelle de la longueur d’onde. Celle-ci étant supposée très inférieure à l’échelle de la microstructure des milieux poreux que nous considérerons par la suite ( $> 100 \mu\text{m}$ ), les grandeurs "macroscopiques" en question sont utilisables dans les simulations que nous conduirons à l’échelle des pores.

Nous allons commencer par la luminance, qui relie l’énergie radiative avec le bilan thermique global regroupant tous les autres modes de transferts d’énergie. Pour simplifier, on omet ici tous les indices qui dénotent la dépendance spectrale ou directionnelle des grandeurs La luminance est une grandeur intensive, la densité de flux monochromatique  $L(\mathbf{r}, t, \mathbf{s}, \nu)$  ( $[\text{W m}^{-2} \text{st}^{-1} \text{Hz}^{-1}]$ ), qui correspond à l’énergie transportée par les photons de fréquence  $\nu$  (nombre  $\times h\nu$ ) qui passent dans une direction  $\mathbf{s}$ , par unité de d’angle solide  $d\Omega$ , au point  $\mathbf{x}$ , par unité de surface normale à  $\mathbf{s}$ , par unité de fréquence, et par unité de temps.

Considérons un corps noir dans une cavité isotherme fermée. En tous points de la

cavité, on a une luminance isotrope, qui n'est fonction que de la température de la cavité, égale à la luminance émise par un corps noir isotherme à la même température. Dans cette définition, il s'agit de la luminance du corps noir isotherme ou luminance d'équilibre désignée par  $L^0$ . Son expression est donnée par la Loi de Planck :

$$L_{\lambda}^0(\mathbf{x}, T) = \frac{2hc^2\lambda^{-5}}{\exp(\frac{hc}{\lambda k_b T(x)}) - 1} = \frac{2.hn^2\nu^3c_0^2}{\exp(\frac{h\nu}{k_b T}) - 1} \tag{3.6}$$

où  $k_b = 1.380510^{-23} J/K$  est la constante de Boltzmann. La Figure 3.3 illustre le comportement de la loi de Planck pour différentes températures en fonction de la longueur d'onde. On peut passer de la luminance à l'intensité radiative par la relation

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{n}, t, \mathbf{s}, \nu) = L(\mathbf{x}, t, \mathbf{s}, \nu)\mathbf{s}.\mathbf{n} \tag{3.7}$$

C'est l'énergie traversant une surface  $dS$  de normale  $\mathbf{n}$ , qui n'est plus supposée perpendiculaire à  $\mathbf{s}$ .

En intégrant sur tout le spectre de fréquence, on obtient la luminance totale directionnelle du corps noir

$$L^0(\mathbf{x}, T) = \frac{n^2\sigma T^4}{\pi} \tag{3.8}$$

avec  $\sigma = 5.66710^8 W/m^2.K^4$ . En intégrant à nouveau sur toute l'hémisphère des directions à l'extérieur de la surface du corps noir, on obtient la loi de Stefan-Boltzmann, qui donne la luminance totale ( $[W/m^2]$ ),

$$E^0(T) = n^2\sigma T^4 \tag{3.9}$$

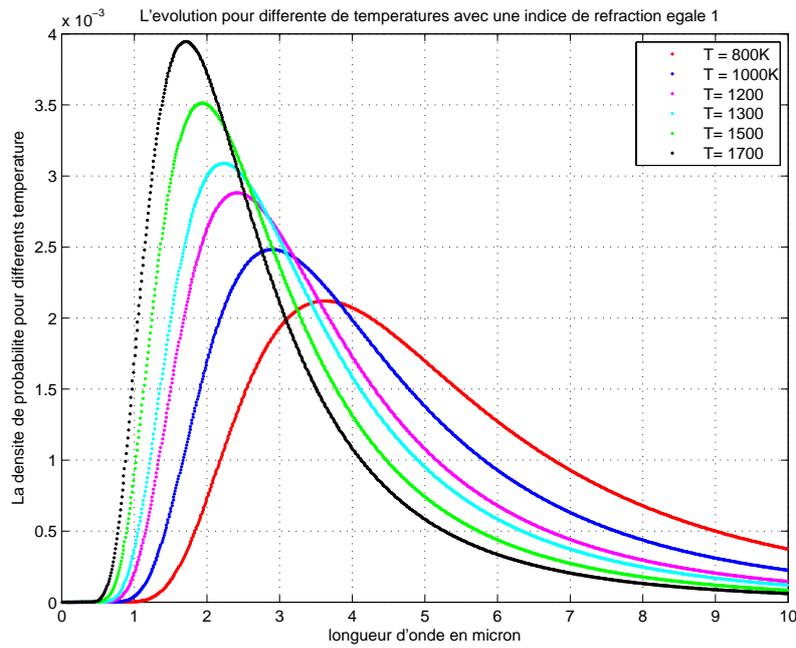
### 3.2.2 Absorption, émission et diffusion dans un milieu Semi-Transparent

On considère ici la propagation dans des matériaux susceptibles d'absorber une partie du rayonnement qui les traverse, de le diffuser, et de réémettre (nécessaire pour permettre l'équilibre thermodynamique).

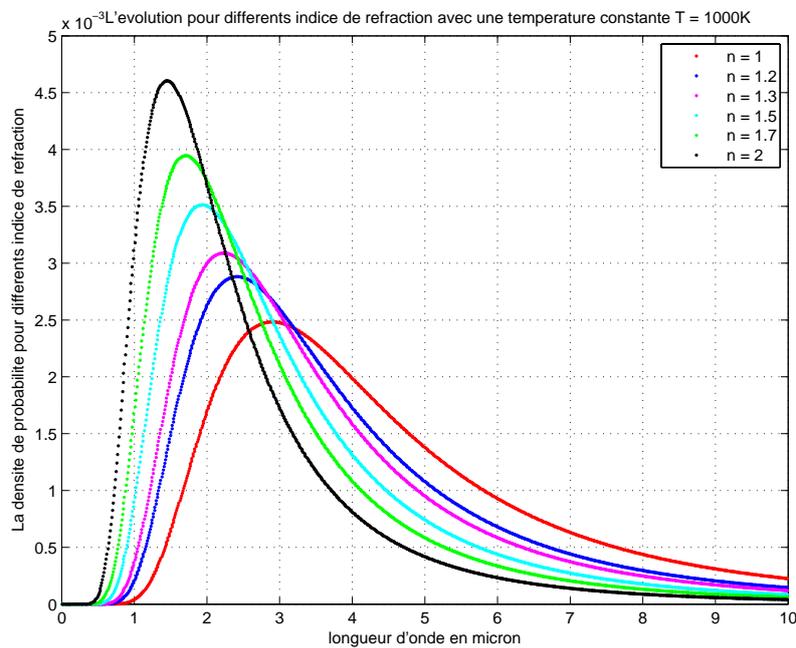
Considérons un cylindre semi transparent de longueur  $dx$  (Fig.3.5), pénétré par un flux incident  $\Phi(x)$ . Certains photons sont absorbés, et le flux sortant est  $\Phi(x + dx)$ . L'hypothèse de répartition aléatoire des centres absorbants et diffusants, sur cette courte distance, permet de définir le coefficient d'absorption macroscopique  $\kappa_{a,\nu}$  comme

$$\kappa_{a,\nu} = -\frac{1}{\Phi(x)} \frac{d\Phi(x)}{dx} \tag{3.10}$$

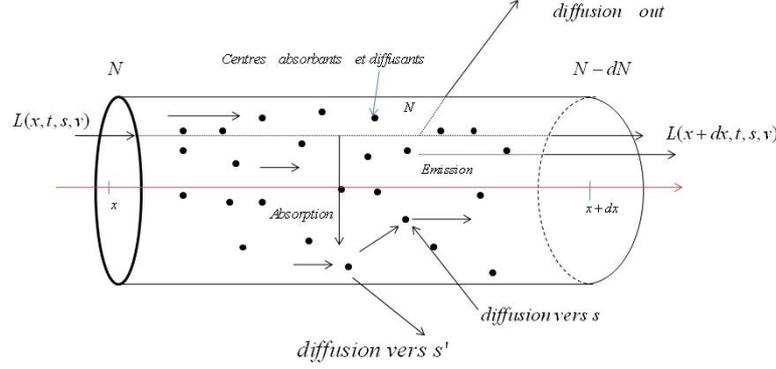
Notons que le coefficient d'absorption du milieu peut varier spatialement à cause de sa dépendance à la température et également en fonction de la fréquence. Toutefois, la fréquence d'un rayonnement est une grandeur intrinsèque, tandis que sa longueur d'onde peut varier, en fonction de la vitesse de propagation de rayonnement et donc de l'indice de réfraction.



**Figure 3.3.** La densité de probabilité d'émission d'un corps noir pour différentes températures avec  $n=1$ .



**Figure 3.4.** La densité de probabilité d'émission d'un corps noir à  $T=1000K$  pour différents indice de réfraction  $n$ .



**Figure 3.5.** L'illustration des différents mécanismes radiatifs : Diffusion entrante, diffusion sortante, Émission propre au milieu, Absorption du milieu

Rappelons que la contrainte d'équilibre thermique local impose que le milieu doit également rémettre, la même quantité d'énergie et dans la même direction. Le coefficient d'émission est donc égal au coefficient d'absorption,  $\kappa_{e,\nu} = \kappa_{a,\nu}$ .

De la même façon, on peut définir le coefficient de diffusion  $\sigma_{s,\nu}$  ( $[m^{-1}]$ ), qui traduit le déficit de flux en sortie dans la direction d'incidence, parce que les photons ont été déviés lors d'interactions avec le milieu matériel.  $\sigma_{s,\nu}$  est inversement proportionnel au libre parcours moyen des photons  $l_m$ . La somme des deux coefficient, d'absorption et de diffusion, s'appelle le coefficient d'extinction monochromatique total.

Cette diffusion représente une perte de flux en sortie, dans la direction considérée. En revanche, il existe aussi un effet inverse, du fait de la déviation dans la direction de sortie considérée de photons en provenance d'autres directions. On la quantifie par le coefficient  $\sigma_{d,\nu}$ . Cette diffusion entrante, qui représente un gain de luminance, résulte de la contribution de toutes les luminances qui proviennent de toutes directions  $\mathbf{s}'$  depuis le demi-espace amont, et qui sont déviées dans la direction  $\mathbf{s}$  :

$$dL_{\nu,in}(x, \mathbf{s}) = \frac{\sigma_{d,\nu}}{4\pi} \int_0^\infty \int_0^{4\pi} \Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}, \nu', \nu) L_{\nu'}(\mathbf{s}') d\Omega' d\nu' dx \quad (3.11)$$

$\Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}, \nu', \nu)$  est la fonction de phase de diffusion, c'est à dire la probabilité qu'un rayonnement qui provient d'une direction  $\mathbf{s}'$  avec une longueur d'onde  $\nu'$  soit dévié dans la direction  $\mathbf{s}$  à la fréquence  $\nu$ .

Dans le cas le plus fréquent où il n'y a pas de changement de fréquence (diffusion élastique), la fonction de phase se simplifie en  $\Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s})$ . En outre, la réciprocity de Helmholtz impose que  $\Phi$  est symétrique par rapport aux deux directions  $\mathbf{s}$  et  $\mathbf{s}'$ . D'autre part, la fonction de phase doit vérifier la loi de la conservation de l'énergie, c'est à dire, quelque soit la direction  $\mathbf{s}$  :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{d\Omega'} \Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}) d\mathbf{s}' \leq 1 \quad (3.12)$$

### 3.2.3 Équation de Transferts Radiatif monochromatique

En rassemblant les différents termes introduits dans le paragraphe précédent, on obtient l'équation de transfert radiatif sous sa forme standard intégro-différentielle

$$\frac{dL_\nu(x, \mathbf{s})}{dx} = \kappa_\nu L_\nu^0(x) + \frac{\sigma_{d,\nu}}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}) L_\nu(x, \mathbf{s}') d\Omega' - (\kappa_\nu + \sigma_{s,\nu}) L_\nu(x, \mathbf{s}) \quad (3.13)$$

Le terme de dérivée temporelle à gauche de l'équation peut s'écrire  $\frac{d}{dx} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}$ , et comme le rayonnement est un mode de transfert d'énergie quasiment instantané au regard des temps caractéristiques des autres phénomènes, ce terme est souvent négligé ( $c$  la vitesse de la lumière est très importante). Ceci conduit à réécrire l'équation de transfert radiatif sous la forme

$$\frac{\partial L_\nu(x, \mathbf{s})}{\partial x} = \underbrace{\left[ \kappa_\nu L_\nu^0(x) \right]}_1 + \underbrace{\left[ \frac{\sigma_{d,\nu}}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi(\mathbf{s}', \mathbf{s}) L_\nu(x, \mathbf{s}') d\Omega' \right]}_2 - \underbrace{\left[ (\kappa_\nu + \sigma_{s,\nu}) L_\nu(x, \mathbf{s}) \right]}_3 \quad (3.14)$$

Comme nous pouvons constater, la variation linéique de la luminance directionnelle résulte de trois termes :

- (1) émission volumique (source) ;
- (2) diffusion entrante (source) ;
- (3) atténuation par absorption et par diffusion (puits).

On peut noter que dans le cas d'un milieu non diffusant, une intégration sur un chemin optique  $l$  aboutit à la loi de Beer

$$L_\nu(l) = L_\nu(0) \exp\left(-\int_0^l \kappa_\nu(x) dx\right) = L_\nu(0) \exp(-\varrho_\lambda) \quad (3.15)$$

où  $\varrho_\lambda$  est l'épaisseur optique pour le chemin suivi et  $L_\nu(0)$  la luminance incidente. On peut définir ainsi l'absorptivité du milieu semitransparent comme

$$\alpha_\lambda \equiv \frac{L_\lambda(0) - L_\lambda(l)}{L_\lambda(0)} = 1 - \exp(-\varrho_\lambda) \quad (3.16)$$

Dans le cas d'un matériau homogène, ceci se simplifie en

$$L_\nu(l) = L_\nu(0) \exp(-\kappa_\nu l), \quad \varrho_\lambda = \kappa_\nu l \quad (3.17)$$

### 3.2.4 Emission Volumique

L'émission à partir d'un élément  $dV$  infiniment petit, optiquement mince et isotherme, est proportionnelle à son volume. A l'équilibre thermodynamique, l'énergie radiative  $B$  émise par un élément de surface dans un matériau isotherme de coefficient d'absorption  $\kappa$  constant est lié à la luminance du corps noir (Loi de Kirchhoff)

$$B = \kappa L_\lambda^0 = \kappa \frac{\sigma T^4 n^2}{\pi} \quad (3.18)$$

En intégrant sur toutes les directions d'émissions, on obtient la puissance volumique émise totale ( $E$ , [ $W\ m^{-3}$ ])

$$E = 4\kappa\sigma T^4 n^2 \quad (3.19)$$

### 3.3 Traitement des conditions aux limites radiatives

La propagation d'un rayonn fait intervenir phénomènes de réflexion, réfraction et transmission aux passages d'éventuelles interfaces. Si on considère ces surfaces comme optiquement lisses (localement, par rapport à la longueur d'onde), ces phénomènes sont décrits par les lois de l'optique géométrique. Le cas contraire, où la dimension caractéristique de la rugosité est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde du rayonnement incident conduit à des phénomènes de diffusion et d'interférence ; il n'est pas considéré ici.

On examine de façon très détaillée dans le Chapitre 8 les loi de l'optique géométrique, qui résultent des équations de l'électromagnétisme de Maxwell, dans différentes situations, entre des milieux transparents ou absorbants. Nous ne n'évoquons ici que le cas le plus simple, entre deux milieux transparents (1) et (2), c'est à dire dont les indices de réfraction  $n_1$  et  $n_2$  sont réels.

Un faisceau incident sur une interface peut être transmis ou réfléchi (figure 3.6). Les lois de Snell-Descartes fournissent les directions suivies par les rayons réfléchi et transmis. Les premiers sont symétriques aux rayons incidents par rapport à la direction normale à la surface. Les seconds suivent une direction  $\theta_2$ , mesurée par rapport à la normale, donnée en fonction de l'angle d'incidence  $\theta_1$  par

$$n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2) \quad (3.20)$$

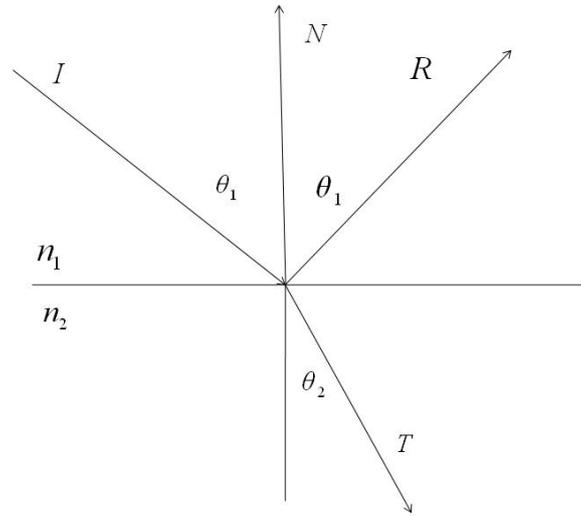
Notons que (3.20) prédit qu'il existe un angle limite de réfraction. Si  $n_2 > n_1$ , le faisceau transmis ne peut s'écarter de la normale d'un angle supérieur à  $\text{asin}(n_1/n_2)$ .

D'autre part, les relations de Fresnel quantifient la part de l'énergie radiative qui sera réfléchi ou transmise par l'interface. La réflectivité, *i.e.*, la fraction réfléchi, est donnée par (Born et Wolf, 1986 ; Hecht, 1987)

$$R(\theta_1) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin^2(\theta_1 - \theta_2)}{\sin^2(\theta_1 + \theta_2)} + \frac{\tan^2(\theta_1 - \theta_2)}{\tan^2(\theta_1 + \theta_2)} \right] \quad (3.21)$$

Cette formule est obtenue en moyennant sur les directions possibles de polarisation du faisceau incident, qui dans les cas que nous considérons sont distribuées de manière aléatoire et isotrope. On retrouve la notion d'angle limite précédente. Si  $n_1 > n_2$ , la réflexion est totale ( $R(\theta_1) = 1$ ) si  $\theta_1 > \text{asin}(n_2/n_1)$ .

Dans le cas de méthodes de Monte Carlo, où l'on propage des éléments discrets, on peut interpréter les fractions d'énergie transmise et réfléchi comme des probabilités de réflexion/transmission.



**Figure 3.6.** Réflexion (R) et transmission avec réfraction (T) d'un faisceau incident (I) sur l'interface entre deux milieux d'indices  $n_1$  et  $n_2$ .

### 3.4 Conclusion

Le transfert de chaleur par rayonnement est généralement modélisé à l'aide de l'Équation du Transfert Radiatif (ETR) qui décrit la variation spatiale de la luminance. Le flux radiatif est obtenu en intégrant le champ de luminance dans toutes les directions de l'espace et sur toutes les longueurs d'ondes.

L'ETR n'a généralement pas de solution analytique. Il apparaît alors nécessaire de faire appel à des méthodes numériques. Sur le plan pratique, l'une des difficultés essentielles de cette résolution réside dans le calcul d'une fonction de sept variables (trois coordonnées de position, deux coordonnées angulaires, une variable temporelle et un paramètre spectral). Par ailleurs, l'ETR étant de type intégral, l'autre difficulté majeure provient du terme intégral (problèmes de discrétisation angulaire) et du terme non homogène où intervient la température et qui nécessite généralement de coupler l'ETR à l'équation de conservation de l'énergie.

Différents ouvrages traitent de la résolution de l'ETR, notamment Chandrasekhar (1960), Ozisik (1973) et Modest (2003). Nous soulignons que en fonction du problème rencontré et de ses spécificités, l'équation de transfert radiatif peut être formulée différemment.

La résolution de l'ETR se fait en fonction des spécificités du problème traité, et le choix d'une méthode par rapport à une autre est souvent stratégique et dépendant de l'objectif, de même que le choix des approximations éventuelles. Nous revenons plus en détail sur ce point dans le chapitre suivant.

## Chapitre 4

---

### Transferts radiatifs en milieux poreux

Ce chapitre porte comme le précédent sur la description des transferts radiatifs, mais sur un plan beaucoup plus appliqué, et résolument tourné vers les applications en milieux poreux. Il s'agit d'une revue de la littérature, centrée sur les questions suivantes

- Comment peut on décrire ces phénomènes à la grande échelle, c'est à dire à une échelle où le milieu est perçu comme un matériau homogène équivalent, doté de propriétés effectives ?
- Comment déterminer ces propriétés effectives ?
- Quelles sont les méthodes de résolution numérique existantes ?

Il n'est pas question de tenter une synthèse bibliographique du traitement des processus radiatifs en général, et de l'ensemble des approches existantes. On conçoit aisément que certaines, notamment parmi les plus anciennes conçues en vue d'applications en astrophysique, peuvent être inadaptées au traitement des domaines à géométrie complexe et confinée que nous considérons ici, ou de surcroît un couplage existe avec d'autres modes de transfert de chaleur.

Pour un complément au bref rappel d'éléments théoriques donné dans le chapitre précédent, et une description d'autres méthodes classiques, on pourra utilement se référer aux ouvrages généraux de Chandrasekhar (1960), Ozisik (1973), Viskanta et Mendüç (1989), Siegel et Howell (1992) ou Modest (2003). Nous ne prétendons pas non plus à l'exhaustivité concernant les applications en milieu poreux, et notre tour d'horizon pourra être complété en consultant par exemple les revues bibliographique de Tancrez (2002) ou Muresan (2005). Toutefois, nous avons pensé utile de mentionner quelques travaux récents proches de notre domaine d'intérêt.

## 4.1 Forme d'une description macroscopique

L'équation de conservation locale décrivant le transport de chaleur quand convection, conduction et radiation interviennent peut s'écrire sous la forme de (2.7a)

$$C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = S - \nabla \cdot \mathbf{q}_r \quad (4.1a)$$

$$\mathbf{J} = C \mathbf{v} T - \lambda \nabla T \quad (4.1b)$$

où le bilan radiatif  $-\nabla \cdot \mathbf{q}_r$  est délibérément séparé des autres termes, sans l'intégrer comme il serait possible selon le point de vue adopté dans le terme source  $S$  (qui résulte par exemple de réactions chimiques) ou dans la divergence d'un flux total  $\mathbf{J} + \mathbf{q}_r$ .

La densité de flux radiatif  $\mathbf{q}_r$  est l'intégrale sur tout le spectre de fréquence et sur toutes les directions de propagation de la luminance directionnelle,

$$\mathbf{q}_r(\mathbf{x}) = \int_0^\infty d\nu \int_0^{4\pi} d\mathbf{s} (\mathbf{s} L_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{s})) \quad (4.2)$$

Celle-ci est régie par l'équation de transfert radiatif (3.14). Le bilan radiatif  $-\nabla \cdot \mathbf{q}_r$  est donc un terme de couplage entre l'équation de convection/conduction et l'ETR.

Un choix fondamental se présente quand on veut passer de cette description locale, trop détaillée pour être aisément manipulable dans des domaines complexes, à une description plus globale, où l'on souhaite pouvoir oublier le détail de la microstructure en l'intégrant dans des comportements et coefficients effectifs. Ce choix fait obligatoirement intervenir des considérations d'épaisseur optique.

Il est tout à fait standard dans le domaine des milieux poreux d'opérer de tels changements d'échelle. La théorie de l'homogénéisation (Sanchez-Palencia , 1980) en fournit un cadre théorique, dont les mises en oeuvre sont maintenant classiques (voir par exemple Adler , 1992). On obtient alors une équation de conservation de la forme de (4.1a)

$$C^* \frac{\partial T^*}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}^* = S^* - \langle \nabla \cdot \mathbf{q}_r \rangle \quad (4.3a)$$

$$\mathbf{J}^* = C^* \mathbf{v}^* T^* - \lambda^* \nabla T^* \quad (4.3b)$$

où les quantités affectées d'une étoile sont des contreparties macroscopiques des quantités locales correspondantes. Les variables  $T^*$ ,  $\mathbf{v}^*$ ,  $\mathbf{J}^*$  ou  $S^*$  correspondent à des moyennes volumiques locales, et les coefficients  $C^*$ ,  $\mathbf{v}^*$  et  $\lambda^*$  sont des paramètres effectifs qui décrivent leurs relations. Le bilan radiatif est pour l'instant conservé sous la forme d'une moyenne volumique  $\langle \nabla \cdot \mathbf{q}_r \rangle$ .

Il est important d'être conscient qu'une formulation homogénéisée de la forme de (4.3) n'est valide que sous certaines conditions, dont la principale est l'existence d'une séparation d'échelles. Toutes les échelles reliées au problème macroscopique doivent être

très supérieures à l'échelle de la microstructure, de façon à ce que des moyennes locales représentatives puissent être prises à une échelle intermédiaire, et que les coefficients effectifs ne dépendent pas de la présence ou de la nature des conditions aux limites.

Ceci a pour conséquence qu'une telle formulation devient souvent inapplicable au voisinage immédiat de frontières du domaine, mais le plus souvent sans que cela soit très préoccupant puisque l'épaisseur concernée, de l'ordre de l'échelle microscopique, est négligeable devant les dimensions globales du système.

Ceci nous ramène à la question de l'épaisseur optique. Elle doit être grande si l'on veut pouvoir envisager d'appliquer une description de la forme de (4.3). Ceci constitue le cadre de l'approximation de Rosseland. On peut exprimer cette contrainte par le critère qu'aucune part d'un rayonnement incident ne doit pouvoir traverser tout le système sans être absorbé ou diffusé, c'est à dire sans un oubli des conditions d'entrée. Ceci doit d'ailleurs s'appliquer de façon plus stricte, en tout point à l'intérieur du domaine, à l'exclusion d'une région périphérique qu'on souhaite être la plus réduite possible. Le bilan radiatif doit pouvoir s'y exprimer en fonction de la densité de flux moyenne locale et de ses gradients, sans faire référence aux conditions aux limites.

Dans ces conditions, considérant que les échanges radiatifs entre deux points dépendent de la différence de leur température à la puissance 4 puisqu'ils résultent du différentiel des taux d'émissions surfaciques (3.9) ou volumiques (3.19), et en faisant abstraction de complications telles que la dépendance de l'indice de réfraction à la température, le flux radiatif total s'écrit naturellement comme proportionnel à  $\nabla T^{*4}$ . En linéarisant on obtient une relation du type de la loi de Fourier, qui fait intervenir une "conductivité thermique de rayonnement"  $\lambda_r^*$

$$\langle \mathbf{q}_r \rangle = -\lambda_r^* \nabla T^*, \quad \lambda_r^* \propto T^{*3} \quad (4.4)$$

Dans les applications que nous visons, on peut s'attendre à ce que l'approximation de Rosseland soit applicable, comme dans beaucoup d'autres situations industrielles. Par exemple, un isolant fibreux serait de piètre qualité s'il laissait échanger directement par rayonnement les deux domaines qu'il sépare. Toutefois, il convient de garder à l'esprit que (4.4) n'est qu'une approximation. En outre, son interprétation et sa mise en oeuvre peuvent demander des précautions et des adaptations. Par exemple, pour un lit de grains opaques traversés par un fluide transparent, ce ne sont pas les mêmes températures moyennes locales qui interviennent dans les échanges radiatifs entre solides décrits par (4.4) et dans le terme convectif de (4.3), si l'équilibre thermique entre les deux phases n'est pas satisfait. Il n'est pas non plus évident que  $\lambda_r^*/T^{*3}$  soit une caractéristique intrinsèque du matériau du fait des couplages entre les différents modes de transferts (ce n'est même pas le cas du coefficient  $\lambda^*$ , qui dépend de l'intensité de l'écoulement). Finalement, rappelons encore une fois que le modèle (4.4, 4.3) n'est pas strictement applicable au voisinage d'une paroi, ni d'aucune autre singularité. On retrouvera ce problème dans la troisième partie de ce mémoire, pour l'interprétation des résultats au voisinage d'une

source de chaleur au coeur du milieu poreux.

Si les conditions de l'approximation de Rosseland ne sont pas remplies, on ne peut plus parler strictement d'homogénéisation, ni appliquer (4.4, 4.3). On peut au mieux déterminer des fonctions de transfert, pour une situation donnée. Toutefois, si une séparation d'échelle existe effectivement (en termes d'échelles géométriques, et non d'épaisseur optique), il reste possible de comparer ces réponses à celles qu'aurait un milieu homogène dans la même situation, et de déterminer par ajustement les propriétés radiatives d'un matériau équivalent.

Ensuite, les simulations à l'échelle macroscopique reposeront sur (4.4), couplée avec une version de l'ETR à cette échelle, c'est à dire faisant appel aux coefficients effectifs (coefficients d'extinction, de diffusion, ...) du matériau équivalent

On trouvera par exemple chez Oliveira et Kaviany (2001) une description détaillée d'un modèle descriptif des transports de masse et de chaleur dans un milieu poreux siège d'une combustion, basé sur une description homogénéisée à deux champs de températures (donc autorisant la prise en compte de déséquilibre thermique entre les phases fluide et solide). Leur discussion reprend les mêmes indications dans un cadre plus concret.

Une fois ce distingo établi, nous allons maintenant examiner successivement les deux situations. Pour l'approximation de Rosseland, on n'insistera pas du tout sur les méthodes de résolution. D'une part parce qu'il s'agit d'une équation de convection/diffusion de forme standard, avec la seule complication que le terme diffusif est non linéaire. Elle se prête donc à toutes les méthodes habituelles de résolution, telles que les formulations aux différences finies, et peut même donner lieu dans quelques situations simples à des solutions analytiques. D'autre part, parce que nous ne nous plaçons jamais à cette échelle dans le cadre de ce travail.

Au contraire, nous cherchons à déterminer les comportements et coefficients macroscopiques en nous plaçant à l'échelle microscopique. Nous avons donc à traiter l'ETR directement, d'une façon ou d'une autre. Pour cette raison, la revue des méthodes de traitement applicables aussi bien à l'ETR réelle, à l'échelle locale dans le milieu réel, qu'à l'ETR "effective", dans le matériau homogène équivalent, sera plus détaillée.

## 4.2 Approximation de Rosseland

Pour les raisons qui viennent d'être données, on se limite ici à quelques indications et exemples d'applications.

Notons tout d'abord que le modèle de Rosseland (4.4) est applicable dans un milieu homogène, s'il est optiquement épais. En supposant qu'il existe un gradient de température, on peut évaluer le flux radiatif en un point comme la résultante de ce qui y parvient

(après atténuation) du fait de l'émission volumique dans tout l'espace (voir par exemple Modest (2003), Section 14.2). Les conditions qui sous-tendent l'applicabilité du modèle sont ici apparentes. Il faut que l'extinction soit suffisante pour que le support réel de l'intégrale n'atteigne pas les limites du domaine, ce qui correspond bien au critère d'une grande épaisseur optique. Dans ces conditions, et en supposant également l'uniformité de l'indice  $n$ , on obtient

$$\lambda_r = -\frac{16n^2\sigma T^3}{3\beta_R} \quad (4.5)$$

où  $\beta_R$  est un coefficient d'extinction moyen (sur le spectre de fréquence). Notons que (4.5) ne peut s'appliquer près des limites du domaine, et que des corrections ont été introduites pour étendre pallier ce problème, telles que les conditions de saut de Deissler (par exemple Modest (2003), Section 14.3).

Par analogie, on rencontre souvent une expression de la forme de (4.5) pour la conductivité radiative effective d'un milieu poreux, où  $\beta_R$  est remplacé par une valeur effective de ce coefficient d'extinction moyen.

Parmi les applications de ce modèle, dans un domaine très proche de celui qui nous intéresse puisqu'il s'agit de combustion en milieu poreux, on peut citer Schult et al. (1995).

La littérature concernant la détermination des propriétés radiatives effectives de milieux poreux sera brièvement passée en revue un peu plus loin (Section 4.3.2).

## 4.3 Traitement de l'équation de transfert radiatif

### 4.3.1 Méthodes

Il existe tout un spectre de méthodes pour traiter les transferts. A une extrémité, on opère directement avec l'ETR (3.14), où éventuellement une forme intégrée de celle-ci, numériquement voire analytiquement. A l'autre extrémité, on trouve les méthodes de Monte Carlo pures, où il n'est plus fait référence à l'ETR, mais où on simule les processus élémentaires d'émission, propagation et absorption, dont l'ETR est une description de la résultante. Entre ces deux extrêmes déterministes et stochastiques se situent des intermédiaires où qui font intervenir conjointement les deux types d'approches.

De façon générale, l'efficacité numérique se situe du côté des méthodes déterministes. En revanche, les méthodes de Monte Carlo permettent d'aborder des situations beaucoup plus complexes, telles que celles rencontrées dans les milieux poreux 3d sans structure régulière.

Nous donnerons très peu de détail sur les méthodes basées sur l'ETR. Elles sont décrites dans les ouvrages de références listés au début de ce chapitre. Parmi celles-ci, la plus ancienne et une des plus importantes est la méthode des ordonnées discrètes (Chandrasekhar, 1960). Elle consiste à discrétiser l'ETR en considérant un ensemble de directions discrètes, puis à résoudre le système d'équations aux dérivées partielles (par rapport aux

variables d'espace) en utilisant par exemple une méthode aux différences finies. Ensuite, différentes méthodes de quadratures existent pour intégrer sur l'ensemble de directions. Cette approche appartient à la classe des méthodes multiflux, où on considère que la luminance est uniforme dans des éléments discrets de l'espace angulaire, afin de passer d'une équation intégral-différentielle à un système d'équations différentielles.

Un point de vue dual correspondant aux méthodes de zones, où on divise cette fois l'espace en zones volumiques ou surfaciques isothermes, dont on détermine les interactions. Ceci nécessite le pré-calcul d'un grand nombre de coefficients géométriques, qui peut devenir prohibitif dans des géométries très complexes. Notons qu'il est possible d'évaluer les facteurs d'échanges par des algorithmes stochastiques.

Certaines méthodes combinent les deux points de vue, comme les méthodes de lancer de rayons (à partir d'éléments de volumes) ou les méthodes de transferts discrets (à partir d'éléments de surface), où l'on suit la propagation de rayon émis à partir de zones prédéfinies, dans des classes de directions également prédéfinies.

On peut également mentionner la résolution des transferts radiatifs par la méthode des volumes finis, relativement récente, dans laquelle on exprime que les flux d'énergie radiative entrant et sortant au travers des faces d'un volume de contrôle sont compensés (en équilibre) par l'atténuation et l'augmentation l'énergie radiative dans ce même volume et ce pour un angle de propagation donné. L'angle solide total  $4\pi$  est discretisé en un nombre fini d'angles solides (angles de contrôle) d'une manière qui dépend du problème traité. La méthode des volumes finis est conservative, pour chaque composante discrète de la luminance ainsi que pour les flux radiatifs.

La plupart de ces méthodes sont peu adaptées aux traitement de géométries très complexes, et présentent certains désavantages, comme la présence de diffusion numérique ou une grande sensibilité à la discrétisation. Ces inconvénients n'existent pas dans les méthodes de Monte Carlo, où notamment la discrétisation angulaire est totalement éliminée.

L'appellation générique "méthodes de Monte Carlo" regroupe un ensemble de méthodes dont le point commun est l'utilisation d'un processus stochastique pour obtenir une solution approchée d'un problème. Ce type de méthodes est connu depuis longtemps, mais n'a pu être utilisés en pratique qu'avec l'apparition des ordinateurs. La méthode de Monte Carlo (MMC) se réfère à la première technique proposée par Metropolis et Ulam (1949), pour la simulation de la diffusion de neutrons dans des matériaux fissile. Elle s'est ensuite répandue dans tous les domaines de la physique.

La caractéristique principale de ces méthodes de Monte Carlo réside dans la discrétisation de la quantité transportée, et non de l'espace dans lequel elle se déplace. Cette discrétisation n'est pas irréaliste dans une vision corpusculaire du rayonnement. Toutefois, les quanta d'énergie qu'on peut en pratique considérer sont beaucoup plus gros, et il s'agit

donc bien d'une discrétisation numérique, dont la conséquence est d'introduire du bruit statistique.

L'algorithme ne repose pas sur une équation descriptive du phénomène à l'échelle du continu, mais sur la simulation des processus élémentaires : émission, propagation, absorption. Il est d'une grande souplesse, puisqu'en principe il peut prendre en compte tous les paramètres qui interviennent dans ces processus, comme la longueur d'ondes, la polarisation, les propriétés optiques locales et leurs variations, sans complexifier énormément l'architecture et le codage du modèle numérique. Elles ne sont pas non plus intrinsèquement pénalisées par l'étendue ou la complexité du domaine de simulation. Le coût du calcul est proportionnel au seul nombre de tirs effectués. En revanche, les variables "continues", comme la température ou une densité de flux, ne sont accessibles que par une prise de moyenne statistique sur cet ensemble de tirs, et sont donc entachées d'un niveau de bruit qui en première approximation est inversement proportionnel à la racine carrée de ce nombre de tir. Toute application est donc confronté à la recherche d'un compromis entre la réduction du coût, qui exige un nombre de tir raisonnable et donc des quantas assez gros, et la réduction du bruit, qui à les exigences inverses.

Une image peut être utilisée pour situer les méthodes de Monte Carlo par rapport aux méthodes déterministes. Notons d'abord que la MMC peut être utilisée pour évaluer les coefficients d'échanges entre deux éléments d'un modèle de zones. Il suffit d'émettre une grande quantité de quantas à partir de chaque zone, de suivre leur trajectoire, et de recenser où chacun d'eux parvient. Une fois ces coefficients obtenus, le calcul des flux pour un champ de température donné ne demande que le calcul d'un simple produit matrice×vecteur, et à chaque pas de temps on n'aura que cette opération à répéter. Toutefois, sans connaissance à priori de ce que sera le champ de température, les facteurs d'échanges doivent être tous évalués, et avec une grande précision.

Dans une MMC pure, ces facteurs d'échanges ne sont pas stockés, et sont en quelque sorte recalculés à chaque pas de temps, ce qui peut passer pour une perte de temps. Toutefois, ils ne sont en pratique évalués que pour leur partie "utile", c'est-à-dire pour les éléments qui à cet instant émettent fortement, et avec la précision statistique maximale pour ces éléments là. Ceci est particulièrement important dans les types de simulations que nous avons en vue, où de très forts contrastes de température existent, avec des points très chauds aux lieux où la combustion est en train de s'effectuer, dont la position change avec le temps.

### 4.3.2 Applications

Nous nous bornerons ici à dresser un petit catalogue de quelques applications, pour illustrer l'usage de certaines méthodes évoquées plus haut, toutes liées à l'étude de processus en milieu poreux et pour l'essentiel à un niveau de description local.

Beaucoup de ces travaux concernent des milieux poreux types, comme des lits de

grains (généralement sphériques), des mousses ou des matériaux fibreux, qui s'en rapprochent au moins par la plage de porosité. Ceci tient à l'omniprésence de ce genre de structures et leur étude a donc un intérêt général. D'autres concernent des applications plus spécifiques, liés à un problème industriel, tels que les transferts dans le coeur d'un réacteur nucléaire.

Les matériaux granulaires ont été les premiers à être abordés, notamment par Singh et Kaviany (1991). Ils appliquent une méthode de Monte Carlo, avec des grains qui peuvent être opaques ou semi-transparents, et tabulent la transmittance du matériau en fonction de la porosité pour différentes valeurs des propriétés optiques des grains. Par la suite, Singh et Kaviany (1992) montrent que dans le cas de grains opaques, les propriétés du lit peuvent se déduire de celles évaluées en considérant les grains comme des diffuseurs isolés dans un milieu homogène (diffusion indépendante), par l'application de facteurs correctifs. L'effet de la conduction dans le solide sera également étudié par Singh et Kaviany (1994).

Argento et Bouvard (1996) ont abordé le cas d'empilements de sphères opaques à l'échelle microscopique par une méthode de lancer de rayon. Des photons sont envoyés dans l'empilement, et leur trajectoire est construite en appliquant des réflexions spéculaires à la surface de chaque grain rencontrés. Une partie de l'énergie transportée est absorbée à chaque interaction, fonction de l'émissivité des grains. Les propriétés optiques effectives sont déduites des statistiques des flux sortant aux deux faces de la couche poreuse.

Rubiolo et Gatt (2002) ont aussi considéré des milieux composés de sphères ou de cylindres, gris et opaques, de surface diffusante, dans un fluide transparent. Ils traitent le transport à grande échelle par une formulation de type volumes finis, et les propriétés radiatives des réseaux de sphères ou de cylindres sont calculées par une méthode aux éléments finis.

Kamiuto a également beaucoup travaillé sur les lits de sphères. Sur la base des corrélations qu'il a établi pour le coefficient d'extinction, la fonction de phase et l'albedo, Kamiuto et Yee (2005) présente un calcul à la grande échelle, où l'ETR est résolue par une méthode de différences finies (en espace et en orientation).

Également à la grande échelle, Wu et Chu (1999) ont résolu l'ETR dans des empilements de porosité variable, par une méthode d'harmoniques sphériques, en se basant sur les propriétés radiatives effectives données par Kamiuto et al. (1993).

Mentionnons pour finir Rousseau et al. (2007) qui traitent du cas opposé au matériau granulaire, puisque qu'il s'agit de verres à bulles. Les sphères représentent donc des cavités, et non des grains solides. Toutefois, leurs propriétés optiques effectives sont déterminées à l'aide d'une méthode de lancer de rayons tout à fait similaire à celle de Argento et Bouvard (1996), hormis le fait que les bulles ne sont pas opaques. Les rayons peuvent donc les traverser (avec réfraction), et la construction de leur trajectoire est s'apparente donc à celle appliquée par Singh et Kaviany (1991). L'originalité de ce travail est d'opérer dans une géométrie réelle, imagée par microtomographie X du véritable matériau.

Les mousses ont été récemment beaucoup étudiées, du fait de leurs applications traditionnelles comme matériaux isolants, et des nouvelles applications qui s'ouvrent à elles par exemple comme électrodes de piles à combustible. Le groupe de l'INSA de Lyon autour de D. Baillis y a particulièrement contribué. Ils ont considéré des mousses plastiques (Coquard et Baillis, 2006) ou métalliques (Loretz et al., 2008), en tirant parti de la structure cellulaire de la mousse pour estimer les propriétés radiatives globales à partir de celles d'une cellule, supposées indépendantes de la présence de ses voisines. A plus grande échelle, Coquard et al. (2008) utilisent ensuite une méthode d'ordonnées discrètes.

Notons que ce groupe s'est également intéressé aux objets sphériques, en considérant des matériaux à bulles (Randrianalisoa et Baillis, 2004) et des lits de grains opaques (Coquard et Baillis, 2004) avec une approche de Monte Carlo du même type que celle de Rousseau et al. (2007).

Les matériaux fibreux, du fait de leur utilisation en tant qu'isolant thermique, ont aussi été considérés. Bai et Fan (2007) l'ont fait au niveau macroscopique, dans un modèle à deux champs de température. Le fluide est considéré comme transparent, et la phase solide donne lieu à des échanges radiatifs décrit par l'ETR, qui est résolue par une méthode de volume fini, avec discrétisation des coordonnées spatiales, des orientations et des fréquences.

Beaucoup de travaux ont été conduits récemment à l'Ecole Centrale de Paris, concernant la situation plus spécifique du coeur d'un réacteur nucléaire, constitué initialement d'un arrangement régulier de cylindres, mais pouvant ultérieurement être dégradé. Tous ces travaux, dans le cadre des thèses de Tancrez (2002) puis de Chalopin (2008) reposent sur une pure approche de Monte Carlo à l'échelle locale (voir par exemple Tancrez et Taine, 2003). Une conductivité thermique radiative est déterminée, via les coefficients effectifs d'extinction, d'absorption et de diffusion, eux mêmes obtenus à partir des résultats de la simulation des processus élémentaires d'émission, propagation et absorption. Les seules paramètres sont la morphologie de la structure du milieu, et les propriétés optiques locales des surfaces solides.

Parmi d'autres applications à des situations spécifiques, on peut citer Hackert et al. (1998) qui a considéré la combustion dans des brûleurs poreux. Le modèle est bidimensionnel et les échanges radiatifs interviennent entre des éléments solides isolés les uns des autres, considérés comme gris et isothermes. Une pure méthode de zone est appliquée, où les transferts sont calculés à partir de coefficients d'échanges, les facteurs de formes étant aisés et peu nombreux à évaluer dans cette géométrie périodique.

Autre exemple, Del Coz Diaz et al. (2008) ont étudié un matériau isolant, les briques creuses, avec pour objectif d'optimiser leurs caractéristiques géométriques. La situation est plus simple ici, puisque les transferts radiatifs n'interviennent qu'entre les parois d'une seule cavité (qui se répète par périodicité). Une méthode de zone est donc parfaitement adaptée.

On constate une certaine prédominance, dans les travaux les plus récents et dans les situations les plus complexes, des techniques de Monte Carlo. Ceci s'explique par les avantages qu'elles présentent, détaillées au paragraphe précédent, tandis que le développement des moyens de calcul permet de faire face à leur moindre performance en terme de temps de calcul. Du reste, ces méthodes bénéficient de la banalisation des outils de calcul parallèle, auxquelles elles se prêtent particulièrement aisément.

# Conclusion

---

Dans cette première partie de présentation générale nous avons placé le problème dans son contexte du point de vue physique, nous avons défini les objectifs visés, et évoqué certaines contingences pratiques pour le développement de nouveaux outils numériques, liées aux caractéristiques des éléments déjà existants.

Pour l'application visée, le phénomène qui justifie le plus d'entreprendre le présent travail est l'existence de zones très chaudes, ainsi que les très grandes différences de température qui peuvent exister entre des grains très proches l'un de l'autre quand les transferts thermiques ne sont supposés reposer que sur la conduction et la convection. Les deux faits sont visibles par exemple dans la figure 2.5. On voit qu'il s'agit de phénomènes localisés, donc très liés à la morphologie du matériau à la petite échelle. Il importe donc de conduire l'étude avec le degré de détail qui permettra d'en rendre compte.

En outre, si une approximation de type Rosseland par le biais d'une conductivité radiative apparente (dont la pertinence et la valeur sont à établir), est susceptible de permettre de décrire les transferts radiatifs à une échelle mésoscopique (au moins quelques grains), les forts échanges entre un grain en cours de combustion et ceux qui l'avoisinent revêtent un caractère singulier qui ne peut être pas être décrit par ce modèle. C'est le problème de la validité de l'approximation de Rosseland près des frontières, qui est particulièrement sensible ici puisque ces frontières sont des sources de chaleur puissantes et localisées. Il importe d'autant plus de développer un outil de simulation à l'échelle locale, qui permette une prise en compte directe et explicite du rayonnement, avec le niveau de détail requis.

L'étude bibliographique a montré qu'à l'échelle locale, les méthodes de Monte Carlo jouissent d'une certaine faveur, du fait de leur souplesse et de la grande difficulté de traiter des géométries complexes avec les méthodes concurrentes. C'est donc une méthode de ce type qui est utilisée dans les outils décrits dans la seconde partie du mémoire. Nous y sommes conduits d'autant plus naturellement que le code de simulation du smoldering utilise déjà des algorithmes de ce type pour décrire les transport diffusifs (masse) et conductifs (chaleur) dans la phase gazeuse.

## PART 2

---

# DÉVELOPPEMENT DES OUTILS NUMÉRIQUES

Les éléments regroupés dans la partie introductive ont fait apparaître la nécessité de développer un outil de simulation des transferts thermiques à la petite échelle dans des milieux poreux, qui pourra être appliqué à la simulation directe de situations spécifiques comme le smoldering (en couplage avec tous les outils existants par ailleurs pour les processus mécaniques et chimiques), ou utilisé pour explorer systématiquement des situations génériques, de façon à dégager des résultats plus généraux comme la valeur d'une conductivité radiative équivalent en fonction des paramètres opératoires et microstructuraux.

Il ne semble pas que d'autres équipes aient auparavant mis en place un tel outil, présentant le caractère très général que notre ambition était de lui conférer, et qui à terme devait inclure la possibilité d'opérer, en régime instationnaire, dans un milieu de géométrie complexe, 3d et arbitraire décrite par une fonction de présence de phase reposant sur un maillage de l'espace, ainsi que toutes les libertés de choix concernant les propriétés radiatives des constituants :

- matériaux transparents, semi-transparentes ou opaques, diffusant ou non ;
- émission/absorption volumique et/ou surfacique ;
- dépendance des propriétés aux variables physiques (longueur d'onde, température, ...).

En outre, la nécessité de pouvoir opérer un couplage avec un ensemble préexistant dans l'équipe imposait des contraintes. En conséquence, il s'avérait nécessaire d'élaborer cet outil en prenant le problème à la base, pour assurer une cohérence maximale de l'ensemble.

Pour satisfaire les critères ci-dessus et au vu des raisons qui ont été énoncées dans la partie introductive du mémoire, la méthode de Monte Carlo s'est imposée naturellement.

Le premier chapitre de cette seconde partie décrit le principe de l'approche, et les détails de sa mise en oeuvre concernant les aspects liés à la modélisation des processus radiatifs. Le second chapitre regroupe des éléments techniques principalement liés à la gestion temporelle de la simulation, qui doit être considérée en liaison avec les autres codes décrivant les processus mécaniques et chimiques. Plusieurs variantes successives seront brièvement évoquées, qui ont débouché sur une version finale considérée comme optimum. Le troisième chapitre présente un ensemble d'applications illustratives dans des situations simples, à des fins de validation. Enfin, le dernier chapitre reprend de façon plus théorique et détaillée la question des conditions à la limite entre deux matériaux, et des équations qui régissent la transmission ou réflexion d'un rayon lumineux. Il fait apparaître certaines difficultés qui ont constitué un point d'achoppement pour une modélisation tout à fait générale.

# Chapitre 5

---

## Principe de la méthode de simulation

### 5.1 Introduction

La méthode de Monte Carlo qui a été retenue est une approche qui ne se situe pas au niveau du continu, où la résultante d'un très grand nombre d'événements au niveau atomique ou moléculaire est traduite par l'équation du transfert radiatif. A l'inverse, elle simule directement les processus élémentaires, dont les effets macroscopiques sont ensuite évalués par simple cumul ou moyenne statistique. Il est bien entendu hors de question de travailler avec une finesse qui permettrait de suivre l'émission et le devenir de chaque photon ou train d'onde émis, mais on cherche à en considérer un nombre suffisant pour parvenir à établir des valeurs statistiques représentatives. On parlera donc plutôt de "paquets" ou de "quanta" d'énergie, qui représente une valeur très supérieure à celle transporté par les photons.

On évite ainsi l'emploi de l'ETR, dont le caractère intégral-différentiel rend la résolution difficile et le codage difficilement transposable d'une situation à une autre, au profit d'un algorithme d'une grande souplesse. Une fois que les mécanismes élémentaires ont été codés, l'application dans une géométrie quelconque ne demande aucun effort supplémentaire. En outre, il est conceptuellement très simple d'introduire graduellement ou de substituer sous forme modulaire de nouveaux mécanismes ou modèles comportementaux, alors que chacune de ces modifications pourrait modifier substantiellement la forme du problème à résoudre dans une approche continue.

Les mécanismes de bases sont relativement simples, puisqu'ils se résument à l'émission, qu'on peut considérer comme volumique ou surfacique selon les cas, suivie de la propagation. Dans le cadre où nous nous plaçons, les propriétés des matériaux sont supposées uniforme par morceaux, c'est à dire entre deux passages d'interface (il est toutefois parfaitement concevable de songer à prendre en compte des gradients de propriétés, comme l'indice de réfraction, ce qui est une illustration de la souplesse de la méthode). La propagation s'opère donc en ligne droite, et ne demande donc le traitement que de deux types d'événements : la rencontre avec une interface et l'absorption.

Mentionnons d'emblée un point de vue qui a été choisi. A l'échelle d'une description

continue, beaucoup de mécanismes font intervenir des quantités fractionnaires. Ainsi, une partie de l'énergie portée par un faisceau sera réfléchiée par une interface, et l'autre partie transmise. De même, une partie de l'énergie du faisceau est absorbée lors du parcours d'une certaine distance dans un matériau semi-transparent.

Dans la mesure où les paquets que nous manipulons représentent en fait un très grand nombre de photons, il serait possible d'adopter ce point de vue. Ce serait facile pour l'absorption, le paquet laissant sur place une partie de son énergie et continuant avec le reste. Mais c'est beaucoup plus compliqué pour la réfraction/réflexion, qui demanderait de scinder le paquet en deux parties, et de suivre la trajectoire de chacune (incluant éventuellement d'autres scissions ultérieures). Ceci complique énormément la gestion et n'a pas été retenu. Les fractions réfléchies, transmises et absorbées sont donc considérées comme des probabilités de réflexion, transmission ou absorption *totales* pour le paquet considéré, et le caractère fractionnaire n'est récupéré qu'en moyenne. Ceci correspond du reste exactement aux mécanismes physiques réels au niveau corpusculaire et à la façon dont les lois de l'optique en rendent compte en moyenne statistique.

## 5.2 Support géométrique et distribution des propriétés

Dans cette courte section, nous mentionnons simplement comment est décrite la géométrie du milieu dans lequel nous opérons.

Toutes les propriétés et variables sont décrites et stockées sur la base d'un maillage cubique de l'espace. Il est à noter que le caractère cubique du maillage n'est pas une restriction de principe. Tout autre type de maillage, par exemple tétraédrique non structuré, est envisageable, bien qu'aucune démarche dans ce sens n'ait été faite ici. Parmi les opérations élémentaires qui vont être décrites dans la suite, la seule qui présenterait une difficulté supplémentaire (mais parfaitement surmontable) serait le calcul de la longueur du trajet et de la position de sortie d'un rayon pénétrant dans un élément de volume.

Le contenu du domaine de simulation est donc décrit par un tableau 3d  $[IND]$ , dont les éléments sont repérés par des coordonnées entières  $(i, j, k)$ . Chacun correspond à un élément de volume cubique, ou voxel, de dimension  $a^3$ , dont le contenu est supposé constitué d'un seul type de matériau, de caractéristiques uniformes (voir par exemple la figure 2.4). Ceci inclut les propriétés physiques (capacité calorifique, conductivité thermique, ...) et notamment radiatives (indice de réfraction, coefficient d'absorption, ...), mais également la température.

Tous les tableaux où sont stockés les paramètres et les variables d'état utilisent ce maillage comme support. Ces éléments de volume coïncident également avec les volumes de contrôle sur lesquels sont mesurés les bilans de flux thermique, convectifs et conductifs chez Debenest (2003) et Elayeb (2008) (ainsi que les termes source/puits d'origine chimique), et radiatifs dans notre travail. Le cumul de ces bilans est utilisé pour la mise à jour de la température de l'élément de volume correspondant, connaissant sa capacité

calorifique. La gestion temporelle de la prise en compte de ces bilans peut être conduite de diverses façons. Ceci sera traité en détail dans le Chapitre 6.

Il est à noter qu'il existe généralement une échelle caractéristique de la microstructure du milieu poreux, telle par exemple que le rayon typique  $R$  des constituants d'un milieu granulaire ou une taille typique de pore, et que dans le but de rendre compte assez fidèlement de la morphologie le pas d'espace  $a$  est pris suffisamment inférieur à cette échelle. Dans la pratique, le tableau  $[IND]$  contient donc généralement des ensembles assez importants d'éléments adjacents identiques, correspondant par exemple à l'ensemble d'un grain. Toutefois, rien ne s'oppose à ce que les propriétés varient d'un élément de volume à l'autre, sans aucune corrélation spatiale.

### 5.3 Emission

Suivant les cas, on peut être amené à considérer l'émission par un élément de surface d'un matériau opaque, ou l'émission volumique dans un milieu semi transparent.

#### 5.3.1 Emission surfacique

Dans le premier cas, la densité de flux émise est donnée par la loi de Stefan-Boltzmann (3.9),

$$E = n^2 \sigma T^4 \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.1)$$

où  $n$  est l'indice de réfraction du milieu transparent au voisinage de la surface. Cette loi est donnée ici pour un corps noir, et il conviendrait de multiplier ce flux par une émissivité inférieure à 1 dans un cas plus général.

Dans tout ce travail, on ne considère que des matériaux isotropes. L'émission totale est donc distribuée suivant une loi en  $\cos \theta$ , où  $\theta$  est l'angle entre la direction d'émission et la normale à la surface (loi de Lambert), c'est à dire que l'émission directionnelle est proportionnelle à la surface émettrice projetée sur le plan normal à la direction du rayonnement.

Il convient aussi de mentionner que cette émission totale est également distribuée dans le spectre des fréquences, suivant la loi de Plack (3.6). Cet aspect sera laissé de côté dans tout ce qui suit, pour simplifier la présentation. Toutefois, cela ne résulte pas d'une limitation du code de simulation, qui peut très simplement en tenir compte. Il y a deux façons de le faire. On peut d'une part découper le spectre en bandes de fréquences, pour lesquelles les propriétés radiatives des matériaux peuvent être considérées comme relativement constantes. On procédera alors à l'émission de quantas dont les fréquences seront choisies parmi un ensemble de valeurs discrètes, en proportion conforme à la loi de Planck. On peut également envisager d'émettre des quantas dont les fréquences sont tirées aléatoirement en accord avec la même loi, sans se restreindre à un ensemble de valeurs discrètes. Ceci impose de disposer non plus seulement d'un ensemble limité de valeurs des

propriétés radiatives en chaque point, mais de lois continues qui les donnent en fonction de la fréquence. Toutefois, dans les deux cas, le traitement de la propagation et de l'absorption du quantum sera rigoureusement identique, sous réserve d'utiliser les paramètres locaux appropriés. La présentation qui suit adopte donc un point de vue monochromatique, mais ce n'est pas une limitation du modèle.

Le champ de température étant supposé connu à un instant donné, la quantité  $\delta Q$  d'énergie émise par un élément de surface  $\delta S$  (qui en pratique vaut ici  $a^2$ ) d'un matériau à la température locale  $T$  pendant un intervalle de temps  $\delta t$  vaut donc

$$\delta Q = n^2 \sigma T^4 \delta S \delta t \quad [\text{J}] \quad (5.2)$$

Une fois choisie la valeur  $q_r$  des quantas d'énergie pour la simulation, selon des modalités qui seront détaillées plus loin (Chapitre 6), le nombre de quantas à émettre depuis cet élément de surface est simplement  $\delta Q/q_r$ . Ce nombre n'est généralement pas entier. Il comporte une partie entière  $n_q$  et une partie fractionnaire  $f_q$ . Les  $n_q$  quantas sont émis depuis une position tirée aléatoirement sur l'élément de surface, avec une distribution uniforme, dans une direction aléatoire selon la loi en  $\cos \theta$ , et rappelons le éventuellement avec une fréquence associée à chacun. La partie fractionnaire est traitée comme une probabilité d'émettre un quantum supplémentaire, suivant les mêmes modalités, si bien que la valeur souhaité  $\delta Q$  est obtenue en moyenne statistique.

A chaque émission, le bilan thermique local  $\mathcal{B}(i, j, k)$  de l'élément de volume sous-jacent est décrémenté d'une quantité  $q_r$ .

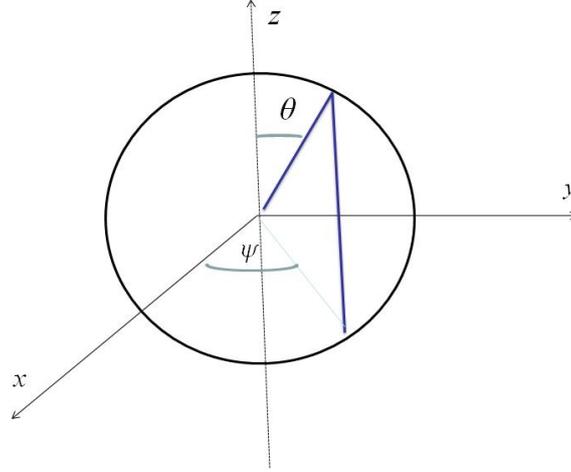
### 5.3.2 Emission volumique

Dans le cas d'un matériau semi-transparent, il faut prendre en compte le taux d'émission volumique, dont l'expression est donnée par (3.19)

$$E = 4n^2 \kappa \sigma T^4 \quad [\text{W/m}^3] \quad (5.3)$$

où  $\kappa$  est le coefficient d'absorption local. De la même façon que précédemment, on suppose que ce taux d'émission global se distribue de façon isotrope.

Il convient de noter que cette émission volumique ne s'ajoute pas mais se substitue à l'émission surfacique aux frontières du matériau. En effet, en intégrant ce qui parvient à la surface d'un demi-espace après émission selon (5.3) et atténuation par absorption au cours du parcours vers la surface, on obtient exactement (5.1). L'émission surfacique n'est donc que la résultante de ce qui parvient à la surface depuis l'épaisseur d'un matériau, à partir d'une couche pariétale d'autant plus mince que le matériau est absorbant ( $\kappa$  grand). Dans le cas d'un matériau quasi opaque, ou d'un point de vue plus pratique pour nous, quand l'élément de volume est optiquement épais ( $\kappa a \gg 1$ ), il est plus simple et suffisant



**Figure 5.1.** Système de coordonnées sphériques pour la détermination des directions d'émission à partir d'un élément de volume ou de surface. Dans le second cas, l'axe  $z$  est aligné avec la normale à la surface.

de n'en retenir que le comportement apparent d'un phénomène surfacique. Dans le cas inverse, la prise en compte du caractère volumique devient nécessaire.

Au cours d'un pas de temps, un élément de volume  $\delta V$  ( $= a^3$ , en pratique), émettra une quantité d'énergie

$$\delta Q = 4n^2 \kappa \sigma T^4 \delta V \delta t \quad [\text{J}] \quad (5.4)$$

On détermine de la même façon que dans le cas surfacique le nombre  $\delta Q/q_r$  de quanta à émettre, et leur traitement est identique, à la seule exception que la position d'origine est ici tirée aléatoirement et uniformément dans le volume de l'élément, au lieu de sa surface.

A nouveau, à chaque émission, le bilan thermique local  $\mathcal{B}(i, j, k)$  de l'élément de volume est décrémenté d'une quantité  $q_r$ .

D'un point de vue pratique, le tirage d'une direction aléatoire d'émission suivant une distribution isotrope est effectuée de la façon suivante. On se place dans un système de coordonnées sphériques (figure 5.1). A partir de deux nombres  $X_\psi$  et  $X_\theta$  obtenus par tirage aléatoire uniforme sur l'intervalle  $[0, 1]$ , on détermine les coordonnées angulaires  $0 \leq \psi \leq 2\pi$  et  $0 \leq \theta \leq \pi$  de la direction d'émission par

$$\psi = 2\pi X_\psi, \quad \theta = \text{acos}(1 - 2X_\theta) \quad (5.5)$$

Une procédure similaire est appliquée pour l'émission surfacique, mais comme l'énergie rayonnée doit être proportionnelle à  $\cos \theta$ , quand l'axe  $z$  est aligné avec la normale sortante à la surface, on applique cette fois

$$\psi = 2\pi X_\psi, \quad \theta = \frac{1}{2} \text{acos}(1 - 2X_\theta) \quad (5.6)$$

ou de façon équivalente,

$$\psi = 2\pi X_\psi, \quad \theta = \text{asin}(\sqrt{X_\theta}) \quad (5.7)$$

qui donnent  $0 \leq \psi \leq 2\pi$  et  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ .

Enfin, une alternative à (5.5) plus économique et appliquée en pratique est de tirer directement les coordonnées  $(p_x, p_y, p_z)$  du vecteur directeur  $\mathbf{p}$  uniformément dans le cube unité  $[-1, +1]^3$ , de rejeter les tirages pour lesquels  $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 > 1$  afin de se ramener à la sphère unité, puis de normer  $\mathbf{p}$ .

## 5.4 Propagation

Une fois émis, la vie du quantum va se décomposer en une suite d'intervalles de temps<sup>1</sup> correspondant aux traversées successives d'éléments de volumes. Les interfaces entre ces volumes peuvent correspondre ou non à de réelles interfaces optiques entre des matériaux différents, donnant alors lieu à des réflexions/réfractions. Mais nous allons considérer en premier lieu l'absorption qui peut survenir dans le volume des éléments traversés.

### 5.4.1 Traversée d'un élément de volume, Absorption

Lorsqu'un paquet pénètre (ou est émis) dans un élément de volume à une position  $\mathbf{x}_0 = (X_0, Y_0, Z_0)$ , avec une direction de propagation  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ , la première tâche à effectuer est de déterminer la position de sortie  $\mathbf{x}_1 = (X_1, Y_1, Z_1)$  de leur trajectoire, et la distance  $\delta l = \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|$ .

La forme cubique des éléments de volume rend cette opération très simple. Si on se trouve dans le cube  $(i, j, k)$ , qui correspond au volume  $(x, y, z) \in [i - 1, i] \times [j - 1, j] \times [k - 1, k]$ , il suffit d'examiner pour quelle valeur positive de  $s_x$  la quantité  $x_0 + sp_x$  prend la valeur  $i - 1$  ou  $i$  (simil. pour  $y$  et  $z$ ). La plus petite de ces valeurs  $\delta l = \min(s_i)$  correspond à l'interception de la première paroi du cube rencontrée, et la position de sortie est  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \delta l \mathbf{p}$ .

Au cours de ce trajet, les photons peuvent être absorbés, ce qui dans une description continue se traduit par une atténuation de l'intensité d'un rayonnement donnée par (3.17). Dans notre description discrète, ceci est reproduit par une éventuelle absorption du paquet, avec une probabilité  $1 - \exp(-\kappa \delta l)$ . Dans ce cas, le bilan thermique local  $\mathcal{B}(i, j, k)$  de l'élément de volume est incrémenté d'une quantité  $q_r$ .

Notons que nous ne cherchons pas à déterminer à quel position exacte le paquet est absorbé, entre  $\mathbf{x}_0$  et  $\mathbf{x}_1$ , puisque ceci n'intervient pas dans le bilan d'énergie, qui est évalué à l'échelle du cube entier.

<sup>1</sup> Le terme "temps" est utilisé ici plus pour se repérer dans la chronologie des événements que dans un sens physique réel, puisque la propagation du rayonnement est quasi instantanée en comparaison des autres mécanismes dans le système. Le seul vrai temps qui intervient est la période  $\delta t$  sur laquelle les bilans des émissions/absorptions sont évalués.

Mentionnons également le cas particulier où le matériau dans l'élément de volume est opaque. L'absorption est alors automatique, sans qu'il soit besoin de calculer ce que serait sa trajectoire.

Si aucune absorption n'a lieu, la simulation de la propagation du paquet va se poursuivre. Si le cube dans lequel il pénètre en  $\mathbf{x}_1$  est de même nature que celui qu'il quitte (pas d'interface optique), on va simplement reproduire les opérations qui viennent d'être décrites. Si  $\mathbf{x}_1$  se trouve sur une interface, on applique les modalités décrites dans le paragraphe suivant.

Il est approprié d'évoquer ici la diffusion, puisque c'est à ce stade qu'elle pourrait éventuellement être introduite. Ce n'est pas le cas dans l'implémentation actuelle du simulateur, mais ce pourrait être fait sans difficulté selon les lignes suivantes.

Dans un matériau diffusif, les interactions d'un photon avec la matière peuvent causer une déviation de sa trajectoire. La probabilité d'un tel événement est quantifiée par le coefficient de diffusion  $\sigma_{s,\nu}$ , et la distribution des directions de propagation après diffusion est décrite par la fonction de phase  $\Phi$  (voir Section 3.2.2).

Il est aisé de déterminer la probabilité qu'une diffusion survienne, de la même façon qu'on l'a fait pour l'absorption, en remplaçant simplement  $\kappa$  par  $\sigma_{s,\nu}$ . Notons qu'il est important dans ce cas de savoir où se produit l'événement, pour la poursuite du calcul de la trajectoire, mais il n'est pas difficile de fixer cette position stochastiquement en conformité avec ce qui est attendu d'après la valeur de  $\sigma_{s,\nu}$ . A partir de cette position, la nouvelle direction de propagation peut également être engendrée conformément à  $\Phi$ , et le calcul poursuivi à partir de ces nouvelles valeurs de  $\mathbf{x}_0$  et  $\mathbf{p}$ .

Les matériaux très diffusifs, pour lesquels  $\sigma_{s,\nu}a \gg 1$ , demanderaient un traitement particulier puisqu'il serait coûteux et inutile de suivre un très grand nombre de déviations à l'intérieur d'un même élément de volume. Il serait préférable dans ce cas d'appliquer une loi de diffusion apparente globale, pour l'ensemble de l'élément de volume, résultante de ces diffusions élémentaires successives. Cette loi globale pourrait être aisément déterminée à partir des statistiques des résultats d'un ensemble de simulations détaillées dans un élément de volume unique.

#### 5.4.2 Passage des interfaces, Réfraction

Les rencontres avec des interface peuvent donner lieu à une réflexion ou à une transmission avec réfraction, dont la description en termes optiques, c'est à dire en terme de répartition des flux d'énergies réfléchies et transmises est donnée par les lois de Snell-Descartes et de Fresnel (3.20, 3.21).

Dans notre cas, nous ne répartissons pas cette énergie en une part réfléchié et une part transmise, mais nous interprétons la réflectivité comme la probabilité que le paquet incident soit (entièrement) réfléchi. L'application de (3.20, 3.21) ne présente pas de difficulté

particulière, et le calcul peut se poursuivre avec une nouvelle valeur de  $\mathbf{p}$  et le  $\mathbf{x}_1$  final de la traversée précédente qui joue le rôle de  $\mathbf{x}_0$  pour celle qui commence (éventuellement dans le même élément de volume dans le cas d'une réflexion).

Rappelons à toutes fins utiles que lors du passage de l'interface, la fréquence associée au rayonnement est invariante, même si la longueur d'onde varie, puisque  $n_1\lambda_1 = n_2\lambda_2 = c_0\nu$ .

Il convient toutefois de faire ici plusieurs remarques.

En premier lieu, les lois (3.20, 3.21) s'applique à des surfaces idéales, optiquement lisses, c'est à dire de rugosité négligeable à l'échelle de la longueur d'onde (micronique). Nous supposons cette condition vérifiée, ce qui permet d'utiliser les lois de l'optique géométrique. En revanche, les éléments qui constituent les milieux poreux que nous considérons dans nos premières applications sont des grains de roche concassée, de taille millimétrique et de forme irrégulière. Même en supposant que leur surface peut être considérée comme localement "plane" à l'échelle de  $\lambda$ , elle est irrégulière aux échelles intermédiaires  $10\mu\text{m}\sim 100\mu\text{m}$ . Dans le principe, ceci peut être aisément rendu en randomisant l'orientation  $\mathbf{n}$  de la normale à la surface rencontrée, pour l'application de (3.20, 3.21), par rapport à une direction moyenne local  $\bar{\mathbf{n}}$ . Toutefois, ceci n'a pas été implémenté, faute de statistiques orientationnelles pour l'état des surfaces des matériaux réels.

Enfin, dans la description géométrique discrétisée que nous employons, les surfaces sont représentées par des éléments carrés orientés perpendiculairement aux axes de coordonnées  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Ceci altère bien sûr leurs propriétés optiques, vis à vis par exemple d'une réflexion spéculaire. Il n'y a pas ici de solution simple, hormis l'emploi de maillages de l'espace qui suivent mieux les surfaces obliques. Comme on l'a déjà dit, il n'y a aucune restriction dans la méthode de Monte Carlo qui est décrite ici à l'usage d'autres maillages, tels que tétraédriques non structurés, qui pourraient offrir une bien meilleure description des interfaces. Toutefois, dans le cas d'interfaces très diffusantes, ou comme dans toutes les applications présentées dans la Partie 3 du mémoire, où le solide est noir, opaque et émet de façon isotrope, cette représentation "en escalier" des surfaces obliques n'a pas d'incidence importante, comme le montre le bon accord entre les résultats obtenus pour une sphère (discrétisée) et les prédictions théoriques (voir Section 7.2.2).

L'autre point à considérer est de nature plus fondamentale.

Les lois (3.20, 3.21) s'appliquent stricto-sensu seulement entre des matériaux non-absorbants. Dans le cas où l'un des matériaux (ou les deux) est semi-transparent, une généralisation est nécessaire. De façon très grossière, elle consiste à appliquer (3.20, 3.21) avec les indices de réfractions remplacés par les indices complexes (voir éq. 3.4), mais ceci cache des difficultés et des questions non résolues qui sont étudiées en détail dans le Chapitre 8. On peut toutefois avancer l'argument suivant, qui peut justifier l'application

des lois de Snell-Descartes et de Fresnel sous leur forme simple (3.20, 3.21).

Considérons l'épaisseur optique  $\kappa a$  des éléments de volume de la discrétisation spatiale. Si elle est importante,  $\kappa a \gg 1$ , les photons pénétrant dans le milieu n'ont aucune chance de traverser le premier volume rencontré, et il est équivalent et bien plus économique de considérer ce matériau comme opaque. D'un point de vue pratique, la question concernant l'applicabilité de (3.20, 3.21) se pose donc uniquement si  $\kappa a \leq O(1)$ . Examinons alors l'importance relative de la partie imaginaire de l'indice complexe, en évaluant le rapport  $k/n$ .

$$\frac{k}{n} = \frac{\kappa \lambda}{4\pi n} = [\kappa a] \left[ \frac{\lambda}{a} \right] \left[ \frac{1}{4\pi n} \right] \quad (5.8)$$

Le premier terme à droite de (5.8) est au plus d'ordre 1, le second est en pratique inférieur à 1 (avec par exemple  $a \sim 50\mu\text{m}$ , dans nos applications), et le troisième est nécessairement inférieur à  $1/4\pi$ . Il ressort donc que dans la pratique, dans les cas où l'absorption est suffisamment modérée pour qu'il ne soit pas équivalent de la considérer comme totale, la partie imaginaire de l'indice complexe est de l'ordre de 1% de sa partie réelle. Ceci suggère que l'application de (3.20, 3.21) avec les indices réels et non complexes est une approximation raisonnable.

## 5.5 Assemblage, choix des paramètres numériques

L'assemblage des tâches élémentaires présentées dans les paragraphes précédents est relativement simple. Les simulations sont conduites par pas de temps successifs. Au début d'un pas de temps, tout l'état du système est connu, et notamment le champ de température. Un balayage complet du domaine est effectué (boucle spatiale), où l'on détermine pour chaque élément de volume et/ou de surface l'énergie émise, et donc le nombre de paquets à émettre. Chacun est émis puis propagé selon les modalités qui ont été décrites, en gardant trace des bilans d'énergie des volumes de contrôles, qui sont décréments (lors d'une émission) ou incrémentés (lors d'une absorption) de la valeur du quantum  $q_r$ . Une fois cette passe effectuée, le champ de température peut être mis à jour en fonction de ces bilans. Les variations de température sont données par

$$T(i, j, k, t + \delta t) = T(i, j, k, t) + \frac{\mathcal{B}(i, j, k)}{\rho c_p a^3} \quad (5.9)$$

où  $\rho c_p$  est la capacité calorifique volumique locale. On tient compte bien entendu dans  $\mathcal{B}(i, j, k)$  des bilans des autres processus de transfert de la chaleur pendant la même période de temps, et le cas échéant des sources/puits d'origine chimique. Par exemple, dans la Partie 3 du mémoire, on introduira la conduction thermique, dont les flux seront évalués par une simple application d'une formulation aux différences finies.

La façon dont sont fixées les valeurs de paramètres numériques tels que le pas de temps  $\delta t$  et le quantum  $q_r$  est décrite dans le chapitre suivant, de même que la gestion

dynamique des paramètres et le suivi de l'évolution des températures qui peut prendre une forme un peu plus subtile que la variante la plus simple mentionnée ci-dessus.

## Chapitre 6

---

### Gestion de la simulation

Le principe de la simulation numérique a été décrit dans le chapitre précédent. Nous détaillons ici quelques éléments plus techniques, concernant des aspects pratiques de la gestion des opérations. Cela concerne principalement le choix du pas de temps  $\delta t$ , du quantum  $q_r$ , et les modalités de l'actualisation du champ de température.

La préoccupation constante est d'optimiser le coût des calculs, en adaptant ces paramètres aux conditions actuelles du système. Pour ce faire, le principal critère est la définition du niveau de bruit acceptable dans la situation courante. Différentes versions sont présentées successivement, de la plus simple à la plus élaborée.

Dans tous les cas, on suppose qu'on opère sur l'intervalle de temps  $[t, t + \Delta t]$ . On cherche donc à simuler l'évolution du système d'un instant  $t_1$  à l'instant  $t_2 = t_1 + \Delta t$ . Comme la méthode est explicite en temps (les flux radiatifs sont évalués en fonction de la température initiale), d'importantes imprécisions peuvent survenir si l'évolution de la température n'est pas suivie et prise en compte avec assez de finesse. On est donc amenés à découper la période  $\Delta t$  en pas de temps plus fins  $\delta t$ , au cours desquels on peut considérer que la température varie suffisamment peu pour que l'évaluation des flux en fonction de la température initiale reste raisonnablement précise.

La période  $\Delta t$  peut correspondre au pas de temps d'un simulateur plus général, qui prend en compte d'autres mécanismes (convection, conduction, réactions chimiques). Il n'est alors pas forcément utile que  $\delta t$  soit inférieur à  $\Delta t$ , puisque les variations locales de  $T$  pendant  $\Delta t$  sont déjà supposées être faibles (dans le cas contraire, cela signifierait que les autres mécanismes sont mal décrits, et tout particulièrement les cinétiques chimiques qui sont très sensibles à la température). Néanmoins, on peut aussi simuler uniquement les transferts radiatifs, et dans ce cas  $\Delta t$  représente toute la période sur laquelle on souhaite suivre l'évolution du système, sans limitation *a priori* des variations possibles de  $T$ . Enfin, dans un cas intermédiaire qui sera par exemple le cadre des applications dans la Partie 3, on peut considérer simplement le rayonnement et la conduction. Avec une dépendance linéaire à la température, les échanges conductifs sont beaucoup moins sensibles aux variations de  $T$  que les échanges radiatifs qui dépendent de  $T^4$ . Il est donc possible d'évaluer les premiers avec une périodicité ( $\Delta t$ ) plus grossière que les seconds.

## 6.1 Pas de temps et quantum fixes

Cette variante fut la première mise en place car la plus simple, et elle a permis de tester les autres éléments du code de simulation. Toutefois, elle fut ensuite rapidement abandonnée, car en ne présentant aucun caractère adaptatif elle ne permet aucune optimisation.

On utilise ici une température de référence  $T_{MAX}$ , estimation de la température maximale susceptible d'exister quelque part dans le système, au cours de toute la période. Par exemple, en l'absence de terme source, quand on simule simplement la relaxation vers l'équilibre à partir d'un état initial non isotherme, il s'agit simplement de la température maximale initiale.

La puissance émise par un élément de volume à cette température vaut<sup>1</sup>

$$P_{MAX} = 4.\kappa\sigma n^2 T_{MAX}^4 a^3 \quad (6.1)$$

Le critère qu'on se fixe est que pendant le pas de temps  $\delta t$ , l'émission n'excède pas une fraction  $\eta$  de l'énergie interne de cet élément de volume, qui vaut  $\rho c_p T_{MAX} a^3$ . Il en découle

$$\delta t = \frac{\eta \rho c_p}{4\kappa\sigma n^2 T_{MAX}^3} \quad (6.2)$$

Dans tous les éléments de volume à une température inférieures à  $T_{MAX}$ , la fraction de l'énergie émise est inférieure à  $\eta$ , puisqu'elle se comporte comme  $(T/T_{MAX})^3$ .

On a donc ici un critère extrêmement fort, qui assure que la température ne varie nulle part de plus  $\eta T_{MAX}$  pendant  $\delta t$ . Notons que puisque  $T_{MAX}$  est constant, on peut exprimer ceci en disant qu'on ne tolère nulle part de variation de température plus grande qu'une quantité prescrite absolue  $\Delta T_{MAX}$  (qui vaudrait  $\eta T_{MAX}$ ).

Un élément de volume à  $T_{MAX}$  émettrait donc pendant le pas de temps une quantité d'énergie

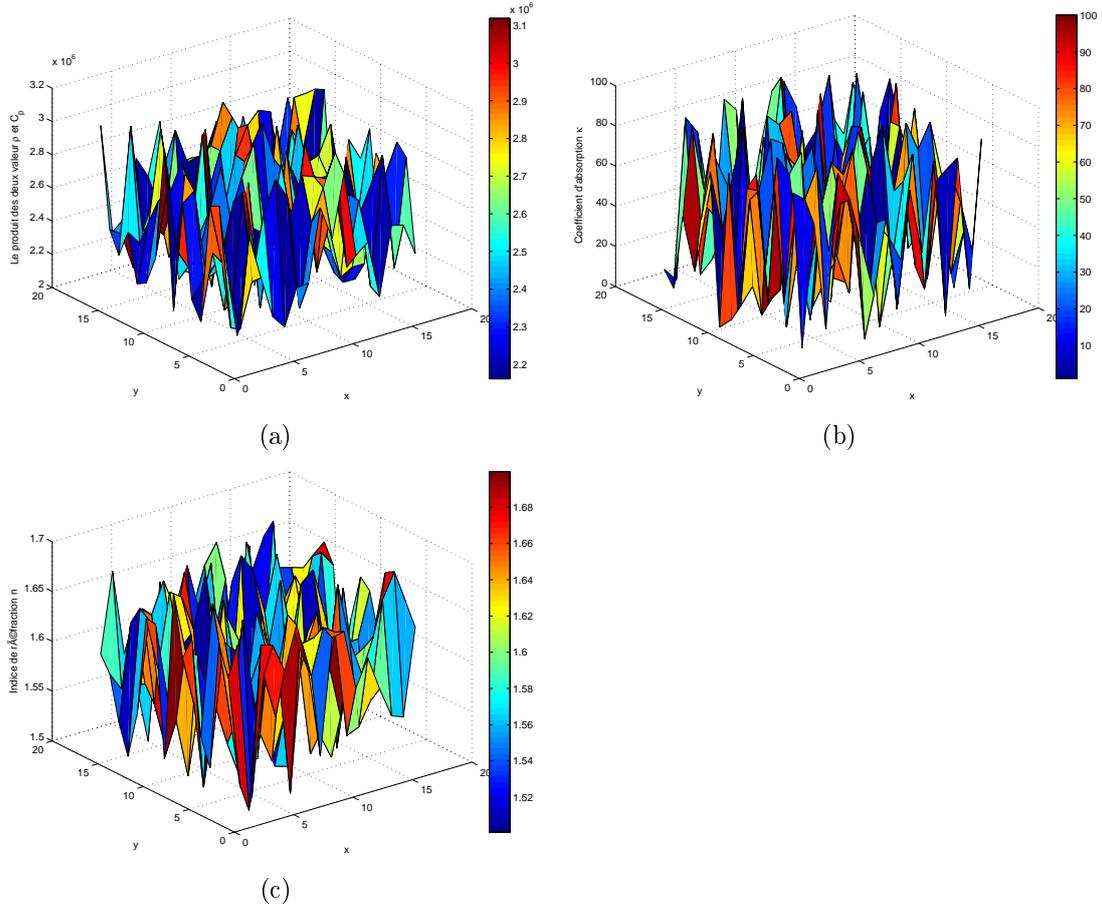
$$Q_{MAX} = P_{MAX} \delta t = \eta (\rho c_p a^3 T_{MAX}) \quad (6.3)$$

Cette énergie sera émise dans tout un spectre de directions, et éventuellement de fréquences. Pour permettre une bonne description statistique, il est donc souhaitable de la découper en quantités élémentaires  $q_r$ . Si on considère qu'il faut pour cela manipuler un nombre  $N_{MAX}$  de paquets d'énergie, on fixera le quantum selon

$$q_r = \frac{P_{MAX} \delta t}{N_{MAX}} = \frac{\eta (\rho c_p a^3 T_{MAX})}{N_{MAX}} \quad (6.4)$$

Enfin, les bilans de flux sont pris en compte à la fin de chaque pas de temps  $\delta t$ , et la température est actualisées conformément à l'équation (5.9).

<sup>1</sup> Dans tout ce chapitre, on raisonne en termes d'émission volumique, donc pour des milieux semi-transparents. Toutefois, l'émission surfacique pour des matériaux opaques peut être traitée de la même façon, et toutes les méthodes et formules énoncées ont leurs exactes contreparties dans cette situation.



**Figure 6.1.** Champs de capacité calorifique volumique  $\rho c_p$  (a), de coefficient d'absorption  $\kappa$  (b) et d'indice de réfraction  $n$  (c), pour le calcul d'une relaxation à partir d'un état initial non isotherme.

Un exemple illustratif est présenté ci-dessous. On simule la relaxation vers l'équilibre à partir d'un état initial non-isotherme. On opère dans un milieu infini, en utilisant des conditions de périodicité. La cellule unité a pour dimension  $(Nc_x a, Nc_y a, Nc_z a)$ , avec  $Nc_x = Nc_y = 16$ , et  $Nc_z = 2$ . Les éléments de volume ont une dimensions  $a=0.1m$ ,

Les propriétés physiques du milieu sont fixées aléatoirement, sans corrélation spatiale (et sans prétention de réalisme), dans les plages suivantes

$$2.1 \cdot 10^6 \leq \rho c_p \leq 4.2 \cdot 10^6 \text{ J/K/m}^3 \tag{6.5a}$$

$$0.625 \leq \kappa \leq 2.5 \text{ m}^{-1} \tag{6.5b}$$

$$1 \leq n \leq 1.5 \tag{6.5c}$$

Leurs distribution spatiale dans une section  $(x, y)$  est montrée dans la figure 6.1.

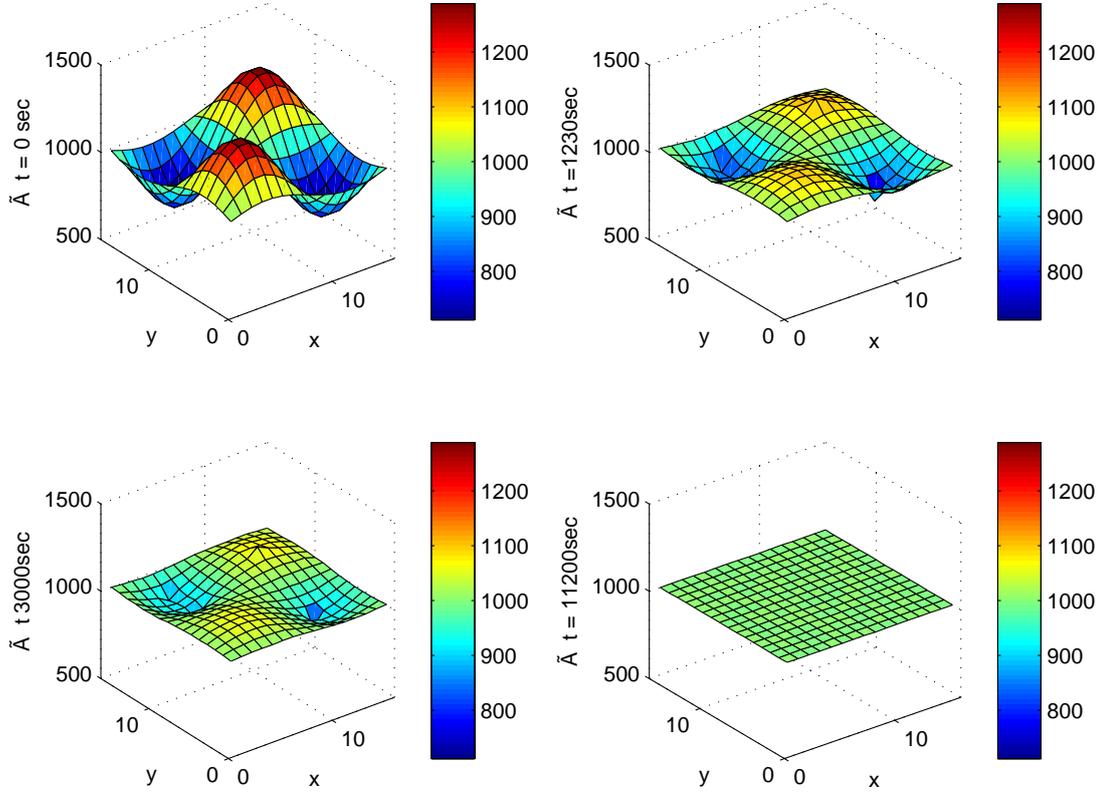


Figure 6.2. Champs de températures en quatre instants successifs.

Le champ de température initiale est imposé selon

$$T(x, y) = T_m + \Delta T \sin\left(\frac{2\pi x}{N_{c_x} a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{N_{c_y} a}\right) \quad (6.6)$$

avec  $T_m=1000\text{K}$  et  $\Delta T = 300\text{K}$ . Les simulations reproduisent bien le retour à l'équilibre thermique à partir de cet état, comme le montrent les champs de températures en quelques instants successifs montrés dans la figure 6.2. Il est à noter que dans cet exemple, les propriétés physiques varient tellement que l'épaisseur optique des éléments de volume peut être faible ( $< O(1)$ ) ou très grande ( $\sim O(10^1)$ ).

## 6.2 Paramètres adaptatifs

Le mode de gestion simple décrit dans la section précédente fonctionne donc, mais il n'est pas satisfaisant du point de vue de ses performances.

Son défaut le plus évident est que la valeur  $T_{MAX}$  est un extremum qui n'est pas nécessairement représentatif de l'état du système à un instant donné. Par exemple, dans

la situation de la figure 6.2, il est fixé à 1300K qui est la température initiale maximale. Mais quand on approche de l'équilibre,  $T \approx 1000\text{K}$  dans tout le domaine, et l'estimation du taux maximal d'émission est surévaluée d'un facteur  $1.3^4$ , *i.e.*, proche de 3.

Par ailleurs, quand on tente de quantifier une variation maximale de température, on tient compte de l'émission par l'élément de volume, mais pas de l'absorption de rayonnement issu d'autres parties du domaine, qui vient compenser en partie cette perte d'énergie interne, ni même de l'autoabsorption, quand l'élément n'est pas optiquement mince.

Il n'est pas évident d'intégrer l'absorption dans une estimation *a priori* du bilan, puisqu'elle dépend de valeurs non locales, mais le premier point peut en revanche être aisément pris en compte. Il suffit pour cela de relever à la fin de chaque pas de temps la valeur maximale réelle  $T_{max}$  de la température, et de l'utiliser dans (6.2, 6.4) à la place de la valeur fixe  $T_{MAX}$ , pour déterminer les paramètres à utiliser pour le pas de temps suivant.

En réalité, ce n'est du reste pas  $T_{max}$  qui est déterminant, mais sa valeur en relation avec les propriétés physiques locales. On peut donc évaluer un pas de temps selon un critère du type de (6.2) pour chaque élément de volume, en fonction de la température et des propriétés locales, et retenir la valeur minimale sur tout le domaine

$$\delta t = \text{Min}_{i,j,k} \left\{ \frac{\eta \rho c_p}{4\kappa \sigma n^2 T^3} \right\}_{i,j,k} \quad (6.7)$$

Une fois que  $\delta t$  est ainsi déterminé, on peut fixer le quantum  $q_r$  pour le pas de temps à venir, par exemple en utilisant (6.4). Notons qu'en indexant la valeur du quantum sur le taux d'émission maximal, pour qu'il corresponde à un nombre prescrit de paquets par pas de temps, on peut aboutir à des quantas de plus en plus petits si le système se refroidit. Il en découle un gros volume de calcul peu utile, puisqu'on manipulera en gros le même nombre de paquets que le système soit chaud (avec des transferts radiatifs significatifs) ou froid (alors que ces transferts sont probablement négligeables). On peut donc plutôt choisir de donner une valeur fixe au quantum  $q_r$ . Ainsi, un faible taux d'émission dans un système froid ne demandera l'émission que d'un petit nombre de paquets.

On distingue clairement ici les critères différents qui régissent les choix de  $\delta t$  et de  $q_r$ . Le pas de temps doit être fixé pour suivre fidèlement les évolutions de la température. Sa valeur n'influence pas directement le coût du calcul, qui ne dépend que du nombre de paquets à traiter. D'un autre côté, la valeur du quantum détermine ce nombre de paquets et le coût du calcul. Elle doit être choisie sur la base d'un compromis entre le coût et la stabilité statistique.

### 6.3 Méthode quasi continue

La méthode qui est présentée ici, et qui a finalement été retenue, n'est pas dans son principe une extension des précédentes. En un sens, elle en est à l'opposé, puisqu'on

impose ici en premier lieu la valeur  $q_r$  du quantum, et que la valeur du pas de temps en est ensuite déduite.

La valeur du quantum est d'abord fixée *a priori*, pour atteindre un niveau de résolution en température prescrit, noté  $\delta T$ . Ceci est une première raison pour l'appellation "quasi continue", puisque cette résolution peut être fixée arbitrairement, sans limitation de finesse. On souhaite que l'émission (ou l'absorption) d'un paquet dans un élément de volume n'entraîne pas de variation de température plus grande que  $\delta T$ . En conséquence, on prendra

$$q_r = \text{Min}_{i,j,k} \{ \rho c_p \}_{i,j,k} a^3 \delta T \quad (6.8)$$

Notons que cette valeur dépend bien sûr des caractéristiques (propriétés physiques) du système, mais pas du champ de température courant, et qu'en principe elle ne varie donc pas au cours de la simulation. Toutefois, on verra plus loin qu'on peut choisir de la faire varier, selon le niveau de bruit qu'on est prêt à tolérer en différentes phases de la simulation.

Dans un second temps, on fixe le pas de temps, et il n'y a aucune raison lié au coût de calcul de chercher à le prendre le plus grand possible. En effet, si l'état du système fait que la description des flux radiatifs nécessite l'émission de, disons,  $10^6 q_r$  durant une seconde, il est quasiment équivalent en termes de coût de calcul de les émettre par groupes de  $10^2$  pendant  $10^4$  pas de temps de 0.1ms ou par groupe de  $10^4$  pendant  $10^2$  pas de temps de 10ms. En outre, allonger le pas de temps revient à suivre moins fidèlement l'évolution des températures locales, et donc à perdre de la précision.

On peut donc prendre  $\delta t$  très faible, et en pratique on le fixe de façon à ce qu'il corresponde à l'émission d'un paquet dans l'élément de volume où l'émission est maximale

$$\delta t = \frac{q_r}{\text{Max}_{i,j,k} \{ (4\kappa\sigma n^2 a^3 T^4) \}_{i,j,k}} \quad (6.9)$$

Ainsi la quasi totalité des éléments de volume sont amenés à émettre moins d'un paquet pendant  $\delta t$ . Rappelons que dans ce cas, ce nombre fractionnaire est traité comme la *probabilité* d'émettre un paquet entier (voir Section 5.3.1).

Il en résulte un léger surcoût, car on est très fréquemment amenés à balayer tout le domaine, pour opérer un simple test qui le plus souvent décide qu'il n'y a aucune opération à effectuer. Il peut devenir significatif si le domaine est très grand, et que les zones émettrices sont de faible étendue (points chauds). Dans ce cas, on peut augmenter  $\delta t$  de façon à ce que l'émission maximale soit par exemple de 10 paquets par pas de temps. Toutefois, le coût de ces tests est très faible en regard de celui du calcul de la propagation d'un paquet, et nous n'avons jamais eu à user de cette possibilité.

Ce type de gestion a des avantages majeurs.

- Dans un système "froid", avec des taux d'émission très faible, les pas de temps seront automatiquement très longs (limités seulement par la périodicité  $\Delta t$  de l'éventuelle application plus générale qui appelle ce module);

- Les bilans d'énergie sont appliqués selon (5.9) très souvent, après transfert d'un petit nombre de paquets, et non après cumul d'un important défaut de bilan<sup>2</sup>. Ceci est la deuxième raison pour l'appellation "méthode quasi continue".

On a donc avec cette approche, dans des conditions optimales pour le coût de la simulation, la possibilité de fixer arbitrairement la finesse de la description des températures, et la résolution temporelle s'y adapte d'elle même, en mettant à jour la température chaque fois que des variations excédant cette finesse se produisent.

Rappelons finalement que cette finesse, quantifiée par  $\delta T$ , peut être adaptée au cours d'un calcul. Par exemple, dans les simulations de la Partie 3, on est beaucoup plus intéressé par l'état final stationnaire que par le transitoire initial, qui est pourtant coûteux à simuler. On peut donc débiter le calcul avec une valeur de  $\delta T$  importante (typiquement 1 ou 2 K), qui "dégrossit" à moindre coût, et conclure avec une valeur plus fine (1/2, voire 1/8 K), pour réduire le niveau de bruit dans la phase finale. Avec l'expérience, on a même pu mettre en place une procédure autoadaptative pour fixer  $\delta T$ , pour le type de problèmes qu'on traite dans ce cas.

<sup>2</sup> En réalité, ils ne sont plus appliqués lors d'une passe générale à la fin du pas de temps, mais directement convertis en variation de température lors de chaque émission/absorption élémentaire, ce qui est plus économique compte tenu du petit nombre d'événement pendant un pas de temps.

# Chapitre 7

---

## Validations, Applications dans des situations simples

Dans ce chapitre nous appuyons sur quelques applications très simples, à des fins de validation et pour explorer l'influence de quelques paramètres numériques.

### 7.1 Paramètres de discrétisation

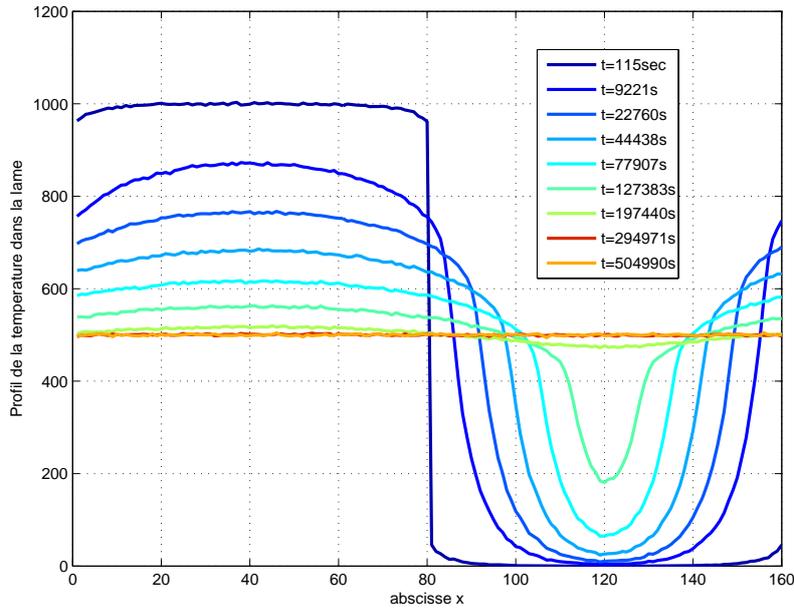
Nous examinons ici l'influence d'une part de la discrétisation spatiale quantifiée par le pas  $a$  du maillage cubique, et d'autre part le niveau de bruit en relation avec la valeur du quantum  $q_r$ .

#### 7.1.1 Discrétisation spatiale

Du point de vue des transferts radiatifs, la maille  $a$  est à considérer en relation avec le coefficient d'absorption  $\kappa$ . C'est l'épaisseur optique (adimensionnelle)  $\kappa a$  qui est le paramètre déterminant.

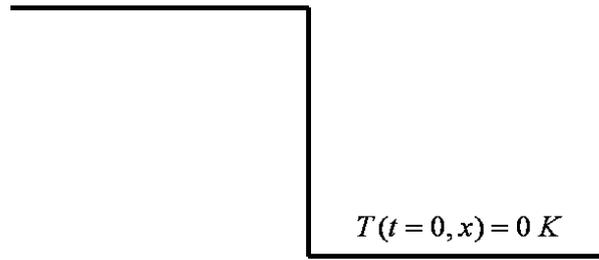
Nous savons déjà que si  $\kappa a \gg 1$ , l'élément de volume est quasiment opaque, et qu'il est dans ce cas plus économique et tout aussi réaliste de ne considérer ses échanges que sous leur forme apparente d'un phénomène surfacique. Dans ce cas,  $a$  influe sur la finesse et le réalisme de la description géométrique, mais pas plus que dans toute autre application, et notamment que dans celle décrivant le smoldering qui fait éventuellement appel au module qui nous intéresse.

En revanche, dans le cas de matériaux semi-transparents, on doit craindre un effet de diffusion numérique. Il prend sa source dans le fait que lors de l'absorption d'un paquet, la position exacte de l'absorption n'est pas spécifiée. L'énergie absorbée est donc implicitement étalée uniformément sur tout l'élément de volume. Il ne peut d'ailleurs en aller autrement, puisque les températures ne sont pas définies avec une résolution spatiale meilleure que  $a$ , et on retrouve le même problème par exemple dans la représentation de l'opérateur différentiel Laplacien qui apparaît pour la conduction dans une discrétisation



(a)

$$T(t = 0, x) = 1000 \text{ K}$$



$$T(t = 0, x) = 0 \text{ K}$$

$$l = Nc_x \times \delta a = 2 \text{ m}$$

(b)

**Figure 7.1.** Profil de température initial dans le système (a) et profils à différents instants successifs, jusqu'à retour à l'équilibre thermique ( $Nc_x = 160$ ).

par différences finies au second ordre. Ceci a des conséquences sur la précision de l'évaluation des flux en régime stationnaire, mais aussi sur une propagation trop rapide des fronts de diffusion. Dans notre cas, cela signifie qu'on donne une chance à un paquet pénétrant par un côté dans un élément très absorbant de ressortir ensuite par l'autre côté, alors qu'il peut n'avoir physiquement aucune chance d'y parvenir.

Pour examiner ceci, nous considérons une situation de référence très simple, pour laquelle des simulations sont conduites en premier lieu avec une discrétisation très fine.

Ensuite, cette discrétisation est dégradée progressivement, pour déterminer sur quelle plage les résultats restent acceptables.

On considère une lame d'épaisseur  $L = 2m$  avec des propriétés thermophysiques uniformes,  $\rho c_p = 2.12 \cdot 10^6$  J/K/kg,  $n=1$ ,  $\kappa = 10$  m<sup>-1</sup>. A l'instant initial, une moitié de l'échantillon est à la température  $T=1000K$ , et l'autre à  $T=0K$  (figure 7.1a). Des conditions de périodicité sont appliquées aux extrémités du domaine.

Dans un premier temps, des calculs sont conduits avec  $L = N_{c_x}a$ ,  $N_{c_x} = 1000$  et  $a=2mm$ . Le problème étant unidimensionnel, seul la discrétisation en  $x$  intervient. Dans tous les cas, les calculs sont conduits avec des quantas très petits, qui correspondent à  $\delta T = 1/16K$ . Ce calcul, avec une discrétisation très fine ( $\kappa a = 2 \cdot 10^{-2}$ ), est pris comme référence.

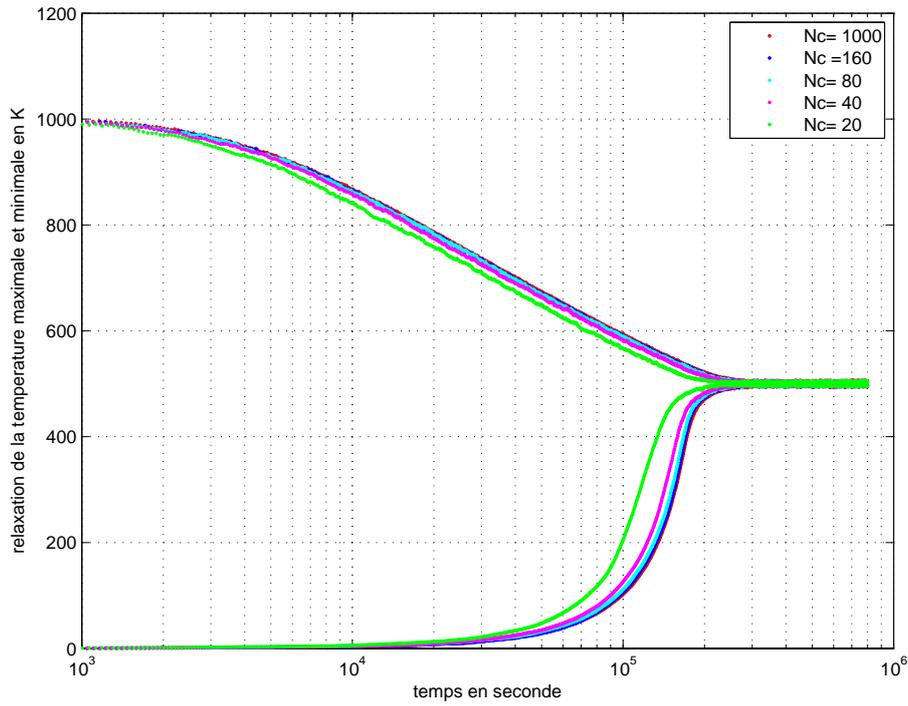
Ensuite, les mêmes calculs sont reproduits avec des discrétisations dégradées,

- $N_{c_x} = 1000$ ,  $a = 2.0$  mm,  $\kappa a = 0.020$  ;
- $N_{c_x} = 160$ ,  $a = 12.5$  mm,  $\kappa a = 0.125$  ;
- $N_{c_x} = 80$ ,  $a = 25.0$  mm,  $\kappa a = 0.250$  ;
- $N_{c_x} = 40$ ,  $a = 50.0$  mm,  $\kappa a = 0.500$  ;
- $N_{c_x} = 20$ ,  $a = 100.0$  mm,  $\kappa a = 1.000$ .

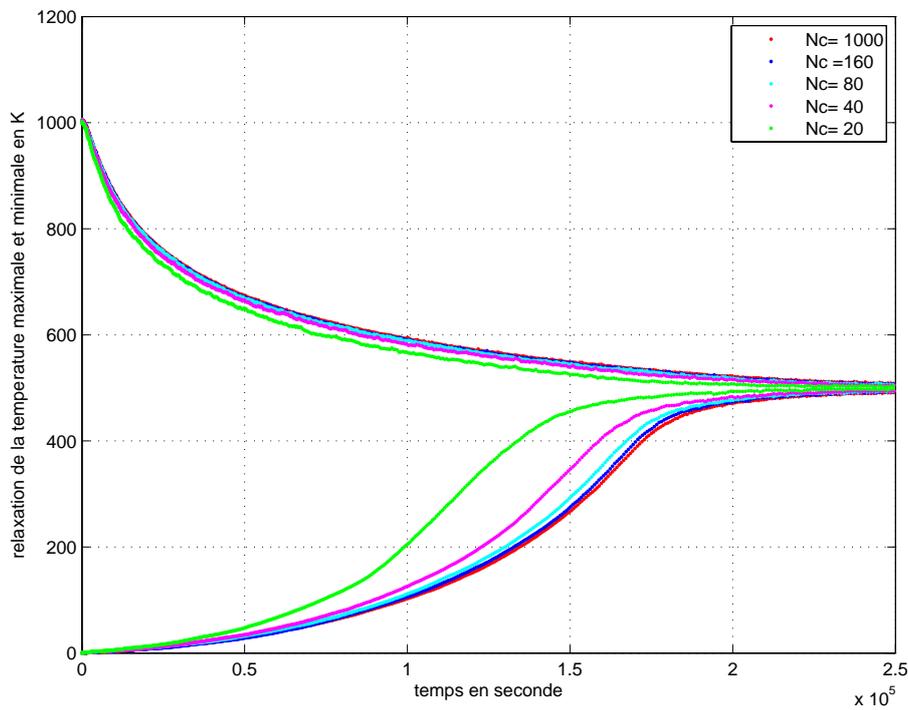
Un exemple de profils successifs de température lors du retour à l'équilibre est présenté dans la figure 7.1b, pour le cas  $N_{c_x} = 160$ . Pour comparer les résultats des différentes résolutions, on examine l'évolution temporelle des températures maximales et minimales qui apparaissent dans ces profils. Cette évolution est montrée dans la figure 7.2.

Les courbes en coordonnées logarithmiques montrent qu'une valeur de  $\kappa a$  trop importante induit un décalage, c'est à dire une modification de l'échelle des temps par un facteur à peu près constant au cours de l'histoire du système. Comme on s'y attendait, le retour à l'équilibre pour  $\kappa a = 1$  est trop rapide, avec une sous-évaluation d'environ 25% du temps. Les autres courbes sont plus regroupées.  $\kappa a = 1/2$  sous-estime le temps de relaxation d'environ 8%, et  $\kappa a = 1/4$  de moins de 3%. Les courbes pour  $\kappa a = 1/8$  et  $1/50$  sont à peine discernables.

Il en ressort que  $\kappa a = 1/4$  est suffisant pour obtenir des résultats satisfaisant, et que  $\kappa a = 1/2$  fournit des résultats raisonnables mais constitue une limite à ne pas dépasser.



(a)



(b)

**Figure 7.2.** Evolution au cours du temps des température maximales et minimales relevées sur les profils du type de la figure 7.1b, pour différentes résolutions spatiales  $\kappa a$ .

### 7.1.2 Bruit thermique

Le second paramètre numérique dont le choix est crucial est la valeur  $q_r$  des quanta d'énergie. Il est clair que pour une même valeur physique du flux radiatif à simuler, le coût sera supérieur si on utilise un plus grand nombre de paquets plus fins. En contrepartie, il est aussi intuitivement clair que le bruit statistique augmente quand une représentation plus grossière de l'énergie transférée est utilisée.

Il importe donc de quantifier ce bruit, et le plus simple pour ceci est de considérer une situation où seul le bruit intervient, c'est à dire un milieu à l'équilibre thermique. Chaque élément de volume émet et absorbe alors en moyenne le même nombre de paquets par unité de temps (en moyenne un par pas de temps, dans la méthode quasi-continue, quand les propriétés et la température sont uniformes). L'émission est pratiquement déterministe, puisque le nombre de paquets émis est calculé en fonction des propriétés et de la température locale. En revanche, l'absorption probabiliste de certains des paquets qui traversent l'élément de volume, eux mêmes en nombre aléatoire au cours d'un pas de temps donné, est un processus de type poissonien. Sa variance est donc égale à sa moyenne, et comme cette moyenne vaut un, on peut en dire autant de l'écart-type. En outre, cet excès ou déficit d'absorption peut se reproduire et se cumuler durant un nombre important de pas de temps successifs, induisant ainsi des fluctuations de température qui peuvent devenir significatives.

Pour quantifier cet effet, nous avons considéré un volume de matériau homogène, à l'équilibre à une température  $\langle T \rangle$ , et mesuré dans différentes conditions l'écart-type spatial  $\sigma_T$  de la température, que nous utilisons comme mesure du bruit. L'échantillon est discrétisé en  $32^2$  cubes élémentaires de taille  $a^3$ , et des conditions de périodicités sont appliquées dans les trois directions.

On a dans un premier temps fixé  $\kappa a = 1/2$ , et on a fait varier la température moyenne  $\langle T \rangle$ , ainsi que la tolérance  $\delta T$  qui sert à dimensionner le quantum d'énergie (voir éq. 6.8). Les résultats sont présentés dans la figure 7.3. Les droites obtenues dans cette représentation log-log indiquent une dépendance en  $\sqrt{\delta T}$ , qui existe aussi vis à vis de  $\langle T \rangle$ . On peut résumer l'ensemble par

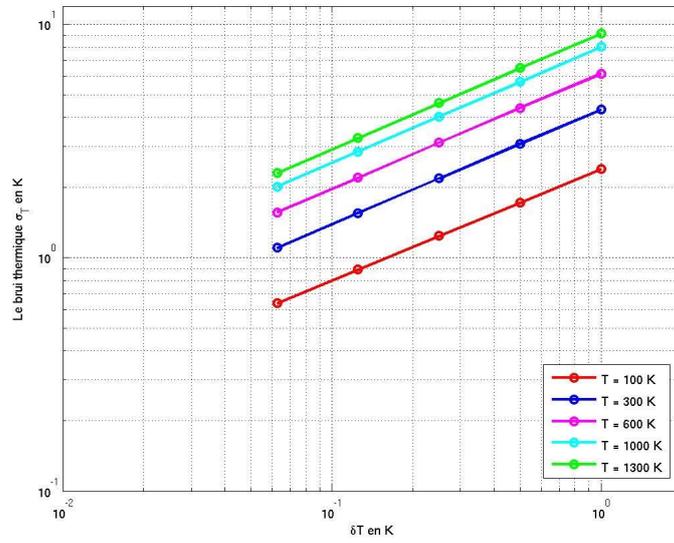
$$\sigma_T \approx \frac{1}{4} \sqrt{\langle T \rangle} \sqrt{\delta T} \quad (7.1a)$$

ou sous la forme de fluctuations relatives,

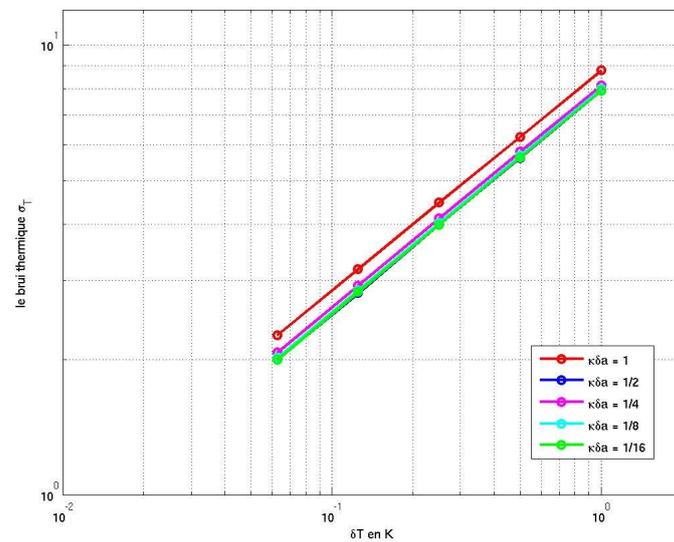
$$\frac{\sigma_T}{\langle T \rangle} \approx \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\delta T}{\langle T \rangle}} \quad (7.1b)$$

Il est donc aisé de limiter le bruit thermique à quelques degrés en prenant  $\delta T < 1\text{K}$ .

Un test du même type fait l'objet de la figure 7.4. On a cette fois fixé  $\langle T \rangle = 1000\text{K}$ , et fait varier la discrétisation  $\kappa a$ . On n'observe aucun effet de ce paramètre, à l'exception du cas  $\kappa a=1$  qui produit un niveau de bruit légèrement supérieur, mais on savait déjà que



**Figure 7.3.** Ecart-type spatial  $\sigma_T$  de la température dans un matériau homogène à l'équilibre, en fonction de  $\delta T$ , pour  $\kappa a = 1/2$  et pour différentes valeurs de la température moyenne  $\langle T \rangle$ .



**Figure 7.4.** Ecart-type spatial  $\sigma_T$  de la température dans un matériau homogène à l'équilibre, en fonction de  $\delta T$ , pour  $\langle T \rangle = 1000\text{K}$  et pour différentes valeurs de  $\kappa a$ .

les simulations conduites dans ces conditions ne sont pas très précises. Ceci correspond bien à ce qu'on pouvait attendre. En effet, si l'on imagine par exemple que l'on double la valeur de  $\kappa$ , le taux d'émission sera multiplié par deux. Toutefois, en fixant  $\delta T$  et  $\delta t$  de façon à ce qu'un paquet soit émis par cube et par pas de temps, on effectue en réalité la même suite d'opérations stochastiques. Seul la valeur du pas de temps change, en étant divisée par deux, mais cela n'affecte pas les fluctuations spatiales de  $T$ . simplement avec un pas de temps

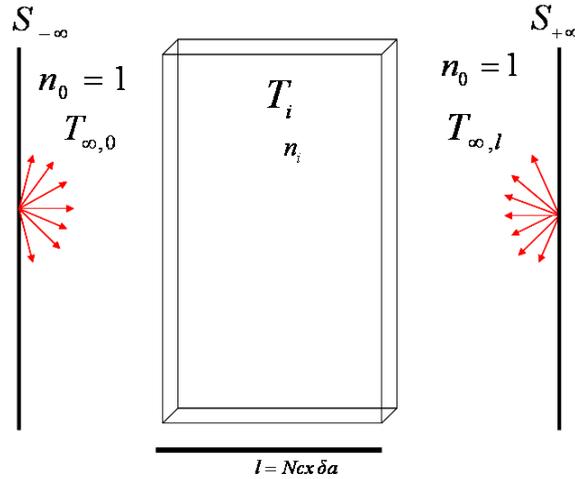
Il est difficile d'évaluer précisément *a priori* l'influence des autres paramètres. La capacité calorifique volumique peut en avoir une quand elle n'est pas uniforme, puisque l'émission ou l'absorption d'un paquet n'aura pas la même incidence sur la température de tous les éléments de volume. Toutefois, on fixe  $q_r$  pour limiter cette incidence à  $\delta T$  partout, donc en se basant sur le matériau le moins capacitif, ce qui conduit à réduire  $q_r$  et va donc dans le sens d'un meilleur niveau de bruit. L'effet de  $n$  est encore plus difficile à prédire puisqu'il influe sur la trajectoire des paquets. On peut imaginer par exemple que des effets de loupe modifient les propriétés statistiques en certains endroits. Cependant, un simple test conduit dans le milieu aléatoire décrit dans la Section 6.1, qui présente de très fortes hétérogénéités (éq. 6.5a et figure 6.1), conduit à une valeur de  $\sigma T$  quasiment identique à celle pour un matériau homogène doté de ses propriétés moyennes. On peut donc considérer que (7.1) est d'un point de vue pratique une estimation assez robuste de l'influence de la valeur  $q_r$  du quantum d'énergie.

## 7.2 Applications dans quelques cas simples

### 7.2.1 lame semi-transparente

On considère ici une lame de matériau semi-transparent, gris, à faces parallèles, émettant et absorbant mais non diffusant. Cette lame est exposée de part et d'autre à un rayonnement issu de l'infini, correspondant à des températures  $T_1 = 800\text{K}$  et  $T_2 = 500\text{K}$  (figure 7.5). Notons que cela est équivalent à placer la lame au contact avec deux plaques isothermes. L'épaisseur  $L$  de la lame est discrétisée en  $N_{c_x}=20$  éléments de volume, de taille  $a = L/N_{c_x}$ . Le profil de température dans la lame en équilibre a été calculé pour différentes valeurs de son épaisseur optique  $\tau_L = \kappa L$ , avec  $\delta T = 1/16$  K. La position dans la lame est repérée par l'abscisse optique  $\tau = \kappa x$ .

Les résultats sont présentés dans la figure 7.6a, en termes adimensionnels. La position dans la lame est repérée par  $\tau/\tau_L$ , et le profil de température par le rapport  $(T^4(\tau) - T_2^4)/(T_1^4 - T_2^4)$ . Ils sont en très bon accord quantitatif avec les résultats classiques équivalents rapportés par Modest (2003), et montrés dans la figure 7.6b.



**Figure 7.5.** Plaque plane soumise à un rayonnement issu de l'infini sur chacune de ses faces, correspondant à  $T_{-\infty} = 800\text{K}$  et  $T_{+\infty} = 500\text{K}$ .

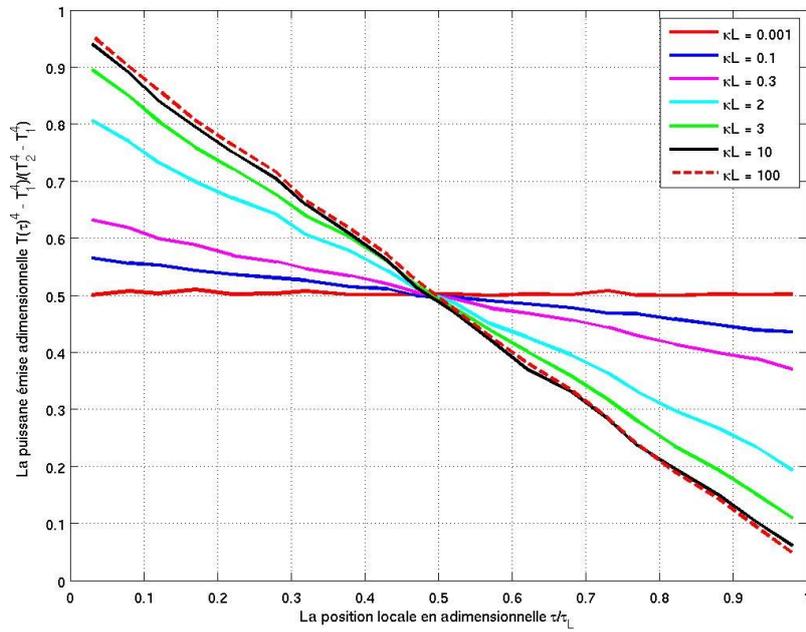
### 7.2.2 Sphère

Le premier exemple présenté ici concerne la mise en équilibre thermique d'une sphère composite exposée à un rayonnement issu de l'infini, correspondant à une température  $T_{\infty} = 1000\text{ K}$ . Le rayon total de la sphère est discrétisé en  $R/a = 20$  pas de maillage et les simulations sont conduites avec  $\delta T = 1/16\text{ K}$ .

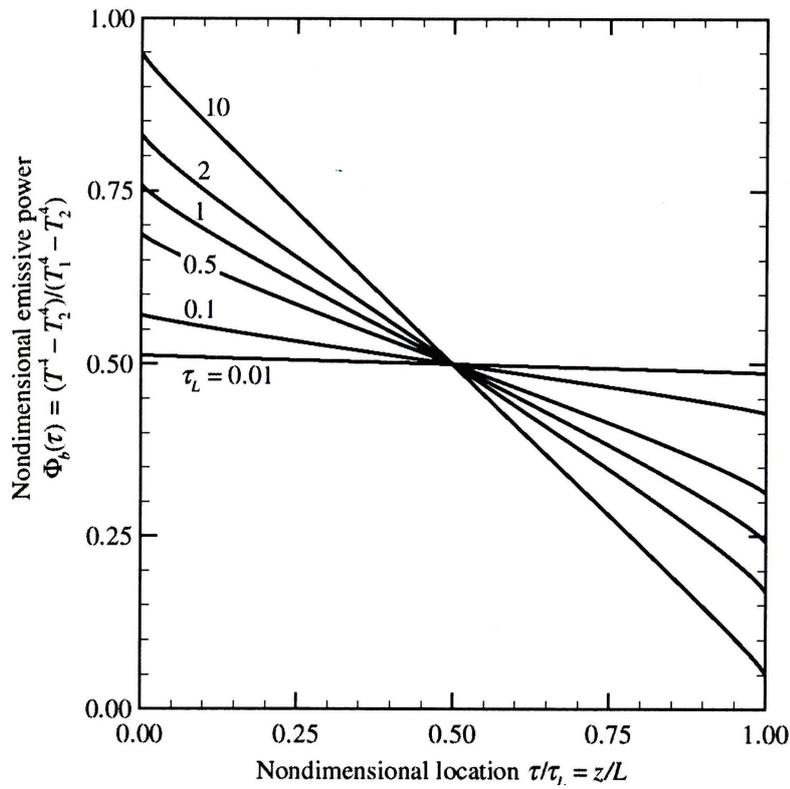
La sphère est composée d'un noyau ( $n$ ) et d'une couche périphérique ( $p$ ), dont les températures initiales diffèrent. Les paramètres sont les suivants :

- $R_n = 0.05\text{ m}$ ,  $R_p = 0.1\text{ m}$ ;
- $(\rho c_p)_n = 1.60 \cdot 10^6\text{ J/K/kg}$ ,  $(\rho c_p)_p = 1.61 \cdot 10^6\text{ J/K/kg}$ ;
- $n_n = 1.5$ ,  $n_p = 1$ ;
- $\kappa_n = 10\text{ m}^{-1}$ ,  $\kappa_p = 30\text{ m}^{-1}$ ;
- $\kappa_n a = 0.1$ ,  $\kappa_p a = 0.3$ ;
- $T_{0,n} = 950\text{ K}$ ,  $T_{0,p} = 800\text{ K}$ .

La figure 7.7 présente les champs de températures initiaux, finaux (équilibre), et à deux instants intermédiaires, dans une section passant par le centre. On observe bien l'établissement d'un état d'équilibre isotherme, après passage par une première phase où la partie centrale s'est d'abord refroidi, en cédant de la chaleur à la couche périphérique initialement plus froide, puis réchauffée, quand ce rapport s'est inversé sous l'influence du rayonnement extérieur.

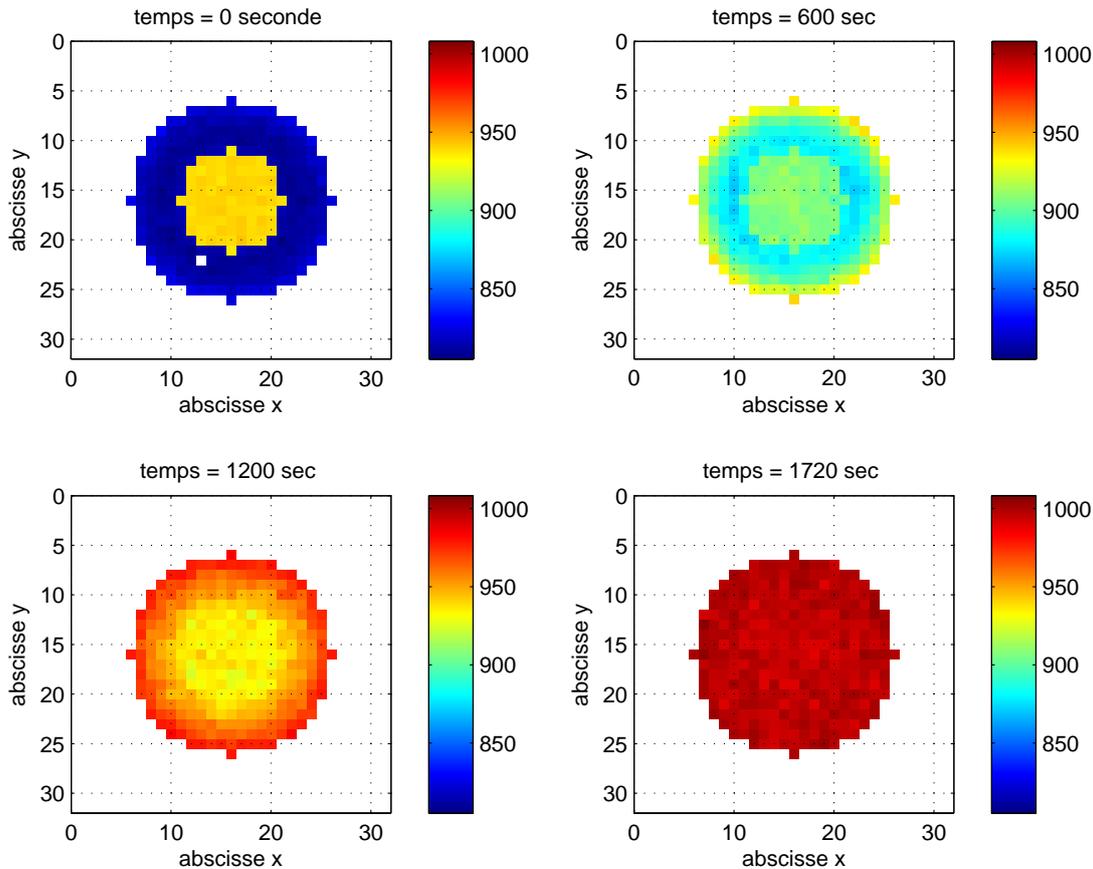


(a)



(b)

**Figure 7.6.** Profils adimensionnels de température dans une plaque à l'équilibre entre deux température  $T_1$  et  $T_2$ , pour différentes épaisseurs optiques. (a) présentes simulations ; (b) d'après Modest (2003) (fig. 13.3).

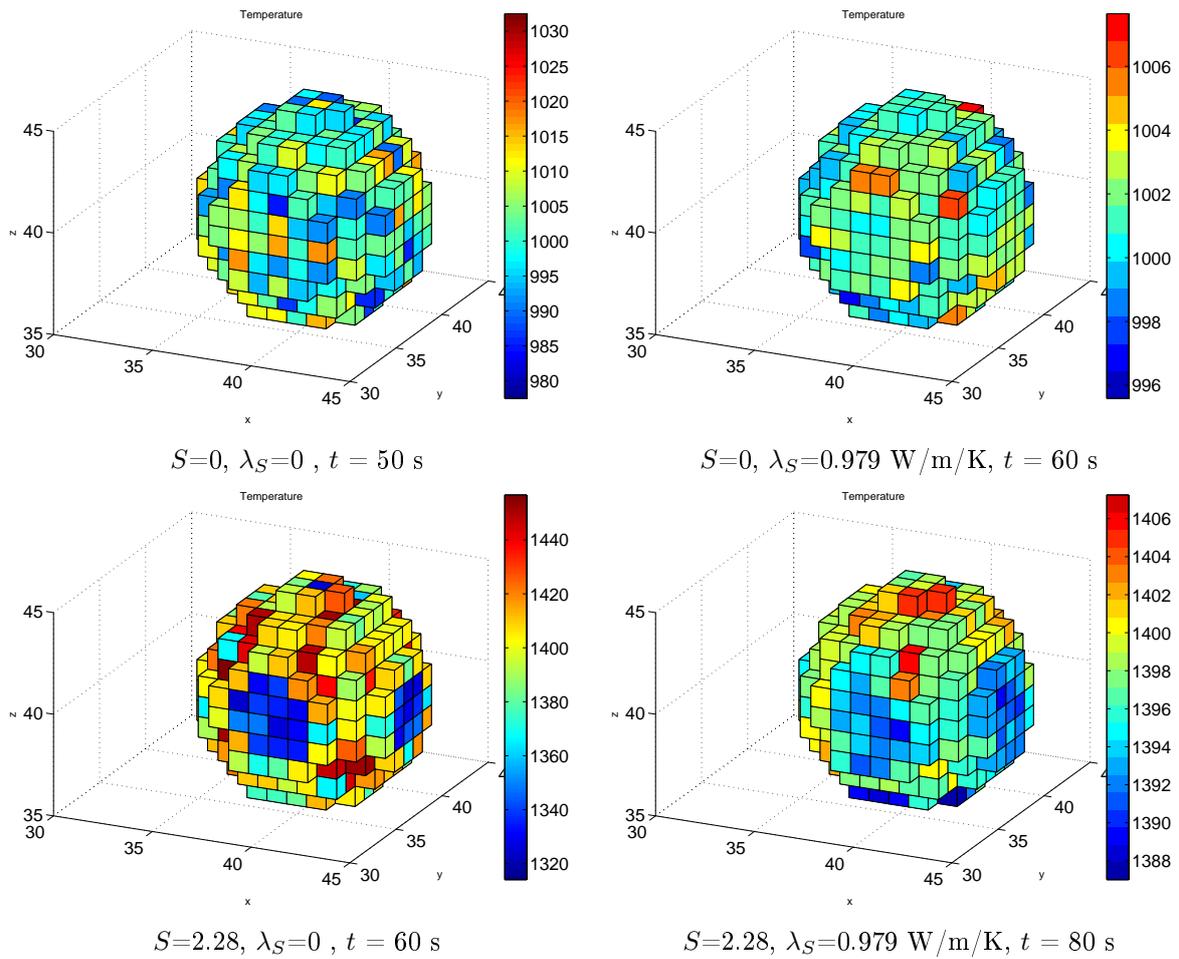


**Figure 7.7.** L'évolution de la température dans une sphère composite exposée à un rayonnement issu de l'infini.

La seconde situation considérée concerne directement les applications qui seront présentées dans la troisième partie du mémoire. Il s'agit d'une sphère suspendue dans le vide, au centre d'un four dont les parois sont noires et isothermes à  $T = T_\infty = 1000$  K. La sphère est considérée comme opaque, d'émissivité 1. Elle a un rayon nominal  $R = 1$  mm et une capacité calorifique  $\rho c_p = 3.375 \cdot 10^6$  J m<sup>-3</sup> K<sup>-1</sup>.

Dans un premier calcul, la sphère se met simplement à l'équilibre, en partant d'une température initiale  $T_0$  arbitraire. Le test porte ici essentiellement sur l'uniformité de la température à la surface de la sphère, dans l'état final.

Dans le second calcul, la sphère est initialement en équilibre thermique avec le four, donc avec  $T_0 = T_\infty$ . Une source d'énergie existe dans les éléments de volume à la surface de la sphère. Ceci simule le dégagement de chaleur quand une réaction exothermique d'oxydation se produit à la surface d'un grain de combustible. Dans ce cas, la sphère s'échauffe, jusqu'à ce que le bilan de flux radiatif compense les apports dus à la source. On vérifie ici notamment si la température de la sphère dans le régime permanent correspond bien à

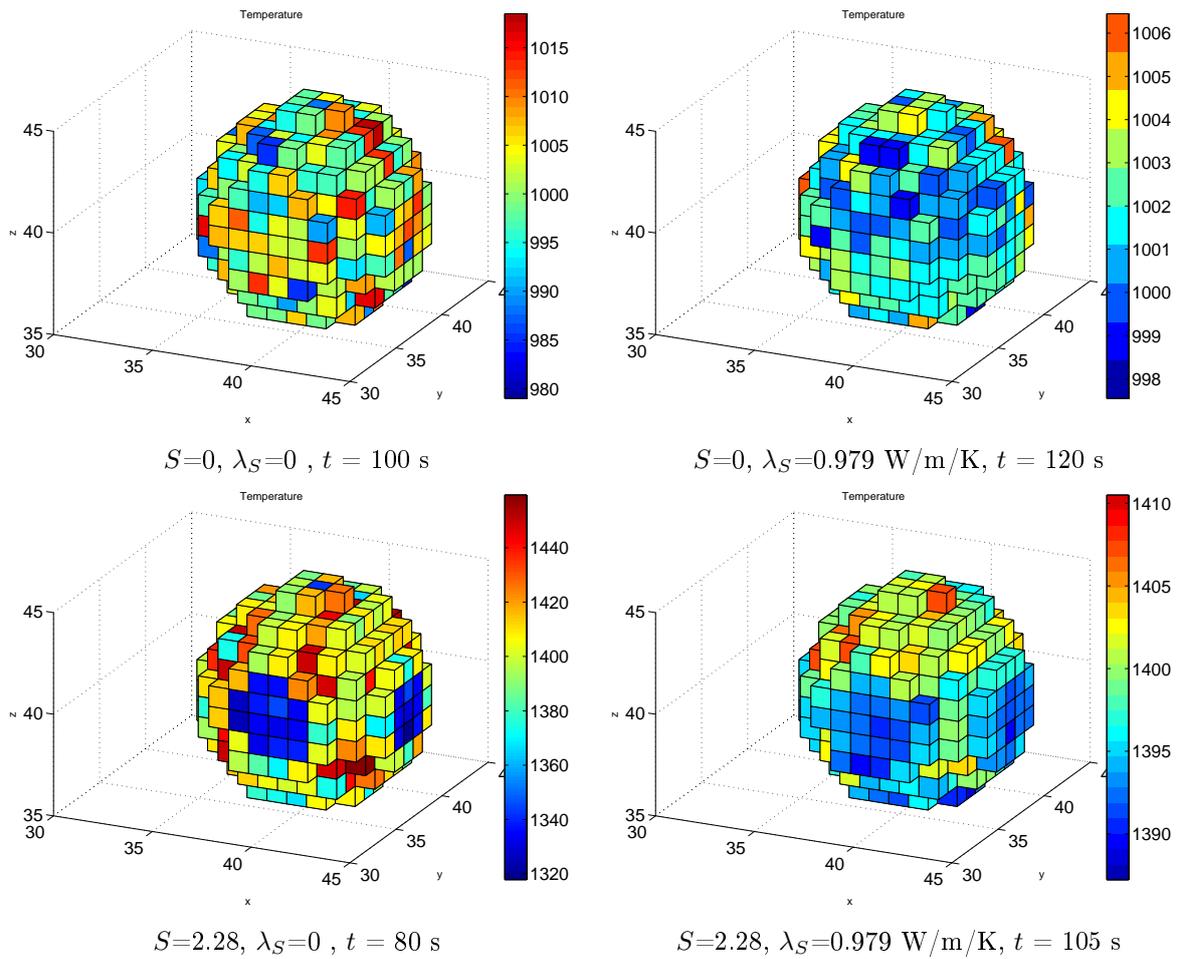


**Figure 7.8.** Température en surface d'une sphère suspendue dans le vide au milieu d'un four à  $T_\infty = 1000 \text{ K}$ .

ce qu'on attend. Dans les deux cas, le test porte donc sur la représentation d'une surface sphérique par des facettes carrées orthogonales, et sur l'influence qu'à cette représentation sur les échanges radiatifs.

Notons qu'on ne considère ici que la température de surface. Puisque la sphère est opaque et que la conduction n'est pas prise en compte, la partie centrale non exposée au vide ne subit aucun échange thermique. En conséquence, la capacité calorifique totale de la sphère est contenue dans une couche périphérique, et dépend de la résolution du maillage  $a$ . Ceci affecte bien entendu la dynamique des phénomènes. Par exemple, la mise à l'équilibre thermique est plus rapide si la couche à chauffer est mince que si elle est épaisse. Toutefois, il serait illusoire de chercher à capturer les aspects dynamiques sans prendre en compte la conduction, ce qui n'est pas fait ici.

Le four est une cavité cubique de dimension intérieure  $L = 16 \text{ mm}$ . Le pas du maillage vaut  $a = 200 \text{ } \mu\text{m}$ , c'est à dire que  $L = 80a$  et  $R = 5a$ . Le quantum  $q_r$  est fixé selon la



**Figure 7.9.** Température en surface d'une sphère suspendue dans le vide au milieu d'un four à  $T_\infty = 1000 \text{ K}$ . Les données correspondent à des situations identiques à celles de la figure 7.8, à des instants différents.

méthode adaptative décrite dans la Section 9.2.1 (voir éq. 9.3). Sa valeur finale est indiquée dans la Table 7.1.

Le terme source a quand il existe une puissance totale  $S = 2.28 \text{ W}$ , et il est distribué dans les éléments de volume en surface de la sphère, proportionnellement au nombre de faces exposées au vide. Ceci est supposé représenter le dégagement dû à un taux de réaction exothermique uniforme à la surface de la sphère. C'est toutefois en partie arbitraire, dans la mesure où cette surface est représentée différemment selon son orientation. Cependant, cela correspond bien à ce qu'on obtiendrait dans une simulation numérique dans un cas où le taux de réaction serait limité par la cinétique (et non par les apports diffusifs d'oxydant).

Les résultats des deux calculs sont illustrés par la figure 7.8 (à gauche), où l'on montre les températures en surface dans l'état final stationnaire, et quantifiés dans la

Table 7.1. Dans cette table, on distingue les moyennes et écart-types évalués en pondérant par élément de volume exposé au vide, ou par élément de surface exposé au vide, mais les deux évaluations donnent des résultats quasiment identiques.

Dans la situation d'équilibre thermique, les résultats sont satisfaisants. La température moyenne correspond bien à celle du four, et les fluctuations n'excèdent pas  $\pm 20K$ , avec un écart-type inférieur à 8 K. Cette valeur est pourtant plus importante que le niveau de bruit prédit par (7.1a), qui serait  $\sigma_T \approx 2$  K. La discrétisation de la surface a donc probablement une influence.

Ceci est bien plus net dans le cas où la sphère contient une source. Les fluctuations de température en surface atteignent  $\pm 70$  K, avec un écart-type de l'ordre de 30 K. En outre, elles sont visiblement corrélées avec la représentation de la surface de la sphère. Les zones où la normale à la surface est alignée avec les axes de coordonnées, et où la surface est exempte "d'escalier" sont plus froides (figure 7.8).

La figure 7.9 présente des résultats du même type que ceux de la figure 7.8, obtenus dans les mêmes conditions mais à un instant différent. En absence de source (équilibre thermique), il n'y a pas de corrélations évidentes entre les localisations des zones chaudes ou froides aux deux instants. En revanche, dans le cas où une source est présente, la même distribution spatiale des fluctuations est observée, ce qui confirme qu'elles ne sont pas du bruit mais un biais systématique. Les données statistiques de la Table 7.1 ne sont pas répétées car leurs mesures à des instants différents sont quasiment identiques.

L'importance de ces fluctuations est un peu inquiétante, mais on peut faire les deux remarques suivantes.

- Les fluctuations ne résultent pas nécessairement uniquement d'un défaut dans la simulation des échanges radiatifs. La façon dont est modélisée la distribution spatiale des apports de chaleur est assez brutale, puisque certains éléments de volume reçoivent 4 fois plus que d'autres. Ceci est également une conséquence de la représentation locale plane ou en escalier de la surface de la sphère. Ce défaut est considérablement réduit quand les apports ne sont pas fixés *a priori* comme ici, mais résultent plutôt d'un taux de réaction chimique effectivement calculé en tenant compte de la limitation des apports diffusifs de réactifs.
- Le cas considéré est particulièrement sévère, puisque la conduction dans le solide est ignorée. Ceci n'est pas réaliste, et interdit tout rééquilibrage.

Ces simulations ont donc été répétées en tenant compte cette fois de la conduction<sup>1</sup>, avec  $\lambda_S = 0.979$  W/m/K (cf Table 2.1). Les résultats sont également présentés dans les figures 7.8 et 7.9, et dans la Table 7.1.

Dans le cas de la situation d'équilibre, les fluctuations spatiales de température sont très faibles, avec un écart-type qui est inférieur à 2 K. Elles sont également considérablement réduites en présence d'un terme source, et ramenées à un niveau tout à fait

<sup>1</sup> La façon dont la conduction est prise en compte dans la simulation est décrite dans la Section 9.2.2.

$S$ (W)	$\lambda_S$ (W/m/K)	$\delta T$	$T_{min}$ $T_{max}$		volumique		surfactive		
					$\langle T \rangle$	$\sigma_T$	$\langle T \rangle$	$\sigma_T$	$\langle T^4 \rangle^{1/4}$
0	0	0.0625	980	1018	1001	7.7	1001	7.6	1001
0	0.979	0.0625	996	1008	1001	1.7	1001	1.9	1001
2.28	0	0.4	1319	1459	1394	32.6	1400	27.2	1401
2.28	0.979	0.4	1389	1412	1398	4.3	1398	4.5	1397

**Table 7.1.** Statistiques de la température (K) d'une sphère suspendue dans le vide au milieu d'un four à  $T_\infty = 1000$  K. Les moyennes et écart-types sont calculés avec une pondération volumique (par élément de volume exposé au vide) ou surfactive (par élément de surface exposé au vide).

satisfaisant. L'amplitude des variations est réduit à  $\pm 12$  K, avec un écart-type inférieur à 5 K. En outre, la corrélation spatiale des fluctuations n'est plus aussi marquée.

Dans les conditions où seront conduits les calculs à venir, *i.e.*, en tenant compte de la conduction, la combinaison des modélisations des échanges radiatifs et des apports d'énergie d'origine chimique est donc raisonnablement insensible à la forme discrétisée de la surface des grains.

Examinons pour finir la relation entre la température de la sphère et la puissance qu'elle émet. La puissance émise dans le vide par une sphère à la température  $T_S$  vaut  $4\pi R^2 \sigma T_S^4$ , tandis que sa surface (noire) absorbe le rayonnement issu du four, pour un montant  $4\pi R^2 \sigma T_\infty^4$ . Le bilan devant équilibrer la puissance fournie par la source, on peut prédire la température à laquelle s'établira la sphère,

$$T_S = \left\{ T_\infty^4 + \frac{S}{4\pi R^2 \sigma} \right\}^{1/4} \quad (7.2)$$

Inversement, pour une sphère représentée de façon discrétisée, on peut déduire de la température d'équilibre une valeur effective  $R_{eff}$  de son rayon

$$R_{eff} = \left\{ \frac{S}{4\pi \sigma (T_S^4 - T_\infty^4)} \right\}^{1/2} \quad (7.3)$$

Notons d'abord que des températures moyennes quasiment identiques sont obtenues avec (1398 K) ou sans (1400 K) prise en compte de la conduction. L'application de (7.3) fournit  $R_{eff} = 1.06$  mm, alors que le rayon nominal vaut  $R = 1$  mm. La différence de 6% n'est pas négligeable, mais elle à comparer à la finesse de la discrétisation spatiale,  $a/R = 0.2$ . En d'autres termes, l'écart  $R_{eff} - R = 60 \mu\text{m}$  est très inférieur au pas de maillage  $a = 200 \mu\text{m}$ , ce qui est tout ce qu'on peut raisonnablement espérer.

## Chapitre 8

---

# Lois de Snell-Descartes et de Fresnel généralisées

Ce chapitre est entièrement consacré à l'examen, sur un plan théorique, de la généralisation des lois de Snell-Fresnel standard au cas de matériaux absorbants.

On a vu dans ce qui précède, que d'un point de vue pratique l'emploi de formules généralisées n'est pas toujours nécessaire. Ceci doit être considéré en relation avec la discrétisation spatiale. Si le pas de maillage est optiquement grand, il est quasiment équivalent de considérer le matériau comme opaque. S'il est optiquement modéré ou mince, la correction à apporter aux formules standard peut être très faible (Section 5.4.2). C'est le cas dans les applications que nous visons, qui concernent des milieux dont les éléments constitutifs sont de dimensions millimétriques, et qui seront abordées dans la troisième partie du mémoire. Toutefois, pour le traitement de matériaux présentant une texture plus fine, une meilleure résolution spatiale serait requise et il pourrait alors être nécessaire de disposer d'une formulation générale des lois de la réfraction.

### 8.1 Introduction

L'interaction d'une onde électromagnétique harmonique plane avec une interface entre deux divers matériaux est un problème classique. Cependant, dans la plupart des manuels (Born et Wolf , 1986, Siegel et Howell , 1992) le cas des matériaux absorbants (conductant) est présenté seulement pour des situations particulières, *c.-à-d.* quand une onde incidente propage d'un milieu non absorbant à milieu absorbant. Pour de tels problèmes, ils donnent les lois de Snell-Descartes à la forme généralisée.

Une analyse complète de transmission et de réfraction d'une onde harmonique plane qui rencontre une interface entre deux médias est donnée récemment par Dupertui et al. (1994) et par Chang et al. (2005). Le travail de Pincherle (1947) considère les conditions énergétiques qui ont imposés au vecteur d'onde par la transmission de l'énergie électromagnétique.

La solution est sensiblement basée sur la notion d'une onde plane non homogène, qui est caractérisée par le fait que ses plans de phase constante et d'amplitude constante ne

sont pas parallèles. Ce genre d'ondes apparaissent tout à fait naturellement quand une onde électromagnétique oblique rentre dans un milieu absorbant. D'ailleurs, ces ondes sont des ingrédient importants d'une onde angulaire spectrale qui est utilisée pour la décomposition de Fourier spatiale des champs électromagnétiques bidimensionnels ou tridimensionnel (Rothwell et Cloud , 2001). Donc, il est démontré que le passage d'une onde électromagnétique dans un milieu absorbant ne peut être analysée sans la considération du concept d'onde non homogène.

La radiation d'une onde électromagnétique est une partie importante dans l'échange d'énergie entre plusieurs corps. Comme nous avons vu dans les chapitres précédents, la loi de l'équilibre thermodynamique locale exige une compensation entre la quantité de l'énergie émise et la quantité d'énergie absorbée. Cependant, la question est-ce que les lois de Snell-Descartes ou les lois de Fresnel sont compatibles avec les conditions imposées par la thermodynamique n'est pas adressées dans la littérature.

Dans ce chapitre on présente les résultats théoriques récapitulés au sujet de la transition d'une onde harmonique plane électromagnétique par une interface entre deux matériaux afin de les employer dans le développement d'un modèle numérique.

D'abord, on rappelle les équations des champs électromagnétiques et les caractéristiques des ondes planes dans un milieu absorbant. Ensuite on dérive les lois de Snell-Descartes généralisés pour la réflexion et réfraction d'une onde plane sur l'interface entre deux milieux absorbants différents et les lois de Fresnel pour la transmittivité et la réflectivité. Puis on discute la compatibilité de ces règles de transmission avec le deuxième lois de la thermodynamique. On fini ce chapitre par une présentation des principes d'un modèle numérique basé sur les marches aléatoires pour la simulation de processus de transfert radiatifs dans des milieux absorbants. On discute également les problèmes conceptuels qui restent à résoudre pour mettre en place un tel modèle numérique.

## 8.2 Généralités

### 8.2.1 Equations de Maxwell

Les équations de Maxwell pour un système stationnaire (Stratton , 1941) sont :

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (8.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad \nabla \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (8.2)$$

où  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$  sont respectivement les intensités du champs électrique et magnétique,  $\epsilon$  et  $\mu$  sont les capacités inductives du milieu et  $\sigma$  est la conductivité du milieu en question. Il est supposé que :

- le milieu est homogène -  $\epsilon$ ,  $\mu$  et  $\sigma$  sont des constantes partout dans le milieu ;
- le milieu est isotrope -  $\epsilon$  et  $\mu$  sont des scalaires ;

- le milieu est linéaire - toutes les caractéristiques ne dépendent pas des intensités des champs ;
- il n'y a pas des charges libres dans le système - la seconde équation dans (8.1) ne contient pas la densité de charge correspondante.

Les capacités  $\epsilon$  and  $\mu$  peuvent être écrite sous la forme  $\epsilon = \kappa_e \epsilon_0$  et  $\mu = \kappa_m \mu_0$ , où  $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{12}$  Farad/m et  $\mu_0 = 1.257 \cdot 10^{-6}$  Henry/m sont des capacités dans un espace vide et se sont des constantes universelles ;  $\kappa_e$  et  $\kappa_m$  sont respectivement la constante diélectrique et la perméabilité du milieu. Dans certains livres, ses deux derniers paramètres sont référés permittivités et notés comme  $\epsilon$  and  $\mu$ . Pour les matériels non magnétiques  $\kappa_m \approx 1$  and  $\mu = \mu_0$ .

### 8.2.2 Conditions limites

Quand les caractéristiques du matériau changent abruptement il est impératif d'écrire les règles correspondantes qui relient les intensités de champs des deux côtés de l'interface. Ces règles sont dérivées à partir des équations du Maxwell en remplaçant la frontière pointue par une couche de transition mince. Elles peuvent être écrites sous une forme générale :

$$\mathbf{s} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0, \quad \mathbf{s} \cdot (\epsilon_2 \mathbf{E}_2 - \epsilon_1 \mathbf{E}_1) = \Omega \quad (8.3)$$

$$\mathbf{s} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{K} \quad \mathbf{s} \cdot (\mu_2 \mathbf{H}_2 - \mu_1 \mathbf{H}_1) = 0 \quad (8.4)$$

où  $\mathbf{s}$  est la vecteur normale à la surface,  $\mathbf{K}$  le courant électrique surfacique et  $\Omega$  la densité électrique surfacique. Quand la conductivité électrique du deux milieux est finie, il n'y pas de courant surfacique  $\mathbf{K} = 0$ .

### 8.2.3 Flux d'énergie électromagnétique

Le travail dû au changement réversible de la distribution de la charge électrique et le courant électrique du milieu peut être exprimé en terme des intégrales du champs de vecteur étendue sur tout le volume. Dans la théorie électromagnétique l'hypothèses standard est que les énergies électriques et magnétiques sont distribuées avec une densité volumique, lesquelles dans le cas d'un milieu linéaire peuvent être écrites comme :

$$\frac{1}{2} (\epsilon \mathbf{E}^2 + \mu \mathbf{H}^2) \quad (8.5)$$

La variation de la densité d'énergie avec le temps est donnée par le théorème de Poynting écrite sous une forme différentielle :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon \mathbf{E}^2 + \mu \mathbf{H}^2) + \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \sigma \mathbf{E}^2 = 0 \quad (8.6)$$

où  $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$  est la vecteur de Poynting qui représente le flux d'énergie, et le dernier terme est la diminution (la perte) de la chaleur par effet de Joule.

### 8.2.4 Ondes harmoniques planes

Dû au caractère linéaire des équations de Maxwell (8.1) - (8.2) chacune de leurs solutions peuvent être représentées comme une superposition des ondes harmoniques caractérisées par la fréquence  $\omega$ , et les variations temporelles de chaque composantes du champ électromagnétique sont décrites par une fonction périodique  $\cos(\omega t + \phi)$ , avec constante de phase  $\phi$ .

Dans le cas de l'absence de la conductivité électrique  $\sigma = 0$  la solution de base est  $\cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi)$  avec  $\mathbf{p}$  le vecteur d'onde. Cette forme qui est une solution particulière des équations de Maxwell incorpore toutes les variations dans l'espace et dans le temps, et les amplitudes de ces ondes planes sont constantes, elles dépendent uniquement des conditions limites et initiales.

Néanmoins, quand  $\sigma > 0$ , ces amplitudes varient exponentiellement avec la distance, en accord avec les propriétés générales des équations linéaires. La solution de base dans la forme générale dans ce cas est une onde harmonique plane non homogène (harmonic inhomogeneous plane wave (HIPW), Sommerfeld , 1954; Dupertui et al. , 1994; Carcione , 2007), parfois certaine références bibliographique les appellent comme des ondes planes non uniforme (Rothwell et Cloud , 2001)

$$e^{-\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (8.7)$$

Le vecteur  $\mathbf{q}$  dépend de  $\sigma$  et , dans le cas général, il n'est pas parallèle à  $\mathbf{p}$ , c'est pourquoi les ondes planes de l'amplitude constante ne sont pas perpendiculaires à la direction de la propagation. La relation (8.7) peut s'exprimer avec une notation complexe :

$$\Re(e^{-\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + i\{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi\}}) \quad (8.8)$$

où  $\Re()$  est la partie réelle du nombre complexe. Il est utile de regrouper les vecteurs,  $\mathbf{q}$  and  $\mathbf{p}$  dans une seule vecteur d'onde complexe  $\mathbf{P} = \mathbf{p} + i\mathbf{q}$ . L'onde plane complexe peut être décrite comme :

$$e^{i\{\mathbf{P} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi\}} \quad (8.9)$$

En introduisant une amplitude complexe  $\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_{0m} e^{i\phi}$  pour l'intensité du champ électrique on peut écrire l'onde plane complexe dans cette forme :

$$\mathbf{E}_0 e^{i\{\mathbf{P} \cdot \mathbf{r} - \omega t\}} \quad (8.10)$$

où  $\mathbf{E}_{0m}$  est la partie réelle de l'amplitude (l'amplitude réelle ) de l'intensité du champs électrique. En introduisant des notations similaires pour l'intensité du champ magnétique  $\mathbf{H}$  et les substituant dans les équations de Maxwell (8.1-8.2), on obtient les équations ci-dessous

$$\mathbf{P} \times \mathbf{E}_0 = \mu\omega\mathbf{H}_0, \quad \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_0 = 0 \quad (8.11)$$

$$\mathbf{P} \times \mathbf{H}_0 = -\epsilon\omega\mathbf{E}_0 - i\sigma\mathbf{E}_0, \quad \mathbf{P} \cdot \mathbf{H}_0 = 0 \quad (8.12)$$

Note :

- Les opérateurs différentielles  $\partial/\partial t$ ,  $\nabla$  et l'opération qui permette de prendre la partie réelle de l'équation (8.8) sont commutative, ainsi la solution physiquement significative peut être dérivée par l'application de la dernière opération quand toute les opérations avec les nombres complexes dans les équations (8.11-8.12) sont terminées ;
- On peut trouver différentes notations pour la phase (8.10) dans les livres et les articles scientifiques :  $-i\{\mathbf{P} \cdot \mathbf{r} - \omega t\}$ , ou  $\{\mathbf{P} \cdot \mathbf{r} - i\omega t\}$ , lesquelles donnent lieu à différentes formes des équations(8.11-8.12).

La combinaison du première équations dans (8.12) avec (8.11), donne

$$P^2 \mathbf{E}_0 = (\epsilon\mu\omega^2 + i\sigma\mu\omega) \mathbf{E}_0 \quad (8.13)$$

Avec l'introduction de  $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$  et  $P_0 = \omega/c$ , la relation entre le vecteur onde, la fréquence et les constantes du matériaux peuvent être écrites comme

$$P^2 = P_0^2(\kappa_e\kappa_m + i\sigma\kappa_m/(\omega\epsilon_0)) = P_0^2\tilde{n}^2 \quad (8.14)$$

où la combinaison

$$\tilde{n} = \sqrt{\kappa_m(\kappa_e + i\sigma/(\omega\epsilon_0))} = n + ik \quad (8.15)$$

est appelé l'indice de réfraction complexe. On note qu'il dépend de la fréquence de l'onde  $\omega$ . La combinaison

$$\tilde{\epsilon} = \kappa_e + i\sigma/(\omega\epsilon_0) \quad (8.16)$$

est appelée la constante diélectrique complexe.

Suivant les notations de Chang et al. (2005) on décompose le vecteur d'onde complexe  $\mathbf{P}$  en deux parties :

$$\mathbf{P} = P_0 (N\mathbf{e} + iK\mathbf{f}) \quad (8.17)$$

où  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{f}$  sont respectivement les vecteurs unitaires normales aux plans équiphasés (dont les phases sont constantes) et équiampitudes (amplitudes constantes), avec  $\cos \alpha = \mathbf{e} \cdot \mathbf{f}$ . Par convention les coefficients sont positifs  $N, K > 0$ . A partir de (8.14-8.15)  $N$  et  $K$  sont liées à  $n$  et  $k$  comme

$$N^2 - K^2 = n^2 - k^2, \quad NK \cos \alpha = nk \quad (8.18)$$

dont la solution est

$$N^2 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(n^2 - k^2)^2 + (2nk/\cos \alpha)^2} + n^2 - k^2 \right] \quad (8.19)$$

$$K^2 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(n^2 - k^2)^2 + (2nk/\cos \alpha)^2} + k^2 - n^2 \right] \quad (8.20)$$

On note, que  $\cos \alpha > 0$  dans un milieu absorbant ( $k > 0$ ) dû à la seconde équation dans (8.18) et l'amplitude de l'onde est toujours diminuée le long de la direction de la propagation  $\mathbf{e}$ . Un cas particulier se produit quand  $k = 0$  : une solution  $\alpha = \pi/2$  correspond

à une onde dans un milieu non absorbant dans lequel les plans de l'amplitude constant et les plans de la phase constante sont perpendiculaires.

Maintenant, on calcule le flux d'énergie exprimé par le vecteur de Poynting  $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ , en utilisant seulement les fonctions réelles de l'onde (8.7) et les amplitudes réelles  $\mathbf{E}_{0m}$  et  $\mathbf{H}_{0m}$  :

$$\mathbf{S} = \mathbf{E}_{0m} \times \mathbf{H}_{0m} e^{-2\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \cos^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) \quad (8.21)$$

Suivant la relation  $\cos^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi) = \{\cos(2[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi]) + 1\}/2$  le vecteur de flux se compose en deux parties, une qui varie avec le temps et un terme constant. La partie variable oscillé avec la fréquence  $2\omega$  et elle ne contribue pas au flux d'énergie transmis par l'onde. Ainsi le flux d'énergie moyennant en temps est :

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{E}_{0m} \times \mathbf{H}_{0m} e^{-2\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (8.22)$$

En utilisant l'onde complexe (8.10) on peut réécrire le flux d'énergie moyen comme la partie réelle du vecteur de Poynting complexe

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \Re(\tilde{\mathbf{S}}), \quad \tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* \quad (8.23)$$

où  $\mathbf{H}^*$  est la conjuguée complexe du  $\mathbf{H}$ .

On peut démontrer que la relation (8.23) est valable pour chaque combinaison des ondes planes caractérisées par la même fréquence  $\omega$ . En effet, si les intensités électriques et magnétiques sont décrites par des vecteurs complexes  $\mathbf{E}_s(\mathbf{r})e^{i\omega t}$  et  $\mathbf{H}_s(\mathbf{r})e^{i\omega t}$ , le vecteur de Poynting complexe est :

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s^*, \quad \text{with} \quad \Re(\tilde{\mathbf{S}}) = \frac{1}{2} \{\Re(\mathbf{E}_s) \times \Re(\mathbf{H}_s) + \Im(\mathbf{E}_s) \times \Im(\mathbf{H}_s)\} \quad (8.24)$$

qui est constant dans le temps. Ici  $\Im()$  indique la partie imaginaire du nombre complexe. D'une autre part, la partie réelle du vecteur de Poynting est :

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \Re(\mathbf{E}_s e^{i\omega t}) \times \Re(\mathbf{H}_s e^{i\omega t}) = \\ &= [\mathbf{E}_{sr} \cos \omega t - \mathbf{E}_{si} \sin \omega t] \times [\mathbf{H}_{sr} \cos \omega t - \mathbf{H}_{si} \sin \omega t] \end{aligned} \quad (8.25)$$

En retenant la partie constante de  $\mathbf{S}$  on obtient

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} (\mathbf{E}_{sr} \times \mathbf{H}_{sr} + \mathbf{E}_{si} \times \mathbf{H}_{si}) \quad (8.26)$$

qui est exactement la partie droite du coté de (8.24).

Pour trouver la direction du vecteur de Poynting substituons la première équation de (8.11) dans (8.23)

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2\omega\mu} \mathbf{E}_0 \times (\mathbf{P} \times \mathbf{E}_0)^* \quad (8.27)$$

où seulement les amplitudes sont conservées et on omet l'atténuation exponentielle  $e^{-2\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ . En développant la partie droite de l'équation de (8.27) on obtient

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2\omega\mu} [\mathbf{P} * |\mathbf{E}_0|^2 - \mathbf{E}_0^*(\mathbf{P}^* \cdot \mathbf{E}_0)] \quad (8.28)$$

En utilisant l'identité  $\mathbf{E}_0^*(\mathbf{P}^* \cdot \mathbf{E}_0) = \mathbf{P}^* \times (\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{E}_0) + \mathbf{E}_0(\mathbf{P}^* \cdot \mathbf{E}_0^*)$  où le terme dernier disparaît dû à la seconde équation dans (8.11) on peut obtenir

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2\omega\mu} [\mathbf{P} * |\mathbf{E}_0|^2 - \mathbf{P}^* \times (\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{E}_0)] \quad (8.29)$$

Le produit des vecteurs  $\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{E}_0$  est un vecteur purement imaginaire et peut être écrite comme  $2i\Re(\mathbf{E}_0) \times \Im(\mathbf{E}_0)$ . En substituant du complexe conjugué de (8.17) et conservant la partie réelle de tous les termes mène à l'expression suivante du flux d'énergie moyen.

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{P_0}{2\omega\mu} [N|\mathbf{E}_0|^2 \mathbf{e} - 2K\mathbf{f} \times (\Re(\mathbf{E}_0) \times \Im(\mathbf{E}_0))] \quad (8.30)$$

Dans un milieu non absorbant  $k = 0$  la deuxième équation (8.18) a deux possibles solutions  $K = 0$  ou  $\mathbf{e} \cdot \mathbf{f} = 0$ . Dans le premier cas, l'onde est homogène est le vecteur de Poynting est perpendiculaire aux plans équiphases. Dans le deuxième cas d'une onde non homogène dans un milieu non absorbant  $\langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{f} = 0$  et le vecteur de Poynting se trouve dans un plan de l'amplitude constant.

Généralement, l'énergie ne propage pas dans la même direction que la phase d'onde car la direction de flux est affectée par le coefficient d'absorption, par des caractéristiques de non homogénéité de l'onde comme par son état de polarisation.

### 8.3 Les Loix de Snell-Descartes

On considère deux milieux avec différentes propriétés  $n_1, k_1$  and  $n_2, k_2$  séparés par une surface plane avec un vecteur unitaire normale  $\mathbf{s}$  orienté vers le milieu 2. On considère une onde plane qui parte du milieu 1 et qui traverse cette surface. (Souvent les chercheurs utilisent traditionnellement une notation opposée de 1 et 2). Une solution stationnaire des équations de Maxwell dans cette situation se compose de deux ondes planes dans le milieu 1 - onde incidente et une onde réfléchissante, et une onde transmise dans le milieu 2. Toutes les caractéristiques des ondes seront indexées par "1"- pour une onde incidente, "2"- pour une onde transmise, et "r"- pour une onde réfléchie.

Pour tenir en compte les conditions limites (8.3-8.4) dans tous les points de l'interface les phases des trois ondes doivent être les mêmes (*cf.* Eq.8.10) :

$$\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{t} = \mathbf{P}_r \cdot \mathbf{t} = \mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{t} \quad (8.31)$$

où  $\mathbf{t}$  est le vecteur de position à l'interface de séparation. En faisant la substitution de la relation d'identité  $\mathbf{t} = -\mathbf{s} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{t})$  dans l'équations. (8.31) après certaines transformation on obtient :

$$(\mathbf{s} \times \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1) = (\mathbf{s} \times \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_2) = (\mathbf{s} \times \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_r) \quad (8.32)$$

ou

$$(\mathbf{s} \times \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1 - \mathbf{s} \times \mathbf{P}_2) = 0, \quad (\mathbf{s} \times \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1 - \mathbf{s} \times \mathbf{P}_r) = 0 \quad (8.33)$$

Parce que les secondes termes sont des vecteurs dans le plan de l'interface et sont perpendiculaires à toutes vecteurs  $\mathbf{s} \times \mathbf{t}$  qui se trouvent eux aussi dans ce plan, on obtient

$$\mathbf{P}_1 \times \mathbf{s} = \mathbf{P}_r \times \mathbf{s} = \mathbf{P}_2 \times \mathbf{s} \quad (8.34)$$

A partir de cette relation, on peut conclure que toutes les vecteurs  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_r, \mathbf{e}_2$  et  $\mathbf{s}$  appartiennent au même plan; un autre plan est formé par les vecteurs  $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_r, \mathbf{f}_2$  et  $\mathbf{s}$ . Toutefois, ces plans ne sont pas les mêmes et l'angle qui les séparent est noté comme  $\gamma$  (cf. Fig.8.1). Plus précisément, cet angle est défini comme l'angle entre les projections des vecteurs  $\mathbf{e}_1, \mathbf{f}_1$  sur l'interface de séparation

$$\cos \gamma = \frac{[\mathbf{s} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{e}_1)] \cdot [\mathbf{s} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{f}_1)]}{|\mathbf{s} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{e}_1)| |\mathbf{s} \times (\mathbf{s} \times \mathbf{f}_1)|} = \frac{[\mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{e}_1) - \mathbf{e}_1] \cdot [\mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{f}_1) - \mathbf{f}_1]}{|\mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{e}_1) - \mathbf{e}_1| |\mathbf{s}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{f}_1) - \mathbf{f}_1|}$$

Avec l'introduction des angles  $\theta_1$  and  $\psi_1$  comme  $\cos \theta_1 = \mathbf{s} \cdot \mathbf{e}_1$  et  $\cos \psi_1 = \mathbf{s} \cdot \mathbf{f}_1$  (cf. Fig.8.1), cette relation peut être réécrite comme

$$\cos \alpha_1 = \cos \theta_1 \cos \psi_1 + \sin \theta_1 \sin \psi_1 \cos \gamma \quad (8.35)$$

Cette relation est valable pour les deux ondes réfractée et transmise avec la même angle  $\gamma$ .

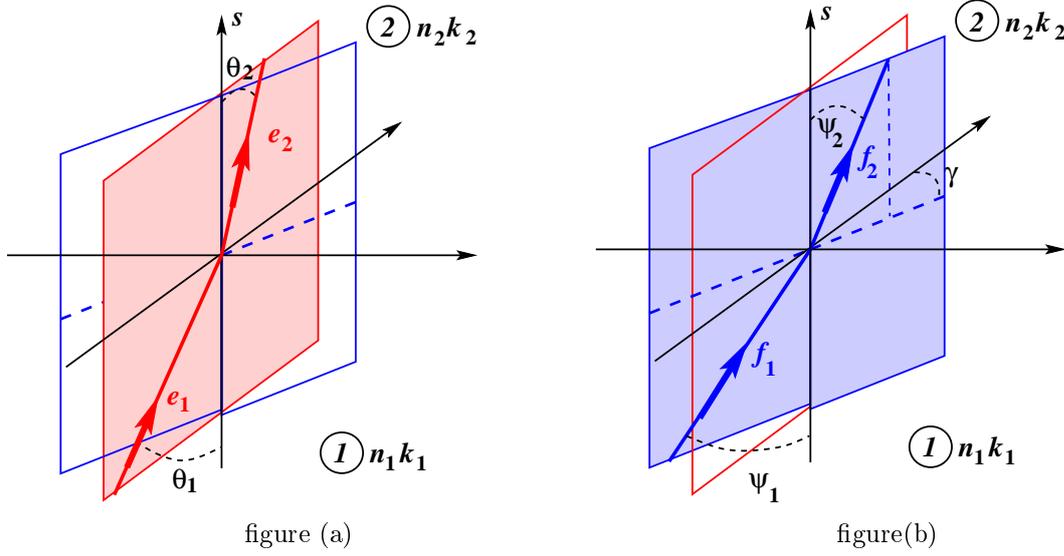
### 8.3.1 Les propriétés de la réflexion d'une onde électromagnétique

L'onde incidente et l'onde réfléchie se propage dans le même milieu avec  $n = n_1$  and  $k = k_1$ , et à partir des relations (8.18) on peut écrire :

$$N_1^2 - K_1^2 = N_r^2 - K_r^2, \quad N_1 K_1 \cos \alpha_1 = N_r K_r \cos \alpha_r \quad (8.36)$$

En substituant (8.35), écrite pour les deux ondes, dans la seconde relation (8.36) on obtient

$$N_1 K_1 (\cos \theta_1 \cos \psi_1 + \sin \theta_1 \sin \psi_1 \cos \gamma) = N_r K_r (\cos \theta_r \cos \psi_r + \sin \theta_r \sin \psi_r \cos \gamma) \quad (8.37)$$



**Figure 8.1.** La partie réelle (a) et imaginaire (b) des ondes incidentes et transmises. Le plan rouge est celui des vecteurs  $\mathbf{e}_1$  et  $\mathbf{s}$ , le bleu est celui de  $\mathbf{f}_1$  et  $\mathbf{s}$ .

Il s'ensuit de la première relation (8.34), écrite séparément pour les deux parties imaginaires et réelle :

$$N_1 \sin \theta_1 = N_r \sin \theta_r, \quad K_1 \sin \psi_1 = K_r \sin \psi_r \tag{8.38}$$

En substituant (8.38) dans (8.37) on obtient :

$$N_1 K_1 \cos \theta_1 \cos \psi_1 = N_r K_r \cos \theta_r \cos \psi_r \tag{8.39}$$

Maintenant remplaçons (8.35), écrite pour les deux ondes, dans la première relation (8.36) :

$$N_1^2 \cos^2 \theta_1 - K_1^2 \cos^2 \psi_1 = N_r^2 \cos^2 \theta_r - K_r^2 \cos^2 \psi_r \tag{8.40}$$

La combinaison des deux équations (8.39) et (8.40) mène à cette expression :

$$N_1^2 \cos^2 \theta_1 - N_r^2 \cos^2 \theta_r = (K_r^2 \cos^2 \psi_r) (N_r^2 \cos^2 \theta_r) / (N_1^2 \cos^2 \theta_1) - K_r^2 \cos^2 \psi_r \tag{8.41}$$

ou

$$(N_1^2 \cos^2 \theta_1 - N_r^2 \cos^2 \theta_r) [1 + (K_r^2 \cos^2 \psi_r) / (N_1^2 \cos^2 \theta_1)] = 0 \tag{8.42}$$

Cette équation n'a qu'une solution triviale

$$N_1 \cos \theta_1 = -N_r \cos \theta_r, \quad K_1 \cos \psi_1 = -K_r \cos \psi_r \tag{8.43}$$

ou

$$\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s} = -\mathbf{P}_r \cdot \mathbf{s} \quad (8.44)$$

où (8.39) est utilisée. La combinaison avec les relations (8.38) donne pour l'onde réfléchie :

$$N_r = N_1, \quad K_r = K_1, \quad \theta_r = \pi - \theta_1, \quad \psi_r = \pi - \psi_1 \quad (8.45)$$

### 8.3.2 Les propriétés de la réfraction d'une onde électromagnétique

A partir des relations (8.34), écrites séparément pour la partie réelle et pour la partie imaginaire, il s'ensuit pour une onde réfractée :

$$N_2 \sin \theta_2 = N_1 \sin \theta_1, \quad K_2 \sin \psi_2 = K_1 \sin \psi_1 \quad (8.46)$$

La combinaison de la deuxième relation dans (8.18) et (8.35), écrites pour une onde transmise, et la substitution de (8.46) mène à :

$$N_2 K_2 \cos \theta_2 \cos \psi_2 = G, \quad G = n_2 k_2 - N_1 K_1 \sin \theta_1 \sin \psi_1 \cos \gamma \quad (8.47)$$

La première relation dans (8.18) prise pour une onde transmise peut être écrite dans cette forme :

$$N_2^2 \cos^2 \theta_2 + N_2^2 \sin^2 \theta_2 - K_2^2 \cos^2 \psi_2 - K_2^2 \sin^2 \psi_2 = n_2^2 - k_2^2 \quad (8.48)$$

ou, en substituant (8.46)

$$N_2^2 \cos^2 \theta_2 - K_2^2 \cos^2 \psi_2 = F, \quad F = K_1^2 \sin^2 \psi_1 - N_1^2 \sin^2 \theta_1 + n_2^2 - k_2^2 \quad (8.49)$$

La combinaison de (8.47) et (8.49) donne une équation pour  $N_2 \cos \theta_2$

$$(N_2 \cos \theta_2)^4 - (N_2 \cos \theta_2)^2 F - G = 0 \quad (8.50)$$

La solution de cette équation, et l'expression pour  $K_2 \cos \psi_2$  sont :

$$(N_2 \cos \theta_2)^2 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{F^2 + 4G^2} + F \right) \quad (8.51)$$

$$(K_2 \cos \psi_2)^2 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{F^2 + 4G^2} - F \right) \quad (8.52)$$

La combinaison de ces deux équations avec les relations (8.46) donne :

$$N_2^2 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{F^2 + 4G^2} + K_1^2 \sin^2 \psi_1 + N_1^2 \sin^2 \theta_1 + n_2^2 - k_2^2 \right] \quad (8.53)$$

$$K_2^2 = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{F^2 + 4G^2} + K_1^2 \sin^2 \psi_1 + N_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2 + k_2^2 \right] \quad (8.54)$$

Les relations (8.46, 8.51–8.54) donnent une solution formelle pour ce qui est appelée la partie cinématique du problème de la réfraction, à savoir les deux angles directionnels

de l'onde transmise. Nonobstant, cette solution n'est pas complète car elle n'assigne pas un signe propre pour  $\cos \theta_2$  et  $\cos \psi_2$ . Pourtant, une chose peut être dérivée à partir de l'équation (8.47) : quand  $G > 0$  les angles ont le même signe, mais si  $G < 0$  leurs signes sont opposés. Toutefois, afin de déterminer proprement une solution finale il est nécessaire une analyse détaillée, similaire à celles donnée par Pincherle (1947), avec la considération des flux d'énergie à travers l'interface de deux milieux.

### 8.3.3 La réciprocité entre une onde incidente et une onde transmise

Les équations (8.46) ont une forme symétrique relative aux ondes incidentes et transmises. On peut réécrire deux autres équations (8.47) et (8.49) aussi avec une symétrie de la même manière :

$$n_2 k_2 - N_2 K_2 \cos \theta_2 \cos \psi_2 = n_1 k_1 - N_1 K_1 \cos \theta_1 \cos \psi_1 \quad (8.55)$$

$$N_2^2 \cos^2 \theta_2 - K_2^2 \cos^2 \psi_2 - n_2^2 + k_2^2 = N_1^2 \cos^2 \theta_1 - K_1^2 \cos^2 \psi_1 - n_1^2 + k_1^2 \quad (8.56)$$

Ces équations et les équations (8.46) peuvent déterminer complètement les caractéristiques géométriques de l'onde transmise pour toutes ondes incidentes. Cependant, si nous changeons les places de deux ondes et considérons l'onde transmise comme celle incidente (avec la direction de propagation  $\mathbf{e}$  et l'orientation du vecteur  $\mathbf{s}$  opposées, bien sûr), on obtient exactement le même ensemble d'équations, et la nouvelle onde transmise dans le milieu 1 sera la même que l'onde incidente dans la situation initiale.

## 8.4 Les Loïs de Fresnel

Suivant Dupertui et al. (1994) les deux intensités d'une onde électromagnétique sont décomposé en deux composantes orthogonales en utilisant les vecteurs orthogonales complexes unitaires

$$\mathbf{h}_1 = \frac{\mathbf{s} \times \mathbf{P}}{\sqrt{(\mathbf{s} \times \mathbf{P})^2}}, \quad \mathbf{h}_2 = \frac{\mathbf{P} \times \mathbf{h}_1}{P_0 \tilde{n}} \quad (8.57)$$

avec  $\mathbf{h}_1^2 = \mathbf{h}_2^2 = 1$ ,  $\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{h}_2 = \mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{P} = \mathbf{h}_2 \cdot \mathbf{P} = 0$  (mais  $\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{h}_2^* \neq 0$  etc.). Dans le cas général l'amplitude complexe du champ de l'intensité électrique  $\mathbf{E}_0$  (Eq.8.10) peut être présenté comme :

$$\mathbf{E}_0 = E_{PE} \mathbf{h}_1 + E_{PM} \mathbf{h}_2 + \frac{E_{0\parallel}}{P_0 \tilde{n}} \mathbf{P} \quad (8.58)$$

En appliquant la deuxième équation (8.11) on obtient  $E_{0\parallel} = 0$ , ainsi la décomposition du champ électrique en deux composantes est complète. Néanmoins, si on considère l'onde  $\mathbf{E}_0$  avec un autre vecteur d'onde  $\mathbf{P}'$  à l'intérieur du milieu avec  $\tilde{n} = \tilde{n}'$  (*i.e.*  $\mathbf{P} = \mathbf{P}_1$  et  $\mathbf{P}' = \mathbf{P}_2$ ) le coefficient correspondant dans la décomposition (8.58) ne sera pas être nul

$$E_{0\parallel} = -\frac{P_0 \tilde{n}}{\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}'} (E_{PE} \mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{P}' + E_{PM} \mathbf{h}_2 \cdot \mathbf{P}') \quad (8.59)$$

D'une manière similaire l'intensité du champ magnétique

$$\mathbf{H}_0 = H_{PM}\mathbf{h}_1 + H_{PE}\mathbf{h}_2 \quad (8.60)$$

où est utilisé le fait que l'amplitude complexe  $\mathbf{H}_0$  est orthogonal au vecteur d'onde complexe  $\mathbf{P}$ , suivant la deuxième équation (8.12). On note, que l'intensité du champ électrique  $\mathbf{E}_0$  donne une description complète de l'onde électromagnétique, parce que d'après la première équation (8.11) l'intensité du champ magnétique peut être calculée, ainsi,

$$H_{PE} = E_{PE} \frac{P_0 \tilde{n}}{\mu\omega}, \quad H_{PM} = -E_{PM} \frac{P_0 \tilde{n}}{\mu\omega} \quad (8.61)$$

Les coefficients complexes des intensités du champs électriques sont :

$$E_{PE} = \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{h}_1, \quad E_{PM} = \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{h}_2 \quad (8.62)$$

Dans la suite de l'analyse des ondes électromagnétiques la décomposition (8.57-8.60) est utilisée indépendamment pour chaque type d'onde, *i.e.* les vecteurs  $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$  sont construites sur la base du vecteur d'onde  $\mathbf{P}$  de chaque onde. Cependant, en raison de la relation (8.34) tous les vecteurs  $\mathbf{h}_1$  sont les mêmes pour toutes les ondes incidentes, réfléchie ou transmise. Les vecteurs  $\mathbf{h}_2$  sont différent car  $\mathbf{P}$  différent, mais l'orthogonalité avec  $\mathbf{h}_1$  ne s'altère pas. On note, que tous les produits, scalaires et vectorielles, sont définis sans la conjugaison complexe, ce qui ne conduise pas à une confusion s'il est régulièrement appliqué.

En appliquant les conditions limites (8.3-8.4) au problème considéré et rappelant que le champ électromagnétique dans le milieu 1 se compose de deux ondes, on obtient

$$\mathbf{s} \times \mathbf{h}_1 (E_{PE2} - E_{PE1} - E_{PEr}) + \quad (8.63)$$

$$(\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2)_2 E_{PM2} - (\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2)_1 E_{PM1} - (\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2)_r E_{PMr} = 0$$

$$(\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2)_2 \epsilon_2 E_{PM2} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2)_1 \epsilon_1 E_{PM1} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2)_r \epsilon_1 E_{PMr} = \Omega \quad (8.64)$$

$$\mathbf{s} \times \mathbf{h}_1 (H_{PM2} - H_{PM1} - H_{PMr}) + \quad (8.65)$$

$$(\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2)_2 H_{PE2} - (\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2)_1 H_{PE1} - (\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2)_r H_{PEr} = 0$$

$$(\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2)_2 \mu_2 H_{PE2} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2)_1 \mu_1 H_{PE1} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2)_r \mu_1 H_{PEr} = 0 \quad (8.66)$$

où tous les produits de  $\mathbf{s}$  avec  $\mathbf{h}_2$  sont indexés pour chaque onde séparément. Cependant, en raison de la relation

$$\mathbf{s} \times \mathbf{h}_2 = -\frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}}{P_0 \tilde{n}} \mathbf{h}_1 \quad (8.67)$$

tous les trois derniers termes dans la partie gauche de l'équation (8.63) sont collinéaires et orthogonaux au premier terme. La même chose est vraie pour l'équation (8.65). En raison de cette orthogonalité, les équations (8.63) et (8.65) donnent lieu à quatre équations :

$$E_{PE2} = E_{PE1} + E_{PEr} \quad (8.68)$$

$$\begin{aligned}
 H_{PM2} &= H_{PM1} + H_{PMr} \\
 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2}{\tilde{n}_2} E_{PM2} &= \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1}{\tilde{n}_1} E_{PM1} + \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_r}{\tilde{n}_1} E_{PMr} \\
 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2}{\tilde{n}_2} H_{PE2} &= \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1}{\tilde{n}_1} H_{PE1} + \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_r}{\tilde{n}_1} H_{PEr}
 \end{aligned} \tag{8.69}$$

L'équation (8.66) est redondant. En effet, elle peut être réécrite en utilisant la relation

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{h}_2 = \frac{\sqrt{(\mathbf{s} \times \mathbf{P})^2}}{P_0 \tilde{n}} \tag{8.70}$$

où le numérateur est le même pour toutes les ondes selon (8.34)

$$\frac{\mu_2}{\tilde{n}_2} H_{PE2} = \frac{\mu_1}{\tilde{n}_1} (H_{PE1} - H_{PEr}) \tag{8.71}$$

En substituant le (8.61) on obtient la première équation dans (8.68).

L'équation (8.64) peut être utilisée pour le calcul de la densité de charge surfacique  $\Omega$ . Donc l'équations (8.68-8.69) seules relient les intensités incidentes, réfléchies et transmises.

Utilisant l'équation (8.44) les relations (8.69) peuvent se transformées en :

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2}{\tilde{n}_2} E_{PM2} &= \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1}{\tilde{n}_1} (E_{PM1} - E_{PMr}) \\
 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2}{\tilde{n}_2} H_{PE2} &= \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1}{\tilde{n}_1} (H_{PE1} - H_{PEr})
 \end{aligned}$$

et par la substitution (8.61)

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 \mu_2}{\tilde{n}_2^2} H_{PM2} &= \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 \mu_1}{\tilde{n}_1^2} (H_{PM1} - H_{PMr}) \\
 \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2}{\mu_2} E_{PE2} &= \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1}{\mu_1} (E_{PE1} - E_{PEr})
 \end{aligned} \tag{8.72}$$

La combinaison de (8.68) et (8.72) donne les formules de Fresnel :

$$E_{PEr} = r_{PE} E_{PE1}, \quad r_{PE} = \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2}{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2} \tag{8.73}$$

$$E_{PE2} = t_{PE} E_{PE1}, \quad t_{PE} = \frac{2\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1}{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2} \tag{8.74}$$

$$H_{PMr} = r_{PM} H_{PM1}, \quad r_{PM} = \frac{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 \mu_1 / \tilde{n}_1^2 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 \mu_2 / \tilde{n}_2^2}{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 \mu_1 / \tilde{n}_1^2 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 \mu_2 / \tilde{n}_2^2} \tag{8.75}$$

$$H_{PM2} = t_{PM} H_{PM1}, \quad t_{PM} = \frac{2\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 \mu_1 / \tilde{n}_1^2}{\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 \mu_1 / \tilde{n}_1^2 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 \mu_2 / \tilde{n}_2^2} \tag{8.76}$$

## 8.5 Bilan d'énergie

Afin d'obtenir les expressions de la réflectivité et la transmittivité d'une onde plane il est nécessaire de calculer le flux d'énergie dans les deux cotés de l'interface qui sépare deux milieux. Dans le milieu 1 il y a deux ondes, incidente et réfléchie, ainsi le vecteur de Poynting (8.23) est :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{S}} = & \frac{1}{2} \mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_1^* e^{-2K_1 \mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{r}} + \frac{1}{2} \mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_r^* e^{-2K_r \mathbf{f}_r \cdot \mathbf{r}} + \\ & \frac{1}{2} (\mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_r^* e^{i(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_r^*) \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_1^* e^{i(\mathbf{P}_r - \mathbf{P}_1^*) \cdot \mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (8.77)$$

où les vecteurs sont les amplitudes des intensités des ondes correspondant tandis que la partie exponentielle qui varie dans l'espace est séparée. Les premier et deuxième termes dépend respectivement des paramètres de l'onde incidente et réfléchie, et peuvent être attribués aux flux d'énergie transporté par ces ondes. Le dernier terme ne peut pas être attribué à aucune de ces ondes et représente l'énergie d'interaction des ondes.

A l'interface, le vecteur  $\mathbf{r} \perp \mathbf{s}$ , donc il est suffisant de préserver les composantes du vecteurs d'ondes  $\mathbf{P}$  qui sont orthogonales à  $\mathbf{s}$ . A partir des relations (8.34) qui sont les mêmes pour tous les types, on peut remplacer les composants correspondants dans (8.77) comme

$$\begin{aligned} K_r \mathbf{f}_r & \rightarrow K_1 \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_r^* & \rightarrow 2iK_1 \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{P}_r - \mathbf{P}_1^* & \rightarrow 2iK_1 \mathbf{f}_1 \end{aligned} \quad (8.78)$$

et de séparer définitivement le multiplicateur exponentielle des produits vectorielle des amplitudes. Parce que la même équation est valide pour l'onde transmise, cet multiplicateur peut être omet et les relations entre les amplitudes seules peuvent être considérées. Les amplitudes de flux d'énergie qui correspond aux deux milieux sont :

$$\tilde{\mathbf{S}}_1 = \frac{1}{2} \mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_1^* + \frac{1}{2} \mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_r^* + \frac{1}{2} (\mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_r^* + \mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_1^*) \quad (8.79)$$

$$\tilde{\mathbf{S}}_2 = \frac{1}{2} \mathbf{E}_2 \times \mathbf{H}_2^* \quad (8.80)$$

### 8.5.1 La polarisation PE

Le cas particulier quand l'intensité électrique de l'onde électromagnétique incidente est polarisée le long de  $\mathbf{h}_1$  est analysé premièrement. Dans ce cas les ondes inductives sont elles aussi polarisées dans la même direction comme il découle des relations de Fresnel (8.73-8.76).

Il est connu à partir de la théorie de la propagation des ondes électromagnétiques que dans le cas d'une onde homogène les intensités du champ électrique et magnétique sont

perpendiculaire et sont orthogonales à la direction de la propagation. Chaque onde peut être décomposée à deux d'ondes indépendantes dans laquelle soit l'intensité électrique ou l'intensité magnétique est orthogonale au plan d'incidence composée par le vecteur onde et la normale à l'interface. Ces ondes sont souvent noté comme TE (*transverse electric*) et TM (*transverse magnetic*) (Rothwell et Cloud , 2001).

Dans le cas du HIPW ces propriétés d'orthogonalité ne sont plus valables, et la décomposition est effectuée de la manière proposé par Dupertui et al. (1994) et décrite dans la section 8.4 quand les vecteurs  $\mathbf{h}_1$  et  $\mathbf{h}_2$  sont introduites. Dans ce cas on obtient soit l'onde avec l'intensité électrique parallèle à l'interface (PE mode) ou l'intensité magnétique parallèle à elle (PM mode). Dans le cas du PE-mode de polarisation le premier terme dans le coté droite de l'équation (8.79) est :

$$\frac{1}{2}E_{PE1}H_{PE1}^*\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2^* = \frac{|E_{PE1}|^2 P_0 \tilde{n}_1^*}{2\omega\mu_1} \mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2^* \quad (8.81)$$

où l'équation (8.61) est utilisée. La substitution de la définition de  $\mathbf{h}_2$  mène à :

$$\frac{|E_{PE1}|^2}{2\omega\mu_1} [\mathbf{P}_1^*(\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{h}_1^*) - \mathbf{h}_1^*(\mathbf{P}_1^* \cdot \mathbf{h}_1)] \quad (8.82)$$

Le flux d'énergie perpendiculaire à l'interfaces est le produit scalaire de  $\tilde{\mathbf{S}}_1$  et  $\mathbf{s}$ . En multipliant (8.82) by  $\mathbf{s}$  il s'ensuit

$$\frac{|E_{PE1}|^2 |\mathbf{h}_1|^2}{2\omega\mu_1} (\mathbf{P}_1^* \cdot \mathbf{s}) \quad (8.83)$$

Un raisonnement similaire donne l'expression pour la projection normale du seconde terme du coté droite de l'équation (8.79)

$$-\frac{|E_{PEr}|^2 |\mathbf{h}_1|^2}{2\omega\mu_1} (\mathbf{P}_1^* \cdot \mathbf{s}) \quad (8.84)$$

avec (8.44) prise en compte.

La projection normale de  $\tilde{\mathbf{S}}_2$  dans (8.80) est

$$\tilde{\mathbf{S}}_2 \cdot \mathbf{s} = \frac{|E_{PE2}|^2 |\mathbf{h}_1|^2}{2\omega\mu_2} (\mathbf{P}_2^* \cdot \mathbf{s}) \quad (8.85)$$

Le premier terme dans la partie de flux d'énergie qui correspond à l'interaction (8.79) peut être écrite

$$\frac{1}{2}E_{PE1}H_{PEr}^*\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_{2r}^* = \frac{E_{PE1}E_{PEr}^*P_0\tilde{n}_1^*}{2\omega\mu_1} \mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_{2r}^* \quad (8.86)$$

où  $\mathbf{h}_{2r}$  est le vecteur qui correspond à l'onde réfléchi. Le vecteur  $\mathbf{h}_1$  est le même pour les deux ondes, et un raisonnement similaire comme pour l'équation (8.82) donne :

$$\frac{E_{PE1}E_{PEr}^*}{2\omega\mu_1} [\mathbf{P}_r^*(\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{h}_1^*) - \mathbf{h}_1^*(\mathbf{P}_r^* \cdot \mathbf{h}_1)] \quad (8.87)$$

et la projection sur la normale de l'interface

$$\frac{E_{PE1}E_{PEr}^*|\mathbf{h}_1|^2}{2\omega\mu_1} (\mathbf{P}_r^* \cdot \mathbf{s}) \quad (8.88)$$

Prise en compte de l'équation (8.44) donne

$$-\frac{E_{PE1}E_{PEr}^*|\mathbf{h}_1|^2}{2\omega\mu_1} (\mathbf{P}_1^* \cdot \mathbf{s}) \quad (8.89)$$

Le dernier terme dans la partie de l'interaction du flux d'énergie (8.79) est

$$\frac{1}{2}E_{PEr}H_{PE1}^*\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2^* = \frac{E_{PEr}E_{PE1}^*P_0\tilde{n}_1^*}{2\omega\mu_1}\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2^* \quad (8.90)$$

et son projection sur le vecteur normal  $\mathbf{s}$  est

$$\frac{E_{PEr}E_{PE1}^*|\mathbf{h}_1|^2}{2\omega\mu_1} (\mathbf{P}_1^* \cdot \mathbf{s}) \quad (8.91)$$

En assimilant le flux d'énergie perpendiculaire à la frontière à partir de (8.79-8.80) et en substituant (8.83-8.91) on obtient l'équation de l'équilibre énergétique dans la forme suivante

$$\frac{(\mathbf{P}_1^* \cdot \mathbf{s})}{2\omega\mu_1} (|E_{PE1}|^2 - |E_{PEr}|^2 + E_{PEr}E_{PE1}^* - E_{PE1}E_{PEr}^*) = \frac{(\mathbf{P}_2^* \cdot \mathbf{s})}{2\omega\mu_2} |E_{PE2}|^2 \quad (8.92)$$

En substituant les formules de Fresnel (8.73-8.74), en utilisant l'identité  $X - X^* = 2i\Im(X)$ , et en préservant seulement la partie réelle de l'équation on obtient

$$\begin{aligned} \frac{N_1 \cos \theta_1}{2\omega\mu_1} |E_{PE1}|^2 (1 - |r_{PE}|^2) + \frac{K_1 \cos \psi_1}{\omega\mu_1} |E_{PE1}|^2 \Im(r_{PE}) = \\ \frac{N_2 \cos \theta_2}{2\omega\mu_2} |E_{PE1}|^2 |t_{PE}|^2 \end{aligned} \quad (8.93)$$

La réflectivité et la transmittivité correspondantes sont

$$R = |r_{PE}|^2, \quad T = \frac{N_2 \cos \theta_2 \mu_1}{N_1 \cos \theta_1 \mu_2} |t_{PE}|^2 \quad (8.94)$$

Notons qu'en raison du fait qu'il existe un terme d'interaction la somme  $R + T \neq 1$  et

$$R + T + I = 1 \quad (8.95)$$

avec

$$I = -\frac{2K_1 \cos \psi_1}{N_1 \cos \theta_1} \Im(r_{PE}) \quad (8.96)$$

qui est l'intensité d'interférence entre les ondes incidentes et celle réfléchies.

Le bilan d'énergie exprimé sous la forme (8.95) peut être vérifié par une substitution directe de la formule de Fresnel (voir A.2.1).

### 8.5.2 La polarisation PM

Pour le mode de polarisation PM (PM-mode polarization) le premier terme dans la coté droite de l'équation (8.79) est

$$\frac{1}{2}E_{PM1}H_{PM1}^*\mathbf{h}_2 \times \mathbf{h}_1^* = -\frac{|H_{PM1}|^2\omega\mu_1}{2P_0\tilde{n}_1}\mathbf{h}_2 \times \mathbf{h}_1^* \quad (8.97)$$

avec l'équation (8.61) utilisée. La substitution de la définition de  $\mathbf{h}_2$  donne

$$\frac{|H_{PM1}|^2\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} [\mathbf{P}_1(\mathbf{h}_1^* \cdot \mathbf{h}_1) - \mathbf{h}_1(\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{h}_1^*)] \quad (8.98)$$

En appliquant le même raisonnement comme pour l'équation (8.83) on peut obtenir le flux normal de l'énergie à l'interface

$$\frac{|H_{PM1}|^2|\mathbf{h}_1|^2\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} (\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s}) \quad (8.99)$$

D'une manière similaire la projection normale du seconde terme dans le coté droite de l'équation (8.79)

$$-\frac{|H_{PMr}|^2|\mathbf{h}_1|^2\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} (\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s}) \quad (8.100)$$

avec (8.44) prise en compte.

La projection normale de  $\tilde{\mathbf{S}}_2$  dans (8.80) est

$$\tilde{\mathbf{S}}_2 \cdot \mathbf{s} = \frac{|H_{PM2}|^2|\mathbf{h}_1|^2\omega\mu_2}{2P_0^2\tilde{n}_2^2} (\mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{s}) \quad (8.101)$$

Le premier terme de la partie d'interférence du flux d'énergie (8.79) peut être écrit comme

$$\frac{H_{PM1}H_{PMr}^*|\mathbf{h}_1|^2\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} (\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s}) \quad (8.102)$$

et le deuxième terme

$$-\frac{H_{PMr}H_{PM1}^*|\mathbf{h}_1|^2\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} (\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s}) \quad (8.103)$$

L'équation du bilan d'énergie pour les ondes en PM-mode de polarisation est :

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s})\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} (|H_{PM1}|^2 - |H_{PMr}|^2 - H_{PMr}H_{PM1}^* + H_{PM1}H_{PMr}^*) = \\ \frac{(\mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{s})\omega\mu_2}{2P_0^2\tilde{n}_2^2} |H_{PM2}|^2 \end{aligned}$$

En utilisant la formule de Fresnel (8.75-8.76) et l'identité  $X - X^* = 2i\Im(X)$  on obtient :

$$\frac{(\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{s})|H_{PM1}|^2\omega\mu_1}{2P_0^2\tilde{n}_1^2} [1 - |r_{PM}|^2 - 2i\Im(r_{PM})] = \frac{(\mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{s})|H_{PM1}|^2\omega\mu_2}{2P_0^2\tilde{n}_2^2} |t_{PM}|^2 \quad (8.104)$$

Le coefficient complexe dans les deux cotés de l'équation peut être écrit comme :

$$\frac{(\mathbf{P}_\alpha \cdot \mathbf{s}) \mu_\alpha}{\tilde{n}_\alpha^2} = A_\alpha + iB_\alpha \quad (8.105)$$

$$A_\alpha = \mu_\alpha \frac{N_\alpha \cos \theta_\alpha (n_\alpha^2 - k_\alpha^2) + 2n_\alpha k_\alpha K_\alpha \cos \psi_\alpha}{(n_\alpha^2 + k_\alpha^2)^2}$$

$$B_\alpha = \mu_\alpha \frac{K_\alpha \cos \psi_\alpha (n_\alpha^2 - k_\alpha^2) - 2n_\alpha k_\alpha N_\alpha \cos \theta_\alpha}{(n_\alpha^2 + k_\alpha^2)^2}, \quad \alpha = 1, 2$$

En introduisant ça dans l'équation (8.104) et en prenant la partie réelle de cette équation on obtient :

$$\frac{|H_{PM1}|^2 A_1}{2\omega} (1 - |r_{PM}|^2) + \frac{|H_{PM1}|^2 B_1}{\omega} \Im(r_{PM}) = \frac{|H_{PM1}|^2 A_2}{2\omega} |t_{PM}|^2 \quad (8.106)$$

La réflectivité, la transmittivité et l'intensité de l'interférence correspondante pour des ondes en PM-mode de polarisation sont :

$$R = |r_{PM}|^2, \quad T = \frac{A_2}{A_1} |t_{PM}|^2, \quad I = -2 \frac{B_1}{A_1} \Im(r_{PM}) \quad (8.107)$$

L'expression du bilan de l'énergie de la forme suivante (8.95) pour des ondes en PM-mode polarisées est aussi vérifiée par une directe substitution de la formule de Fresnel (voir A.2.2).

### 8.5.3 Transmission de l'énergie

Les relations (8.46, 8.51–8.54) donnent une solution formelle pour deux angles directionnelles d'une onde transmise. Cependant, les signes de  $\cos \theta_2$  et  $\cos \psi_2$  ne sont pas déterminés. La connaissance des expressions de la transmittivité  $T$  pour les deux modes de polarisation peut donner une indication dans ce sens. Cette section suit l'analyse apportée par l'article de Pincherle (1947).

Dans le cas de l'onde dans PE-mode de polarisation la transmittivité est donnée par (8.94). La condition pour que le flux d'énergie ne soit pas négative est :

$$N_2 \cos \theta_2 \geq 0 \quad (\text{PE - mode}) \quad (8.108)$$

Comme ce qui découle de l'équation (8.47)

$$K_2 \cos \psi_2 \geq 0, \quad G \geq 0 \quad (8.109)$$

$$K_2 \cos \psi_2 < 0, \quad G < 0, \quad (\text{PE - mode}) \quad (8.110)$$

On peut écrire d'une façon plus générale

$$\text{sign}(K_2 \cos \psi_2) = \text{sign}(N_2 \cos \theta_2) \cdot \text{sign}(G) \quad (8.111)$$

Quand  $G \neq 0$ , les deux cosinus ne sont pas égaux à zéro, comme on peut voir à partir des équations (8.51–8.52). Néanmoins, une situation singulière s'impose si  $G = 0$ . La solution dans ce cas est

$$N_2 \cos \theta_2 = 0, \quad G = 0, \quad F < 0 \tag{8.112}$$

$$K_2 \cos \psi_2 = 0, \quad G = 0, \quad F > 0 \tag{8.113}$$

La première situation correspond à une réflexion interne totale. Par exemple, dans le cas de deux milieux non absorbants ( $k_1 = k_2 = 0$ )  $K_1 = 0$  pour un de ces milieux, ainsi  $G \equiv 0$  comme il suit de (8.47). Si  $n_1 > n_2$  et  $\theta_1 > \arcsin(n_2/n_1)$  le facteur  $F < 0$  (voir 8.49). Notant, que  $K_2 \cos \psi_2 > 0$  (voir 8.109) et donc le champ électromagnétique s'imprègne dans le deuxième milieu comme onde stationnaire qui s'atténue d'une manière exponentielle sans une transmission d'énergie.

Quand un de deux milieux est absorbant la réflexion interne totale se produise uniquement pour des angles particuliers, qui sont déterminés par deux conditions en (8.112). Cependant, une analyse complète pour toutes les situations n'a pas été faite.

Pour une onde polarisée en PM-mode la transmittivité  $T$  est donnée dans (8.107). La condition de non négativité du flux d'énergie dans le deuxième milieu est :

$$N_2 \cos \theta_2 (n_2^2 - k_2^2) + 2n_2 k_2 K_2 \cos \psi_2 \geq 0 \quad (\text{PM - mode}) \tag{8.114}$$

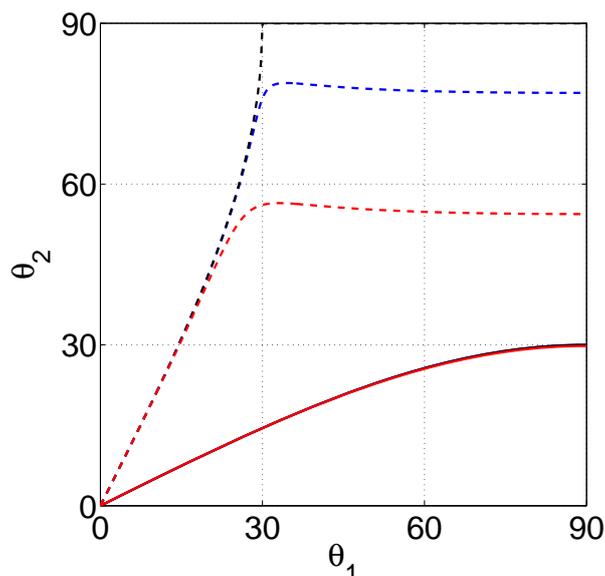
Cette inégalité avec (8.111) déterminent les signes des deux cosinus directionnels de l'onde transmise.

Les ondes avec ce mode de polarisations démontre un comportement inhabituel et contre intuition. Notamment, il est possible, que pour une onde transmise le cosinus de direction de la partie réelle du vecteur d'onde  $\cos \theta_2 < 0$ , donc la propagation de l'onde va être dans la direction opposée de l'onde incidente. Par contre la condition (8.114) est toujours remplie.

Situations où le côté gauche de (8.114) devient zéro n'est pas analysées ici. Cependant, il est raisonnable de supposer, que, en général, elles ne sont pas les mêmes comme pour la condition (8.108). Cela signifie qu'une onde incidente, qui est une superposition des deux modes de polarisation, est transmise uniquement dans une ou autre état de polarisation pour des combinaisons spécifiques de paramètres. Ce phénomène ne concerne pas que HIPW uniquement, mais il est tout à fait connu pour les ondes homogènes aussi.

## 8.6 Exemples de l'application des règles de transmission

Afin de démontrer la différence entre les règles de transmission des ondes homogène et celles hétérogènes propageant dans un milieu absorbant des exemples d'applications de ces règles sont fournies dans la présente section. Il convient de noter que ces exemples sont présentés afin d'illustrer le comportement de rayonnement à l'interface des milieux absorbants, sans une analyse systématique de ce type de comportement.



**Figure 8.2.** Direction de l'onde transmise  $\theta_2$  comme une fonction de la direction de l'onde incidente  $\theta_1$  for  $n_1 = 2, n_2 = 4, k_1 = 0, k_2 = 0$  (lignes noires),  $k_1 = 0.5, k_2 = 1$  (lignes bleu),  $k_1 = 1, k_2 = 3$  (lignes rouges). Les lignes solides correspondent de la transmission du milieu 1 au milieu 2 et les lignes brisées sont pour la transmission opposée. Uniquement les directions des ondes homogènes incidentes sont présentées.

### 8.6.1 Direction de l'onde transmise

La figure 8.2 montre l'angle de l'onde transmise  $\theta_2$  comme une fonction de l'onde incidente pour plusieurs valeurs des indices de réfractons du milieu. Cette angle est calculée en utilisant les relations (8.19, 8.20, 8.46-8.49, 8.53, 8.54). Dans tous les cas l'onde incidente est une onde homogène.

Pour des milieux absorbant  $k_1 = k_2 = 0$  les propriétés de transmission donnent les mêmes résultats comme la relation standard de Snell-Descartes (A.4a) (les lignes noires dans la figure 8.2). Les deux ondes incidente et transmise sont homogènes et il y a une relation de réciprocité entre eux. Grâce à cette réciprocité, les courbes se sont symétrique par rapport à la bissectrice  $\theta_2 = \theta_1$ . Quand une onde passe d'un milieu ayant un indice de réfraction petit  $n_1 < n_2$  l'angle de réfraction de l'onde réfractée varie à l'intérieur d'une intervalle  $0 < \theta_2$  (dans cette exemple  $\theta_2 \approx 30^\circ$ ). Cette dernière angle limite corresponde à l'angle de la réflexion totale de l'onde passant du milieu 2 au milieu 1.

Lorsque les deux milieux sont absorbant, l'onde transmise est inhomogène même si l'onde incidente est homogène, et il n'y a pas de réciprocité entre l'onde homogène passant du milieu 1 au milieu 2 et celle qui passe dans la direction opposée et la cooresponding courbes correspondantes ne sont pas symétriques par rapport à la ligne  $\theta_2 = \theta_1$  (Figure 8.2, lignes rouge ou bleu). On peut voir que l'angle  $\theta_2$  de l'onde transmise varie à l'intérieur du

même intervalle des valeurs indépendamment de  $k_i$  quand une onde passe d'un milieu 1 à un milieu 2 (les lignes solides). Il n'y a pas une réflexion totale pour l'onde qui passe dans la direction opposée (les lignes pointillées). Quand une onde est incidente du milieu 2 qui a un indice de réfraction plus grand  $n_2 > n_1$  (Figure 8.2, lignes pointillés), l'angle de l'onde transmise augmentait avec l'augmentation de  $\theta_1$  jusqu'à ce qu'il atteigne le maximum, puis  $\theta_2$  ne varie pas avec  $\theta_1$ .

La figure 8.3 montre l'angle de l'onde transmise quand l'onde incidente est inhomogène. Le cas quand les trois vecteurs - la normale  $\mathbf{s}$  et les deux vecteurs directionnelles  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{f}$  ne sont pas dans le même plans - est présenté dans la figure 8.3a. On peut voir que les variations de l'angle  $\theta_2$  sont influencées d'une manière significative par l'orientation du vecteur des plans de l'amplitude constante  $\mathbf{f}$  par rapport au vecteur directionnel  $\mathbf{e}$  pour une phase constante. Quand  $\mathbf{f}$  coïncide avec  $\mathbf{e}$  ( $\alpha = 0^\circ$ , onde incidente homogène), la direction de l'onde transmise ne dévie pas de plus de près de  $60^\circ$  de la normale de l'interface (black line). Mais quand  $\alpha$  augmentait jusqu'à  $30^\circ$  (ligne bleu), la dépendance de  $\theta_2$  de  $\theta_1$  change d'une manière significative - elle n'est pas monotone, et l'angle de réfraction  $\theta_2$  atteint son maximum de  $90^\circ$  pour  $\theta_1 \approx 45^\circ$  et puis commence à diminuer avec l'augmentation de  $\theta_1$ . Le cas lorsque  $\theta_2 = 90^\circ$  peut être considéré comme la situation de la réflexion interne totale pour le milieu 2. Cependant, il se produit pour une valeur de  $\theta_1$ , et non pour un intervalle de valeurs de  $\theta_1$ , comme dans le cas des milieux non absorbants.

Une influence similaire de la direction du vecteur  $\mathbf{f}$  sur la direction de l'onde transmise peut être observé sur la figure 8.3b, où l'angle  $\theta_2$  est présentée comme une fonction de  $\theta_1$  quand  $\mathbf{f}$  se trouve dans plusieurs plans différents du plan de vecteurs  $\mathbf{e}$  and  $\mathbf{s}$ .

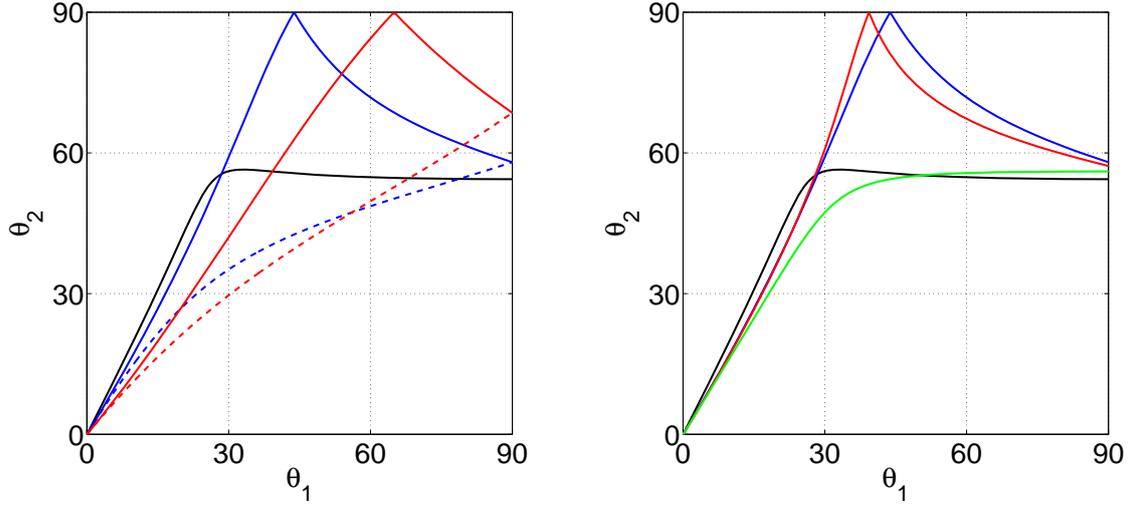
Cette analyse montre que la transmission de la radiation électromagnétiques à travers l'interface entre des milieux absorbants implique un examen des ondes inhomogènes dont les caractéristiques ne peut pas être réduit à celles homogènes. Cela implique que la simulation du transfert radiative dans un milieu absorbant devrait prendre en compte le type et la nature des ondes, avec la paramétrisation correspondante basée sur de deux vecteurs directionnels,  $\mathbf{e}$  and  $\mathbf{f}$ , pour chaque onde.

### 8.6.2 Intensité de l'interférence entre les ondes incidentes et réfléchies

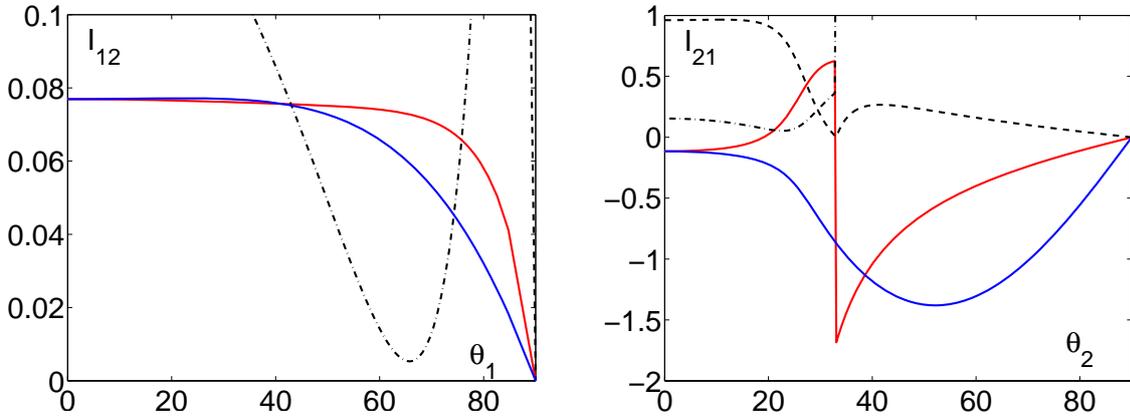
Quand une onde incidente arrive à l'interface à partir d'un milieu absorbant il interagit avec l'onde réfléchie et leur interférence prend une partie dans l'énergie radiative (Eq.8.95). Cette phénomène est absente dans le cas du milieu non absorbant.

La figure 8.4 montre l'intensité de l'interférence  $I$  calculée en utilisant (A.15) et (A.17) pour une onde homogène incidente et présentée comme une fonction de l'angle  $\theta$ . Le cas d'une onde directe est donné dans (a), et le cas d'une onde incidente à partir du milieu 2 qui se dirige vers le milieu 1 est dans (b).

On peut voir dans la Figure 8.4a que l'intensité  $I$  n'est pas très petite (de l'ordre de



**Figure 8.3.** La direction de l'onde transmise  $\theta_2$  comme une fonction des directions de l'onde incidente  $\theta_1$  for  $n_1 = 4, n_2 = 2, k_1 = 3, k_2 = 1$ . Données dans (a) sont pour  $\alpha = 0^\circ$  (ligne noire),  $\alpha = 30^\circ$ , (ligne bleue), et  $\alpha = 60^\circ$  (ligne rouge); les lignes solides correspondent  $\beta = 0^\circ$  et les lignes cassées sont pour  $\beta = 180^\circ$ . Data dans (b) sont pour  $\alpha = 0^\circ$  (ligne noire),  $\alpha = 30^\circ, \beta = 0^\circ$  (ligne bleue),  $\alpha = 30^\circ, \beta = 40^\circ$  (ligne rouge),  $\alpha = 30^\circ, \beta = 90^\circ$  (ligne vert).



**Figure 8.4.** L'intensité d'interférence  $I$  comme une fonction de l'angle d'incidence  $\theta$  pour l'interface entre le milieu avec  $n_1 = 2, k_1 = 1$  et le milieu  $n_2 = 4, k_2 = 3$  (a) et pour la transmission du second milieu au premier milieu (b). Les données sont pour une onde homogène incidente avec l'angle  $\alpha = 0^\circ$  pour PE-polarization (lignes bleus) et pour PM-polarization (lignes rouges). Les lignes noires brisées correspondent à la transmittivité donnée par Eq. (A.12b), les autres lignes brisées pointillées montre la réflectivité (A.16).

8% dans l'exemple actuel) et devrait être prises en compte dans la simulation de transfert radiatif. Cependant, l'énergie de cette interférence, parlant formellement, ne peut pas être attribuée complètement ni à la radiation incidente ni à l'onde réfléchie. On doit choisir la manière de prendre en compte cette énergie dans le modèle numérique. Par exemple, c'est possible de rajouter cette énergie à l'onde réfléchie, car dans le cas d'un milieu absorbant les deux flux d'énergies se dissipent à l'intérieur du milieu.

La figure 8.4b montre une autre situation - l'onde incidente parvient du milieu dont l'indice de réfraction à une grande valeur  $n$  et le coefficient d'absorption  $k$ . Dans ce cas l'intensité d'interférence devienne négative pour certains angles  $\theta$ . Selon la définition de l'intensité  $I$  cela veut dire que le vecteur de Poynting correspondant du flux d'énergie d'interférence est dirigé vers l'interface entre les milieux et contribue à la quantité d'énergie transmise au deuxième milieu. On ne voit pas bien comment interpréter cette situation. Par exemple, on peut réécrire le bilan d'énergie (8.95) dont l'unité représente le flux d'énergie incident, dans la prochaine forme

$$R + T = 1 + |I| \tag{8.115}$$

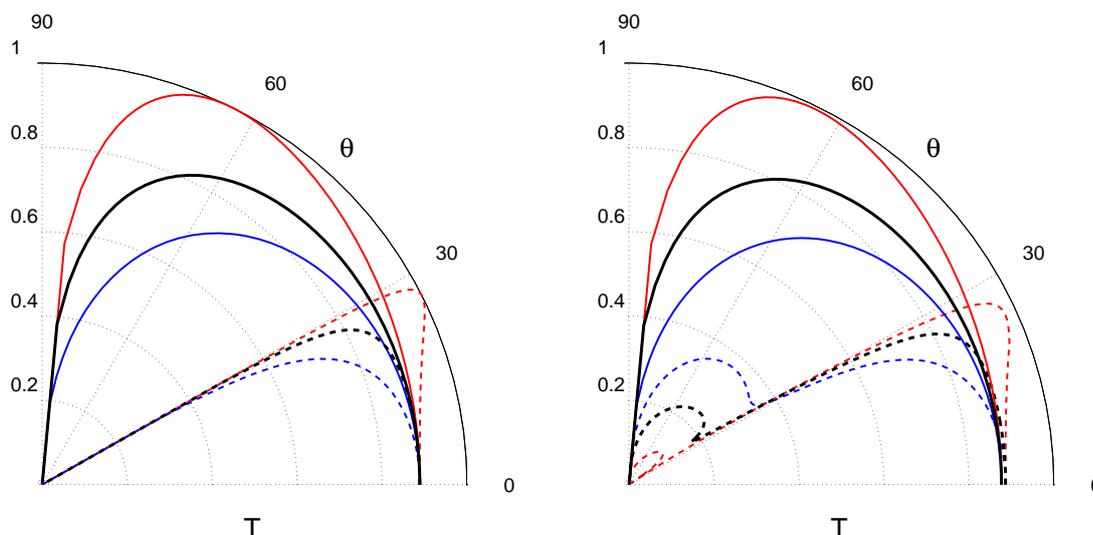
Maintenant, on suppose que les deux terme dans le coté droite de l'équation (8.115) contribuent au flux d'énergie de la radiation incidente ; on peut renormalisé la réflectivité  $R$  et la transmittivité  $T$  et introduire une autre forme de l'équation de l'énergie d'équilibre

$$\hat{R} + \hat{T} = 1, \quad \hat{R} = \frac{R}{1 + |I|}, \quad \hat{T} = \frac{T}{1 + |I|} \tag{8.116}$$

Ce n'est pas clair si cette approche est consistante et adéquate. Néanmoins, en raison du fait que  $R$  et  $T$  ne sont pas négative, la réflectivité renormalisée  $\hat{R}$  et la transmittivité renormalisé  $\hat{T}$  ne sont pas supérieur du 1. Cela semble plus naturel que les situations qui peuvent être trouvées pour certains ensembles de paramètres lorsque  $T$  apparait plus grand que 1. Cette approche est systématiquement utilisée dans la section prochaine de l'analyse de la transmittivité pour des ondes inhomogènes dans un milieu absorbant.

### 8.6.3 La transmittivité angulaire d'une onde homogène et hétérogène dans un milieu absorbant

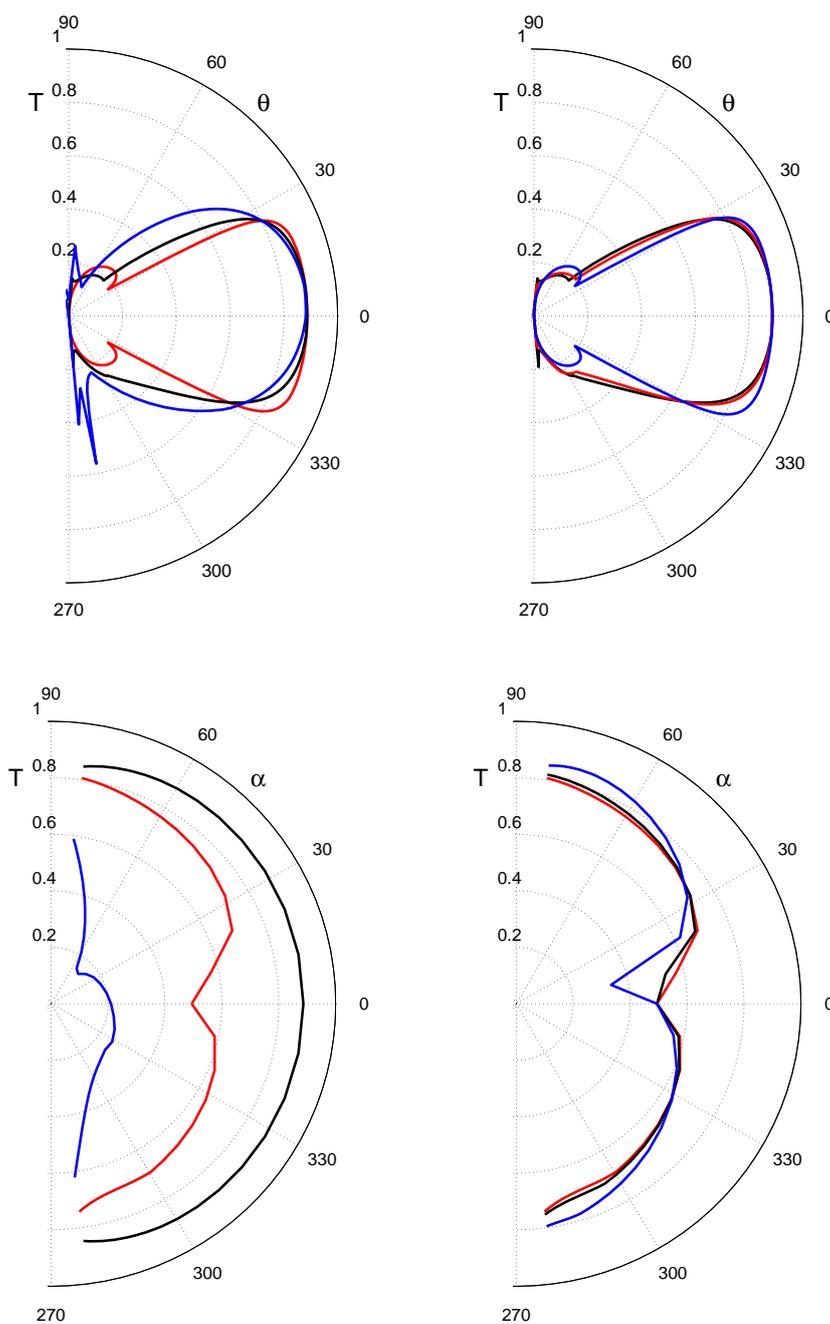
La figure 8.5 montre un diagramme des transmittivités directionnelles pour un milieu non absorbant (a) et un milieu absorbant (b), qui ont été calculés en utilisant (A.12a-A.12b) et (8.116) quand une onde incidente est homogène. Dans le premier cas les résultats correspondent à la prédiction des formules standards de la transmittivité (ou la réflectivité) données par (A.4a). Pour la transmission d'un milieu avec une valeur d'indice de réfraction plus grande on peut voir que au dessus de l'angle  $\theta = 30^\circ$  il y'a une totale réflexion de la radiation incidente (a, lignes pointillées). Quand les deux milieux sont absorbants et l'onde est incidente à partir du milieu ayant un indice de réfraction petit  $n_1$  les transmittivités



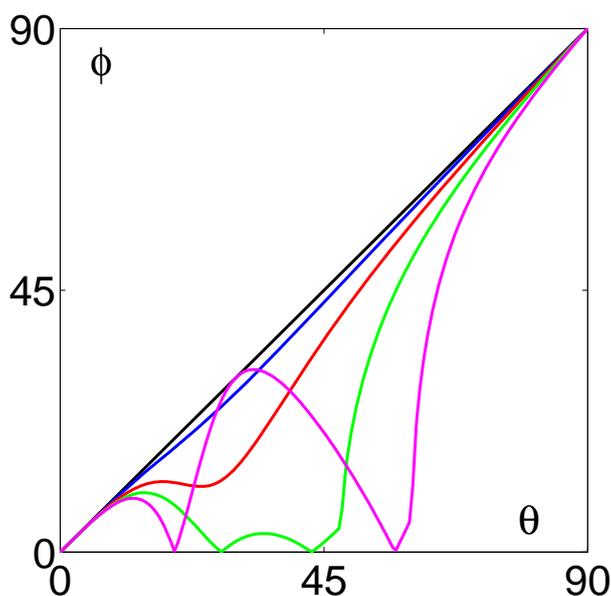
**Figure 8.5.** Les transmissivités angulaires  $T_{PM}$  (lignes rouges),  $T_{PE}$  (lignes bleu),  $0.5(T_{PE} + T_{PM})$  (lignes noires) comme une fonction de l'angle d'incidence  $\theta$  pour l'interface entre deux milieux non absorbants avec  $n_1 = 2$  et  $n_2 = 4$  (a) et entre deux milieux absorbants avec  $n_1 = 2, k_1 = 0.4$  and  $n_2 = 4, k_2 = 1$  (b). Les données sont pour une onde homogène  $\alpha = 0^\circ$  et  $\beta = 0^\circ$  dans (b). Les lignes solides sont pour le passage '1-2' et les lignes brisées sont pour l'autre sens '2-1'.

ne changent pas d'une manière significative par rapport au cas non absorbant (b, lignes solides). Par contre, si l'onde passe dans la direction opposée, la transmittivité diminue brusquement dans l'angle  $\theta = 30^\circ$ , mais elle ne rest pas zéro pour toutes les directions de la lumière incidente (b, lignes pointillées).

La figure 8.6 montre la transmittivité pour les ondes inhomogènes comme une fonction de l'angle incidente  $\theta$  (a, b) et de l'angle  $\alpha$  entre les vecteurs directionnels  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{f}$  (c, d). On peut voir que la transmittivité d'une onde hétérogène pour un ensemble de paramètres particuliers peut varier avec l'orientation mutuelle des vecteurs directionnels. Cette influence n'est pas très important lorsque la direction du rayonnement est proche de l'incidence normale, mais elle ne peut pas être ignorée si le rayonnement est oblique à l'interface. En effet, la transmittivité varie avec  $\alpha$  - pour à peu près 3 fois dans la magnitude pour un large  $\theta$  (Figure 8.6c, ligne bleu), cette dépendance sur  $\alpha$  est observée quand la position du plan  $\mathbf{f-s}$  est variée (Figure 8.6d).



**Figure 8.6.** La transmissivité angulaire  $T$  comme fonction de l'angle d'incidence  $\theta$  (a, b) pour l'interface entre un milieu avec  $n_1 = 4, k_1 = 1$  et un milieu  $n_2 = 1, k_2 = 0.4$ . Les données sont pour  $\beta = 0^\circ$  et l'angle  $\alpha = 0^\circ$  (lignes rouges),  $30^\circ$  (lignes noires) et  $60^\circ$  (lignes bleus) (a),  $\alpha = 30^\circ$ ,  $\beta = 0^\circ$  (lignes noires),  $40^\circ$  (lignes rouges),  $90^\circ$  (lignes bleus) (b). La transmissivité  $T$  comme une fonction de l'angle  $\alpha$  entre les vecteurs  $\mathbf{f}$  et  $\mathbf{e}$  (c, d). Les données sont pour  $\beta = 0^\circ, \theta = 0^\circ$  (lignes noires),  $30^\circ$  (lignes rouges) et  $60^\circ$  (lignes bleus) (c);  $\theta = 30^\circ, \beta = 0^\circ$  (lignes rouges),  $30^\circ$  (lignes noires) et  $60^\circ$  (lignes bleus) (d).



**Figure 8.7.** La direction du vecteur de Poynting  $\varphi$  comme une fonction de la direction de l'onde hétérogène incidente  $\theta$  pour PE-mode polarisation propageant dans un milieu  $n = 2, k = 4$ . Les données sont pour  $\alpha = 30^\circ$  et  $\beta = 0^\circ$  (lignes noires),  $30^\circ$  (lignes bleues),  $45^\circ$  (lignes rouges),  $60^\circ$  (lignes vertes), and  $90^\circ$  (ligne rose).

#### 8.6.4 La direction du vecteur de Poynting

Il a été noté que la direction de propagation de l'onde ou, plus précisément, la propagation de la phase d'onde, caractérisée par un vecteur  $\mathbf{e}$ , ne se coïncide pas, en général, avec la direction du vecteur de Poynting  $\mathbf{S}$  donnée par (8.30) quand le milieu est absorbant et l'onde est hétérogène (*cf.* Sec. 8.2). Cela veut dire que la propagation de l'énergie dans une onde électromagnétique ne se suit pas la direction de la propagation de la phase d'onde.

Dans le but d'illustrer la différence entre les deux directions, l'angle  $\varphi$  entre le vecteur de Poynting  $\mathbf{S}$  et la normale  $\mathbf{s}$  à l'interface est calculée (A.35) pour la radiation incidente dans le mode de polarisation PE. La figure 8.7 montre l'angle  $\varphi$  comme une fonction de l'angle d'incidence  $\theta$  pour plusieurs valeurs de l'angle  $\alpha$  entre vecteurs directionnels  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{f}$ . On peut voir que pour certains de ces paramètres la différence peut être signifiante, et pour une onde incidente oblique le vecteur de flux d'énergie correspondant est normal à l'interface (lignes vert et rose).

On note que le vecteur de Poynting calculé correspond uniquement à l'onde incidente et ne prend pas en compte le flux d'énergie qui dû à l'interférence avec l'onde réfléchi. Ce dernier est nécessaire pour un bilan d'énergie correct et pour l'évaluation de la direction du flux radiative, surtout quand le flux d'interférence est dirigé vers l'interface entre les deux milieux.

## 8.7 La Transmission des ondes et l'équilibre thermique

Quand deux milieux sont à l'équilibre thermique ils ont la même température  $\Theta$  et leurs échanges radiatives sont équilibrés. En outre, à partir de la loi de Khirchhoff qui exprime les principe d'une bilan détaillé, la puissance de l'énergie radiative incidente  $I_i(\mathbf{u}_i, \mathbf{W}_i, \omega)$  par unité de fréquence  $\omega$  et l'angle solide centré sur le vecteur  $\mathbf{u}_i$  multipliée par la fraction qui est transmise  $T$  à travers l'unité de surface est égale à la quantité de puissance d'énergie  $E(-\mathbf{u}_i, \mathbf{W}_e, \omega)$  émise par cette surface par unité de la fréquence et l'angle solide centré sur  $-\mathbf{u}_i$ . Ici  $\mathbf{W}$  décrit tous les paramètres qui caractérisent l'état du flux radiative, e.g polarisation etc (Reif , 1965).

### 8.7.1 L'équation du transfert radiatif à l'équilibre

L'équation de transfert radiative est dérivée *i.e.* dans Mihalas et Mihalas (1984). Soient  $I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)$  [ $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\text{sec}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{sr}^{-1}$ ] est l'intensité radiative spécifique à une position  $\mathbf{x}$  et à un temps  $t$ , propageant dans la direction  $\mathbf{u}$  avec une fréquence  $\omega$ . La quantité d'énergie transportée par rayonnement aux fréquences  $(\omega, \omega + d\omega)$  à travers un élément de surface  $dS$ , en un temps  $dt$ , dans un angle solide  $d\Omega$  autour de la direction  $\mathbf{u}$ , est

$$dE_t = I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)dS \cos \varphi d\Omega d\omega dt \quad (8.117)$$

où  $\varphi$  est l'angle entre  $\mathbf{u}$  et la normale de la surface  $dS$ . L'intensité radiative peut être aussi une fonction de l'état de polarisation du flux d'énergie et les paramètres d'hétérogénéité. Dans ce cas toutes ces caractéristiques additionnelles du champ de la radiation peuvent être combiner en un vecteur  $\mathbf{W}$ , et on peut définir l'intensité spécifique relative à  $\mathbf{W}$  aussi et rajoute le multiplicateur correspondant aux  $d\mathbf{W}$  au coté droit de l'équation (8.117). Toutefois, la notation standard de l'intensité de radiation est utilisée sans faire une référence à  $\mathbf{W}$  s'il n'y a pas de confusion.

Quand un flux traverse un élément d'un matériau d'un longueur  $dl$  et section  $dS$  dont la normale est orientée dans la direction de propagation  $\mathbf{u}$  dans un angle solide  $d\Omega$  dans une bande de fréquence  $d\omega$  la perte d'énergie radiative est caractérisée par un coefficient d'extinction ou de l'opacité du milieu  $\chi(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)$  [ $\text{m}^{-1}$ ]

$$dE_a = \chi(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)dldSd\Omega d\omega dt \quad (8.118)$$

En général, le coefficient d'extinction est subdivisé en deux parties, une absorption réelle  $\kappa(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)$  [ $\text{m}^{-1}$ ] et un coefficient de diffusion  $\sigma(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)$  [ $\text{m}^{-1}$ ] :

$$\chi(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) = \kappa(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) + \sigma(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) \quad (8.119)$$

Le processus de diffusion est n'est pas considéré ici, donc  $\chi = \kappa$

Le coefficient d'émission (émissivité)  $\eta(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)$  [ $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}\text{sec}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{sr}^{-1}$ ] d'un matériau est défini comme une quantité d'énergie radiative libérée dans un élément de matériau

$dI dS$ , dans un angle solide  $d\Omega$  autour d'une direction  $\mathbf{u}$ , à l'intervalle de fréquence  $d\omega$  à un temps  $dt$  :

$$dE_e = \eta(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) dI dS d\Omega d\omega dt \quad (8.120)$$

De la même manière, le coefficient d'émission peut être subdivisé en une partie thermique et une partie de diffusion. Ici la partie de diffusion n'est pas considérée et  $\eta$  correspond uniquement à l'émission thermique.

Dans l'équilibre thermodynamique ( $TE$ ) la quantité d'énergie absorbée par un matériau dans chaque fourchette ( $d\omega, d\Omega$ ) doit être exactement la même que la quantité d'énergie émise dans cette fourchette (la relation de Kirchhoff-Planck). Dans le cas de l'équilibre thermodynamique local (LTE) qui peut exister sous certaines conditions, on peut écrire :

$$[\eta(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)]_{TE} = [\kappa(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)]_{TE} \quad (8.121)$$

À l'équilibre thermodynamique, le champ de radiation est décrit par une fonction de distribution isotrope  $[I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)]_{TE} = B_\omega(\Theta(\mathbf{x}, t))$  qui dépend seulement de la température absolue  $\Theta$

$$B_\omega(\Theta) = \frac{2h\omega^3/c^2}{e^{h\omega/k\Theta} - 1} \quad (8.122)$$

avec  $h = 6.626176 \cdot 10^{34}$  J·sec la constante de Planck,  $k = 1.380662 \cdot 10^{23}$  J·K<sup>-1</sup> est la constante de Boltzmann. Quand un milieu est caractérisé par un indice de réfraction  $n$ , l'émissivité est écrite comme (la loi généralisée de Clausius, *cf.* Apresyan and Kravtsov, 1996)

$$[\eta(\mathbf{x}, t, \omega)]_{TE} = [\kappa n^2]_{TE} B_\omega(\Theta) \quad (8.123)$$

Une intégration sur toutes les fréquences de la fonction de Planck (8.122) à l'équilibre thermique pour une radiation thermique est (la loi de Stefan)

$$B = \frac{\sigma_R \Theta^4}{\pi}, \quad \sigma_R = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} \quad (8.124)$$

où  $\sigma_R = 5.67032 \cdot 10^{-8}$  Wm<sup>-2</sup>K<sup>-4</sup> est la constante de Stefan-Boltzmann.

l'équation classique de transfert radiative peut être écrite sous cette forme :

$$\left\{ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \right\} I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) = \eta(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) - \kappa(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega)I(\mathbf{x}, t; \mathbf{u}, \omega) \quad (8.125)$$

où de nombreuses phénomènes comme polarisation, dispersion, cohérence, interférence, les effets des quantum ne sont pas présentés correctement (*cf.* Pomraning, 1973).

Les échelles de temps de la variation du champ de rayonnement sont suffisamment petits par rapport à ceux du champ de température ou d'autres sources d'énergie de rayonnement pour les applications possibles en considération, et on peut décrire le champ de rayonnement comme quasi statique ou quasi stationnaire. Dans ce cas, la distribution

spatiale de l'intensité  $I$  correspond à la structure instantanée de la température et peuvent être trouver à partir de l'équation stationnaire

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla) I = \eta - \kappa I \tag{8.126}$$

La solution formelle de l'équation (8.126) peut être écrite sous la forme

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \int_0^{s_0} \eta(\mathbf{x} - \mathbf{u}s', \mathbf{u}) \exp \left[ - \int_0^{s'} \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{u}s'', \mathbf{u}) ds'' \right] ds' + I_S(\mathbf{x}_S, \mathbf{u}) \exp \left[ - \int_0^{s_0} \kappa(\mathbf{x} - \mathbf{u}s'', \mathbf{u}) ds'' \right] \tag{8.127}$$

où  $\mathbf{x}_S = \mathbf{x} - \mathbf{u}s_0$  est le vecteur de position sur la surface de frontière  $S$  qui fixe l'intensité du rayonnement  $I_S(\mathbf{x}_S, \mathbf{u})$  pénétrant dans le matériau.

Si le coefficient d'absorption  $\kappa$  ne varie pas dans l'espace, la solution (8.127) peut être écrite sous la forme

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \int_0^{s_0} \eta(\mathbf{x} - \mathbf{u}s', \mathbf{u}) e^{-\kappa s'} ds' + I_S(\mathbf{x}_S, \mathbf{u}) e^{-\kappa s_0} \tag{8.128}$$

Dans le cas d'un milieu infini  $s_0 \rightarrow \infty$  et le second terme dans l'équation (8.128) va disparaître. Si l'émissivité est isotropique et ne varie pas dans l'espace, l'intensité radiative peut être exprimée sous cette forme

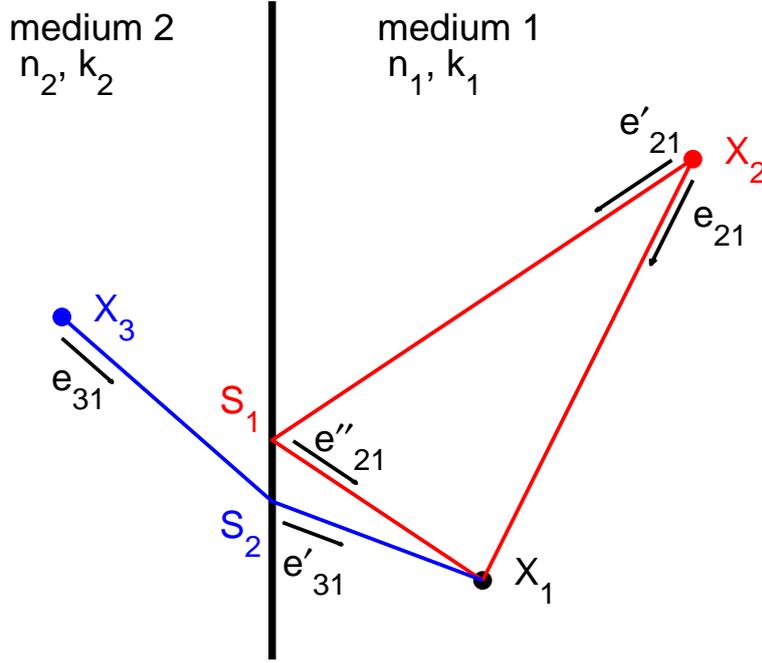
$$I(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \frac{\eta}{\kappa} \tag{8.129}$$

qui donne une solution triviale de l'équation (8.125).

Quand un milieu se compose de deux semi espace infinie 1 et 2, l'intensité en un point  $X_1$  à l'intérieur du milieu 1 (*cf.* Fig. 8.8) peut être écrite sous cette forme suivante

$$I(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{cases} \frac{\eta_1}{\kappa_1}, & \mathbf{u} \text{ est orientée de l'infinie,} \\ \frac{\eta_1}{\kappa_1} (1 - e^{-\kappa_1 s_0}) + I_S(\mathbf{x}_S, \mathbf{u}) e^{-\kappa_1 s_0}, & \mathbf{u} \text{ est orientée de la surface } S. \end{cases} \tag{8.130}$$

L'intensité  $I_S(\mathbf{x}_S, \mathbf{u})$  a deux parties, la première est la radiation  $I_{Sr}$  émise dans le milieu 1 réfléchié par la surface  $S$  et arrivée dans le point  $X_1$ , et la deuxième partie est la radiation  $I_{St}$  émise dans le milieu 2 et transmittée à travers la surface  $S$ . L'intensité  $I_{Sr}$  est donnée dans la première ligne du (8.130), multipliée par la réflectivité  $R_{12}$ . La radiation transmise peut être évaluée de la même manière et elle égale à  $\eta_2/\kappa_2$  multipliée par la transmittivité correspondante  $T_{21}$ . Toutefois, dans ce cas l'intensité radiative change à l'interface par effet de la géométrie comme il a été décrite dans l'équation de définition de  $I$  Eq. (8.117), notamment à cause du changement de la section transversale du rayon en raison de sa flexion (Fig. 8.9a), et le changement de l'angle solide correspondante (Fig. 8.9b). Le premier peut être compter en multipliant l'intensité du



**Figure 8.8.** Chemins des rayons incidents au point  $X_1$  du point  $X_2$  dans le même milieu, et du point  $X_3$  de l'autre milieu.

rayonnement incidente par le facteur  $\sin \varphi_2 / \sin \varphi_1$  et le dernier peut être compter par un facteur  $(\cos \varphi_2 / \cos \varphi_1)(d\varphi_2/d\varphi_1)$ . On doit rappeler, que d'autres caractéristiques du flux de rayonnement changent à l'interface  $S$ , et ce changement doit être pris en considération par le Jacobien  $DW_2/DW_1$ . Finalement, l'intensité  $I_S$  est

$$I_S(\mathbf{x}_S, \mathbf{u}) = \frac{\eta_1}{\kappa_1} R_{12} + \frac{\eta_2 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2}{\kappa_2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_1} \left( \frac{d\varphi_2}{d\varphi_1} \right) \left( \frac{DW_2}{DW_1} \right) T_{21} \quad (8.131)$$

où  $R_{12}$ ,  $\varphi_2$  et  $T_{21}$  dépendent des propriétés optiques du matériau et des caractéristiques de la radiation - orientation relative à la surface  $S$ , l'état de polarisation et l'inhomogénéité de l'onde électromagnétique.

En multipliant  $I$  dans (8.130) par  $\kappa_1$  et intégrant sur toutes les  $\mathbf{u}$  on peut obtenir la puissance spécifique de la radiation absorbante dans le point  $X_1$

$$4\pi\eta_1 + \int_{2\pi} d\Omega \left[ \frac{\eta_2 \kappa_1 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2}{\kappa_2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_1} \left( \frac{d\varphi_2}{d\varphi_1} \right) \left( \frac{DW_2}{DW_1} \right) T_{21} - \eta_1(1 - R_{12}) \right] e^{-\kappa_1 d / \cos \varphi_1} \quad (8.132)$$

où  $d$  est la distance qui sépare le point  $X_1$  et l'interface  $S$  et  $\varphi_1$  est l'angle entre  $\mathbf{u}$  et le vecteur normal  $\mathbf{s}$  (cf. Fig. 8.10).

À l'équilibre thermodynamique cette puissance doit être égale à la quantité d'énergie  $4\pi\eta_1$  émise par un élément de volume dans toutes les directions durant une unité de temps,

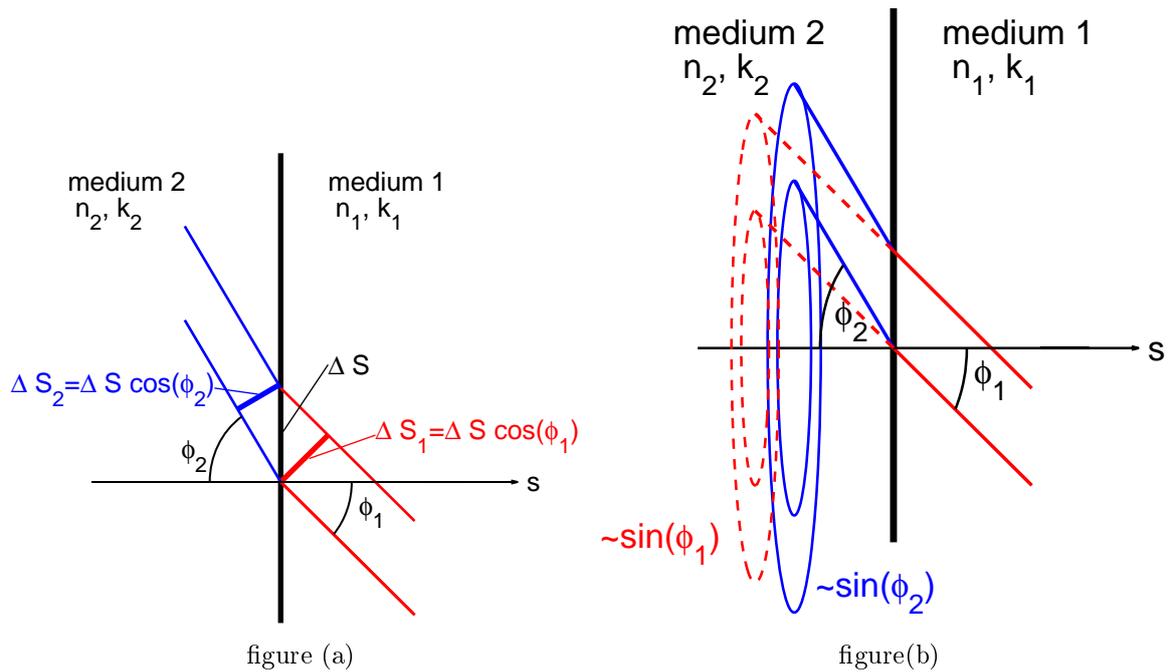


Figure 8.9. Le changement de l'intensité de la radiation dû au changement de l'orientation.

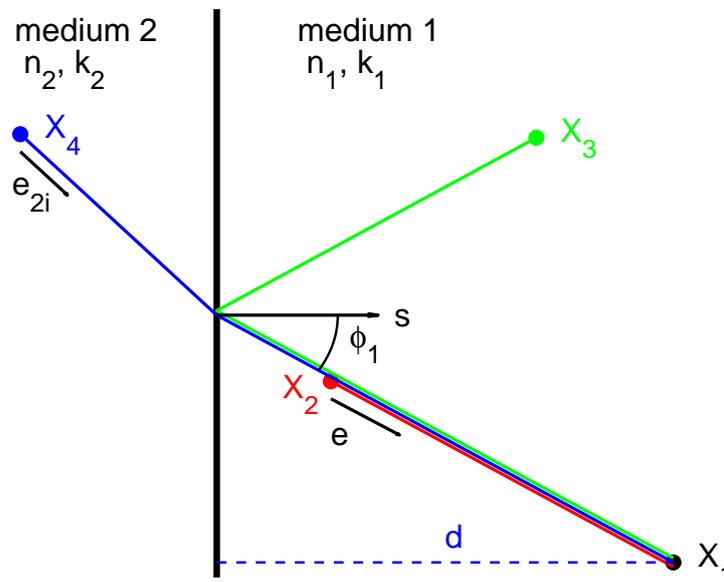


Figure 8.10. La contribution de plusieurs sources dans la radiation incidente dans le point  $X_1$ . Les notations pour l'équation (8.132).

ce qui signifie que à l'équilibre l'intégrale dans (8.132) est nulle

$$2\pi \int_0^{\pi/2} d\varphi_1 \sin \varphi_1 \left[ \frac{\eta_2 \kappa_1 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2}{\kappa_2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_1} \left( \frac{d\varphi_2}{d\varphi_1} \right) \left( \frac{DW_2}{DW_1} \right) T_{21} - \eta_1 (1 - R_{12}) \right] e^{-\kappa_1 d / \cos \varphi_1} = 0 \quad (8.133)$$

Parce que cette relation est valable pour toute distance  $d$ , l'expression dans les parenthèses est égale à zéro pour toutes les angles  $\varphi_1$

$$\frac{\eta_2 \kappa_1 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2}{\kappa_2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_1} \left( \frac{d\varphi_2}{d\varphi_1} \right) \left( \frac{D\mathbf{W}_2}{D\mathbf{W}_1} \right) T_{21} - \eta_1 (1 - R_{12}) = 0 \quad (8.134)$$

Rappelant que à l'équilibre les émissions  $\eta_1$  et  $\eta_2$  peuvent être calculées à partir de (8.123) on peut écrire

$$n_2^2 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2 \left( \frac{d\varphi_2}{d\varphi_1} \right) \left( \frac{D\mathbf{W}_2}{D\mathbf{W}_1} \right) T_{21} = n_1^2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_1 (1 - R_{12}) \quad (8.135)$$

Le problème est de vérifier la compatibilité de la loi de Snell-Descartes et les lois de Fresnel avec l'équation (8.135). Du point de vue général, les équations de Maxwell sont déterministes et réversibles (on peut ignorer la diminution de l'énergie dû à la perte de chaleur par effet de Joule, Eq. (8.6), car le passage d'une onde est un processus au plan d'interface alors que les pertes de chaleurs sont une phénomène volumique ). Cela veut dire que c'est possible qu'elles ne changent pas le volume infinitésimal de l'espace de phase. Toutefois, ce raisonnement semble n'est pas très satisfaisant et plus de démonstration détaillée est nécessaire.

### 8.7.2 Milieu non absorbant

L'équation (8.135) est écrite pour le cas où les deux milieux sont absorbants. Le cas d'un milieu non absorbant peut être considéré comme un cas limite quand  $k_i \rightarrow 0$ . Cependant, dans ce cas une justification peut être obtenue facilement.

D'abord, l'analyse peut être limitée aux ondes électromagnétiques homogènes. Si les modes de polarisation sont considérés séparément, on peut omettre  $\mathbf{W}$  dans (8.135).

Dans le cas ou les milieux sont non absorbants les transmittivités de passage "milieu 1  $\rightarrow$  milieu 2" sont (voir Eqs. A.4a) :

$$T_{PE12} = \frac{4n_1 n_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{(n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2)^2}, \quad T_{PM12} = \frac{4n_1 n_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{(n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2)^2} \quad (8.136)$$

où  $\theta = \varphi$  est utilisée, ce qui est valide pour les ondes homogènes. A cause de la symétrie des indices entre 1 and 2,  $T_{12} = T_{21}$ . Rappelant que  $T = 1 - R$  pour un milieu non absorbant (il n y a pas une interférence entre la radiation incidente et la radiation réfléchie), les deux  $T$  et  $1 - R$  disparaîtront du deux cotés de l'équation (8.135) et il peut être réécrite comme :

$$n_2^2 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2 d\varphi_2 = n_1^2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_1 d\varphi_1 \quad (8.137)$$

ou

$$n_2 \sin \varphi_2 d(n_2 \sin \varphi_2) = n_1 \sin \varphi_1 d(n_1 \sin \varphi_1) \quad (8.138)$$

En raison de (A.4a) les deux cotés de l'équation sont égaux, et les lois de Snell-Dcartes et Fresnel sont compatibles avec (8.135).

### 8.7.3 Milieu absorbant

Dans le cas d'un milieu absorbant une justification des conditions de la compatibilité (8.135) n'a pas été trouvée à cause de la lourdeur des calculs et ce n'est que l'idée principale de cette justification est donnée ici.

**Polarisation et paramétrisation.** On peut considérer pour le moment les deux modes PE et PM indépendamment et exclure la polarisation du paramètre de vecteur  $\mathbf{W}$ . L'inhomogénéité de l'onde électromagnétique peut être décrite par plusieurs paires de paramètres *i.e.*  $(\sin \alpha, \beta)$ , où  $\beta$  est l'angle polaire qui caractérise la position du vecteur unitaire  $\mathbf{f}$  relative à  $\mathbf{e}$ . Ce choix a un avantage que le volume infinitésimale de l'espace de paramètre va être simplement  $d(\cos \alpha)d\beta$ , où  $\alpha$  varie de 0 au  $\frac{\pi}{2}$  (en accord avec Eq.8.18  $\cos(\alpha) \geq 0$ ) et  $\beta$  varie du 0 au  $2\pi$ .

Un autre choix est  $(\psi, \gamma)$ . Dans ce cas le volume infinitésimal de l'espace de paramètre est aussi  $d(\cos \psi)d\gamma$  ( $\cos(\psi) \geq 0$ ), mais la demi-sphère correspondant à une description géométrique plus complexe que dans le cas précédent. L'avantage est que  $\gamma$  ne se change pas quand l'onde traverse une interface. Cependant, parce que l'angle  $\varphi$  dépend de  $\theta, \psi$  et  $\gamma$  au lieu d'utiliser le produit

$$\left( \frac{d\varphi_2}{d\varphi_1} \right) \left( \frac{D\mathbf{W}_2}{D\mathbf{W}_1} \right) \tag{8.139}$$

on doit utiliser un Jacobian complet

$$\frac{D(\varphi_2, \cos \alpha_2, \beta_2)}{D(\varphi_1, \cos \alpha_1, \beta_1)}, \quad \text{or} \quad \frac{D(\varphi_2, \psi_2, \gamma_2)}{D(\varphi_1, \psi_1, \gamma_1)} \tag{8.140}$$

**Indice de réfraction.** Le carré de l'indice de réfraction  $n_{1,2}$  dans l'Eq. (8.135) est dû à la généralisation de la loi de Clausius (8.123) et il prend en compte la réduction de la vitesse de la lumière. Dans le cas d'une onde non homogène sa vitesse est  $c_0/N$  (*cf.* Eq. 8.17), alors  $n_{1,2}$  in (8.135) doit être remplacé par  $N_{1,2}$ .

**La Transmittivité et la réflectivité.** Selon les relations (8.116) la fraction de l'énergie transmise  $T_{21}$  doit tenir en compte la partie de l'énergie d'interférence au sein du milieu 2, quand le vecteur du Poynting correspondant au ce flux d'énergie est orienté vers le milieu 1.

En tenant en compte ces remarques, on peut réécrire l'équation du bilan (8.135) dans la forme suivante :

$$N_2^2 \hat{T}_{21} d(\cos^2 \varphi_2) d(\cos \alpha_2) d\beta_2 = N_1^2 \hat{T}_{12} d(\cos^2 \varphi_1) d(\cos \alpha_1) d\beta_1 \tag{8.141}$$

où les variables indépendants du coté droit et ceux du coté gauche sont liées par les lois généralisées de Snell-Descartes.

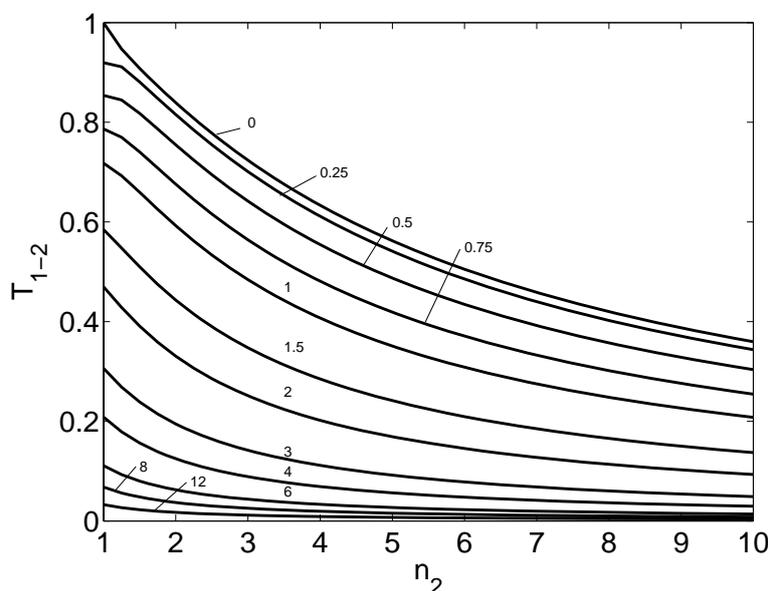
### 8.7.4 La transmittivité hémisphérique

Par dérivation l'équation du bilan (8.141) devrait être satisfaite pour chaque angle incidente  $\varphi$ . Cela veut dire que l'équilibre est rempli aussi quand les deux parties sont intégrés sur toutes les angles possibles. Cela peut être formulé comme une égalité *des transmittivité hémisphériques* du deux milieu, où la transmittivité hémisphérique (ou bien l'émissivité hémisphérique) est le moyen de la transmittivité sur tous les  $\varphi \geq 0$ . Cependant, dans ce cas pour calculer ces caractéristiques il est nécessaire d'introduire la distribution du vecteur  $\mathbf{f}$  autour du  $\mathbf{e}$ , laquelle n'est pas connue dans le cas général des ondes inhomogènes.

Si une onde arrive d'un milieu non absorbant, on peut ignorer les ondes inhomogènes et calculer la transmittivité hémisphérique  $\mathcal{T}_{12}$  en supposant une distribution isotropique du rayonnement incident utilisant les expressions de la réflectivité correspondantes  $R_{PE}$  et  $R_{PM}$  donnée par les équations (A.2)-(A.3)

$$\mathcal{T}_{12} = 1 - \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} (R_{PE} + R_{PM}) d(\cos^2 \theta_1) \tag{8.142}$$

La figure 8.11 montre la variation de  $\mathcal{T}_{12}$  comme une fonction de l'indice de réfraction  $n_2$  du deuxième milieu pour des valeurs fixées du rapport  $k_2/n_2$ . On peut voir que cette figure ne diffère pas de celle donnée dans Hering (1947) reproduite dans Siegel et Howell (1992).



**Figure 8.11.** La transmissivité hémisphérique  $\mathcal{T}_{12}$  comme une fonction de l'indice de réfraction  $n_2$  pour  $n_1 = 1, k_1 = 0$  et des valeurs fixées pour le rapport  $k_2/n_2$  (montrés par des nombres).

## 8.8 Conclusions finales concernant le modèle numérique

Cette analyse a été faite dans l'objectif de mettre au point un modèle numérique capable de simuler la propagation du rayonnement dans un milieu absorbant. En raison de certaines difficultés conceptuelles qui n'ont pas été résolues ce modèle n'a pas été traduit en un code numérique, et seulement les idées principales sont présentées dans cette section.

- (i) Dans le cas d'un milieu absorbant il est judicieux de simuler les deux types des ondes planes harmoniques - des ondes homogènes et des ondes non homogènes (HIPW). Si elles sont représentées par un nombre de quantum énergétiques, cela veut dire que chaque particule d'énergie (quantum) devrait être caractérisé non seulement pas par son orientation du vecteur propagation  $\mathbf{e}$  mais aussi par le vecteur  $\mathbf{f}$  normal du plan dit des équiamplitudes. Cet vecteur en général n'est pas le même comme le vecteur  $\mathbf{e}$ , mais leur produit  $\mathbf{e} \cdot \mathbf{f}$  doit être positive. Le produit de ces deux vecteurs détermine la probabilité d'absorption pendant la propagation de l'onde à l'intérieur du milieu absorbant.

Parce que pendant la propagation d'une onde homogène à travers une interface entre deux milieux il se peut que cette onde devienne inhomogène, et parce que l'équation du bilan (8.141) devrait être satisfaite pour chaque type d'onde l'équilibre thermique ne peut pas être maintenu sans prendre HIPW en considération. Cependant, la question si les ondes inhomogènes sont créées pendant l'émission radiative est ouverte, aucune évidence expérimentale où une considération théorique n'ont été trouvés dans la littérature concernant ce sujet. Il n'y a pas des réponses pour d'autre importante question : Comment est-il distribué le vecteur  $\mathbf{f}$  autour  $\mathbf{e}$  dans la sphère unitaire, ou, avec une autre manière, quelles sont les quantités d'énergie que porte chaque onde électromagnétique pendant leurs émissions. Sans la résolution de ces problèmes c'est impossible de mettre dans un travail le modèle numérique du HIPW.

- (ii) Peut-être, l'état de polarisation est aussi devrait être assignée à un quantum d'énergie, parce que les lois de Fresnel ne sont pas les mêmes pour les différentes polarisations. La procédure de moyenne sur l'ensemble des états possibles de polarisation habituellement sont appliquée dans le calcul de la transmittivité totale, semble être plus complexe dans le cas des ondes non homogène en raison de l'interférence entre les différentes composantes de l'état de l'onde de polarisation. Actuellement, il ne peut pas être démontré que la contribution de ces états de polarisation peut être représenté dans une certaine forme d'une moyenne de la transmittivité.

Il faut noter que l'orientation du vecteur de Poynting dépend de l'état de polarisation, à l'opposé du cas des ondes homogène. Ce fait implique que la polarisation de quanta d'énergie devrait être incluse dans la liste des paramètres du modèle numérique.

- (iii) Habituellement une simulation numérique du transfert radiatif par la propagation des quanta d'énergie ne tient pas en compte la différence entre les orientations du vecteur  $\mathbf{e}$  qui décrit la propagation de la phase d'onde et le vecteur de Poynting. Dans le cas

des ondes homogènes cette considération est correcte parce que leurs orientations sont les mêmes. Néanmoins, ce ne tient pas dans le cas du HIPW. Alors, il est raisonnable d'utiliser le vecteur de Poynting pour l'orientation de la propagation du quantum. Dans ce cas, les deux angles directionnels de la partie réelle et celle imaginaires du vecteur onde seront des paramètres du modèle décrivant l'état du quantum, alors que la direction du vecteur de Poynting peut être calculée en utilisant de ces angles et les caractéristiques de la polarisation.

Les situations des ondes transmises "retournées", qui sont prédites par (8.114), quand le direction du vecteur  $\mathbf{e}$  est opposée du vecteur normal  $\mathbf{s}$ , et qui se présentent comme pathologiques, ne peuvent plus causé des troubles quand la direction de propagation est déterminée par le vecteur de Poynting, parce que dans chaque situation de la transmission le flux d'énergie est toujours dirigé vers le milieu où l'onde a été transmise.

- (iv) Les interférences entre ondes incident et réfléchi prend une fraction de l'énergie, et cette partie de l'énergie ne peut pas être attribuée formellement pour le quantum réfléchi. Toutefois, il semble raisonnable d'inclure cette énergie à l'énergie de l'onde réfléchie quand l'intensité de l'interférence est positive parce que les deux sont dissipées dans le milieu où provienne la radiation. Quand l'intensité d'interférence est négative, il peut être interprété comme un partie d'onde incidente et devrait être utilisé pour la normalisation de la transmittivité et la réflectivité.

Toutes les difficultés examinées ne permettent pas d'introduire ces points dans le modèle numérique de transfert radiatif fondée sur des quanta d'énergie et de simuler la propagation de rayonnement au sein d'un milieu absorbant. Une poursuite de développement est nécessaire pour résoudre les problèmes considérés ici, que ce soit par la suite des progrès théoriques ou par analyse des données expérimentales.

## Conclusion

---

Nous avons décrit dans cette deuxième partie du mémoire un outil numérique qui permet de simuler les transferts radiatifs dans un milieu poreux, qu'ils soient ou non le seul mode de transport de chaleur intervenant.

Sans être optimale du point de vue des besoins en ressources numériques et particulièrement des temps de calculs pour une situation donnée, la formulation, basée sur un algorithme de Monte Carlo, est très souple. Elle permet donc de traiter des situations très diverses, sans limitations de complexité géométrique, en trois dimensions et en régime instationnaire, et en couplage avec la simulation de tous autres processus susceptibles de se dérouler simultanément dans le système.

L'outil a été validé dans quelques situations simples, et on a notamment quantifié le niveau de bruit en fonction des paramètres numériques, ce qui a une grande importance pratique pour la conduite des simulations.

Une étude approfondie a été conduite concernant la généralisation des lois de Snell-Descartes et de Fresnel pour les interfaces entre des milieux semi-transparentes. Elle fait apparaître des difficultés de formulation, et des questions non résolues sur la façon de les intégrer dans l'outil de simulation. Toutefois, il a également été constaté que les corrections introduites par cette généralisation sont de très faible amplitude dans les situations pratiques, et qu'elles ne prendraient de l'importance que dans des cas où la prise en compte du caractère semi-transparent devient inutile, au regard de la discrétisation spatiale utilisée.

L'outil est donc opératoire pour les applications qui vont suivre dans la troisième partie du mémoire.

PART 3

---

APPLICATIONS

Cette troisième partie du mémoire est consacrée à des applications dans des situations directement liées au contexte décrit dans la Chapitre 2, qui concernent la simulation numérique de processus de smoldering. Rappelons que l'objectif est de déterminer en premier lieu s'il est nécessaire de prendre en compte les transferts thermiques radiatifs, et si c'est le cas de proposer un modèle qui permettrait d'y parvenir dans une description macroscopique. Il va de soi que le couplage direct des outils que nous avons développés avec ceux de Debenest (2003) et Elayeb (2008) permet de le faire à l'échelle microscopique.

Nous allons donc examiner une situation élémentaire, inspirée de de la situation qui est illustrée dans la figure 2.5. On considère un grain parmi d'autres dans un empilement, et on suppose qu'il le siège d'une source de chaleur, parce qu'il est en cours de combustion. Les autres grains sont considérés comme inertes. En outre, on va s'intéresser uniquement au régime permanent, quand cette source est maintenue constante indéfiniment. Dans la réalité, il y a toujours un ensemble de grains simultanément en combustion, disposés en une couche relativement mince, et qui se déplace lentement au cours du processus. La source de chaleur dans un grain donné n'existe donc que pendant un intervalle de temps limité. C'est en ce sens que le cas que nous considérons est "élémentaire", puisque la situation réelle ferait intervenir la superposition d'un ensemble de sources, variables dans le temps, et l'intégration temporelle de leurs effets.

Nous prenons en compte l'environnement du grain source en incluant dans le domaine de simulation un volume cubique de dimensions respectable. Enfin, comme il est impossible de définir un jeu de conditions aux limites qui pourrait prétendre à un véritable réalisme, puisqu'une grande variété de situations peuvent survenir, nous choisissons plutôt de rendre compte de "l'ambiance" thermique dans laquelle le processus se déroule en plaçant l'échantillon dans un four isotherme, dont on fixe la température à différentes valeurs, représentatives de ce qu'on observe en pratique à une certaine distance du front de réaction.

Dans le premier chapitre, on précise le cadre des calculs qui vont suivre. On définit en particulier la situation de référence qu'on va examiner et les paramètres utilisés. On introduit également quelques éléments du modèle de simulation qui n'ont pas été mentionnés jusqu'ici. Finalement, on présente deux solutions théoriques dans des cas modèles très simples, qui serviront de guides pour la discussion des résultats numériques.

Les deux chapitres suivants sont consacrés aux résultats des simulations dans l'empilement de grains. Le premier se place sur un plan purement phénoménologique, tandis que le second présente une analyse quantitative des résultats.

Afin de généraliser les observations faites dans le premier type de milieu poreux, on examine ensuite un autre type de microstructure, non plus granulaire mais reconstruite en prescrivant une porosité et une fonction de corrélation spatiale. On peut ainsi explorer une plus grande variété de situations, dans une autre classe de milieux poreux.

Finalement, un chapitre de discussion et conclusion regroupe, commente et synthétise les résultats acquis.

# Chapitre 9

---

## Cadre de l'étude

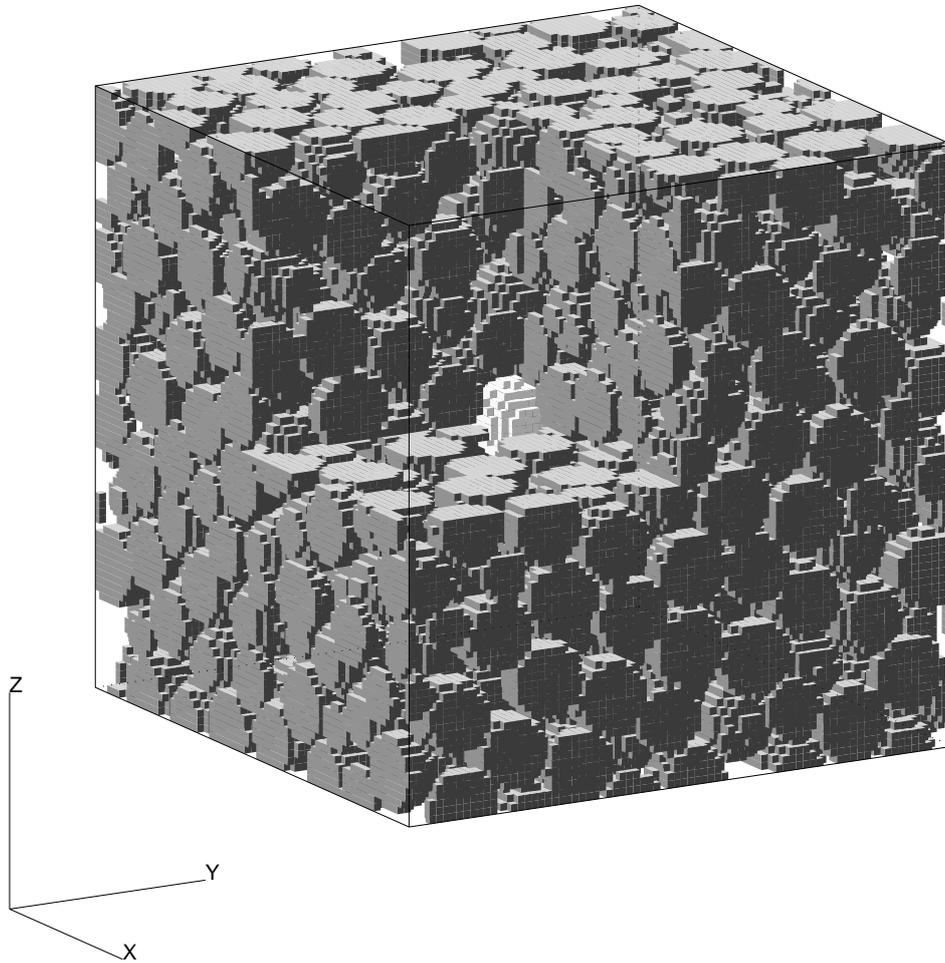
### 9.1 Situation de référence

Nous examinons ici une situation élémentaire, inspirée de celle qui est illustrée dans la figure 2.5. On considère un grain parmi d'autres dans un empilement, et on suppose qu'il le siège d'une source intense de chaleur, parce qu'il est en cours de combustion. Les autres grains sont considérés comme inertes, ou du moins ne donnent pas lieu à des réactions chimiques à l'instant considéré. En outre, on va s'intéresser uniquement au régime permanent, quand cette source est maintenue constante indéfiniment. Dans la réalité, il y a toujours un ensemble de grains simultanément en combustion, disposés en une couche relativement mince, et qui se déplace lentement au cours du processus. La source de chaleur dans un grain donné n'existe donc que pendant un intervalle de temps limité. C'est en ce sens que le cas que nous considérons est "élémentaire", puisque la situation réelle ferait intervenir la superposition d'un ensemble de sources, variables dans le temps, et l'intégration temporelle de leurs effets.

Pour fixer les idées avant d'aller plus loin, présentons immédiatement la situation de référence qui est retenue. Elle est illustrée dans la figure 9.1. On considère qu'un unique grain central est source de chaleur, parce qu'il est actuellement soumis à une réaction d'oxydation de son contenu carboné, dans la partie de sa surface exposée au fluide. Ceci cherche à représenter de façon épurée le type de points chauds qui existe dans le réacteur, dans les grains qui se trouvent à un moment donné dans la zone du front d'oxydation. C'est bien entendu autour d'eux que les effets radiatifs risquent le plus d'avoir une grande importance.

On inclut dans le domaine de simulation un volume d'empilement cubique  $(16R)^3$ , où  $R$  est le rayon des grains. Cet empilement de sphère monodisperse, obtenu par déposition séquentielle à l'aide de l'algorithme de Coelho et al. (1997), est exactement du type de ceux utilisés par Debenest (2003). Sa porosité vaut  $\epsilon = 0.4138$ .

Notons que par la suite (Chapitre 12) le même type de simulation est reproduit pour une variétés de milieux poreux de porosités et de textures différentes, afin de pouvoir généraliser les observations et les relier quantitativement à ces paramètres morphologiques.



**Figure 9.1.** Situation de référence. Un grain particulier (en blanc) au centre d'un empilement est porteur d'une source de chaleur sur sa périphérie, due à la combustion, de puissance totale  $S$ . L'ensemble est placé dans un four isotherme à température  $T_\infty$  (non représenté).

Mais comme rien ne différera significativement dans l'approche ou dans la mise oeuvre technique, nous choisissons de les décrire en détail en prenant comme support le cas de référence.

L'ensemble est placé dans un four isotherme, dont les parois noires et opaques sont à température  $T_\infty$ . Ceci est une façon simple de représenter l'environnement thermique dans lequel se déroule le processus, par le biais d'une température ambiante, dont la valeur va être fixée à des différentes valeurs représentatives de ce qui peut exister à quelque distance du front de réaction. Les conditions réelles sont bien entendu bien plus complexes, et différent notamment entre les côtés aval et amont dans le réacteur (Debenest et al. , 2005a,b). Toutefois, elles sont justement trop complexes et peuvent prendre trop de

formes différentes pour pouvoir prétendre les représenter de façon générale et réaliste. Le choix retenu constitue donc une alternative simple à manipuler, qui facilite l'analyse des résultats.

La situation considérée autorise certaines simplifications. Compte tenu des remarques faites dans la Section 5.4, de la résolution spatiale utilisée ( $a = 200\mu\text{m}$ ) et du fort pouvoir absorbant du matériau solide, il est possible de le considérer comme opaque. En effet, les mesures de Rousseau (2007) sur des lames d'épaisseur millimétrique de schistes bitumineux du type de ceux considérés par Debenest (2003) n'ont permis de déceler aucune transmission dans tout le spectre infrarouge. Ceci permet d'utiliser la version simplifiée du code de simulation où les échanges radiatifs ne font intervenir que les émissions/absorptions surfaciques, avec l'avantage que son exécution plus rapide autorise une exploration plus étendue des paramètres.

En l'absence d'information précise sur les propriétés optiques et sur la géométrie de la surface des grains concassés, on considère que leur émissivité vaut 1 (corps noir). Ils absorbent donc tout le rayonnement qui leur parvient, et réémettent de façon isotrope (loi de Lambert en  $\cos\theta$ ). Ce comportement très diffusif lisse les effets de la représentation de la surface des particules par un assemblage de facettes orthogonales, qui seraient préoccupants si on devait prendre en compte des réflexions spéculaires. Le gaz est considéré comme transparent.

Les autres paramètres physiques sont fixés selon la Table 2.1, à l'exception de la conductivité thermique du gaz qui n'est pas prise en compte. Notons que son écoulement n'est pas non plus considéré dans le modèle. Les seuls modes de transport de la chaleur dans ces simulations sont donc le rayonnement et la conduction dans la phase solide.

Les paramètres géométriques sont les suivants. Sauf mention contraire, le rayon des grains vaut  $R = 1\text{mm}$ , et le four a une taille (intérieure)  $L^3 = (16R)^3 = (16\text{mm})^3$ . La résolution spatiale est fixée à  $a = R/5 = 200\mu\text{m}$ . L'échantillon total est donc décrit par un tableau  $[IND]$  de taille  $Nc^3$  avec  $Nc = L/a = 80$ .

Le grain source est situé très proche du centre de l'échantillon, centré en (39.70, 39.07, 40.21) en unités de maillage. Après discrétisation, il contient 524 éléments de volume  $a^3$  (en parfait accord avec  $(4\pi/3)5^3 = 523.60\dots$ ), dont 298 sans contact avec l'espace interstitiel, et 226 exposés au gaz. Sa surface est composée de 468 facettes  $a^2$  (très proche de la valeur  $(3/2)4\pi5^2 = 471.2\dots$  attendue dans la discrétisation cubique), dont 423 sont exposées au gaz. Les 45 facettes restantes sont noyées dans les contacts avec 7 grains avoisinants (d'aires 2, 3, 5, 6, 8, 9 et 12  $a^2$ ).

La conductivité thermique effective de l'empilement, calculée en appliquant un gradient moyen dans les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$  à l'aide du code de calcul aux volumes finis de Thovert et al. (1990), vaut  $\bar{\lambda} = (0.1711, 0.1784, 0.1948) \lambda_s$ , où  $\lambda_s = 0.979\text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$  est la conductivité du solide. La valeur en  $z$  est légèrement différente et un peu moins fiable,

car des conditions de périodicité en  $x$  et  $y$  peuvent être appliquées lors de la déposition des grains puis du calcul de  $\bar{\lambda}$  dans ces directions, mais pas dans la direction  $z$ . Rappelons que la porosité de l'empilement est  $\epsilon = 0.4138$ .

Il reste à définir les deux paramètres opératoires que nous serons amenés à faire varier, c'est à dire la température ambiante  $T_\infty$  et la puissance de la source thermique.

On prend dans le cas de référence  $T_\infty = 700$  K et on considérera également deux autres valeurs,  $T_\infty = 485$  K et 1010 K. Cette plage recouvre ce qu'on peut observer en pratique à une distance de quelques diamètres de grains du front de réaction. Notons que les valeurs extrêmes sont fixées pour que leur rapport à la valeur centrale vaille  $3^{\pm 1/3}$ .

La puissance  $S$  de la source est déduite des données de Debenest (2003), suivant l'argument suivant. Le schiste bitumineux possède un pouvoir calorifique  $c_C \Delta h_c = 3,63$  GJ/m<sup>3</sup> (voir Table 2.1), ce qui représente pour un grain une quantité

$$Q_g = \frac{4\pi}{3} R^3 c_C \Delta h_c \quad (9.1)$$

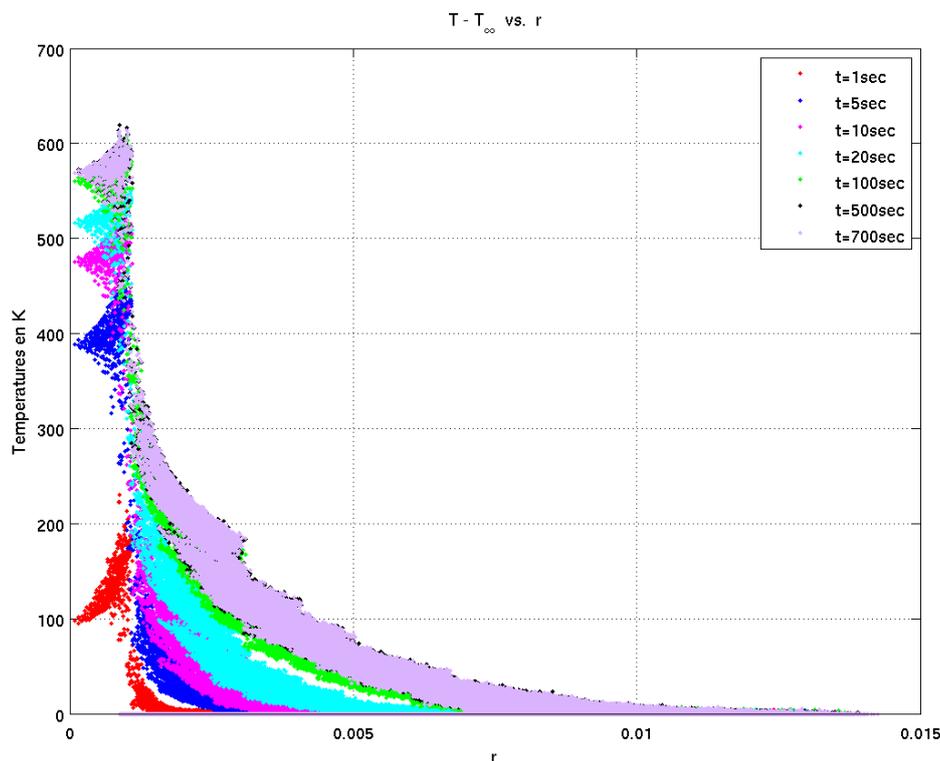
Cette énergie est libérée pendant une période de l'ordre du temps  $2R/U_F$  que met le front de réaction à parcourir une distance correspondant à un diamètre de grain.  $U_F$  est la vitesse de propagation du front, dont l'ordre de grandeur est  $3 \cdot 10^{-4}$  m/s. Ceci correspond donc à une puissance moyenne

$$S = \frac{Q_g U_F}{2R} = \frac{2\pi}{3} R^2 c_C \Delta h_c U_F \quad \approx 2.28 \text{ W} \quad (9.2)$$

En réalité, la production de chaleur ne dure qu'un temps de l'ordre de  $2R/U_F$ , c'est à dire de l'ordre de 10 s, et la puissance libérée est plus faible que (9.2) en début de période, passe ensuite par un pic supérieur à (9.2) pour finalement décroître à nouveau. Nous choisissons pourtant de maintenir cette puissance constante, pour faciliter l'analyse, et pendant aussi longtemps qu'il faut pour atteindre un état stationnaire. D'autres valeurs de  $S$  ont également été considérées, 0.253, 0.527, 9.87 et 20.52 W, qui correspondent à des facteurs  $3^{-2}$ ,  $3^{-4/3}$ ,  $3^{4/3}$  et  $3^2$  de (9.2).

Cette puissance totale est distribuée dans les 226 éléments de volume du grain exposés au gaz, proportionnellement au nombre de faces exposées qu'ils possèdent (potentiellement de 1 à 5). Ceci simule la distribution spatiale attendue du dégagement de chaleur quand le taux de réaction surfacique est uniforme, ce qui se produit quand les apports diffusifs d'oxydant ne sont pas le processus limitant.

Mentionnons pour finir que quelques tests ont été conduits en opérant un changement d'échelle. On divise ou multiplie  $R$  par 3, pour obtenir  $R = 1/3$  mm ou  $R = 3$  mm. La taille du four est modifiée en proportion, de même que la résolution spatiale  $a$ , de sorte que  $R/a = 5$  et  $L/a = 80$  sont conservés.



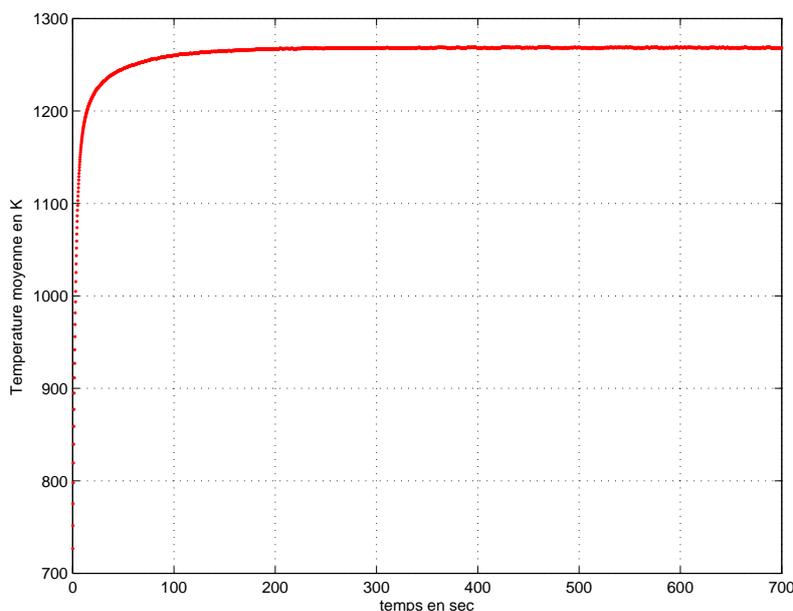
**Figure 9.2.** Températures locales en fonction de la distance au centre du grain source, en quelques instants successifs au cours d’une simulation. Les distances sont en mètres et la température est mesurée par rapport à  $T_\infty = 700\text{K}$ .

## 9.2 Quelques éléments techniques concernant les simulations

### 9.2.1 Déroulement d’une simulation type

Dans une simulation type, le système est initialement à température uniforme  $T = T_\infty$ . A l’instant  $t=0$  où le calcul débute, la température du grain source commence à s’élever, sous l’influence des apports  $S$ . Progressivement, le milieu environnant s’échauffe également, Dans un premier temps, l’apport  $S$  est essentiellement consacré à chauffer ainsi le système, et le flux sortant vers la paroi du four est négligeable car la tache thermique ne l’a pas atteinte. Ceci est illustré dans la figure 9.2, où la température en tous les points du système est portée en fonction de leur distance au centre du grain source, à quelques instants successifs. La température moyenne de la sphère, dénotée  $T_S$ , est donnée en fonction du temps dans la figure 9.3 pour la même simulation.

Après un certain temps, on commence à observer un flux de chaleur sortant du système vers les parois du four. Progressivement, il doit s’établir exactement à la valeur  $S$ , quand la température du milieu poreux est établie et que le régime stationnaire est atteint. L’évolution du flux sortant est montrée dans la figure 9.4. La figure montre également les



**Figure 9.3.** La température moyenne  $T_S$  de la sphère source au cours du temps, pour  $T_\infty = 700K$ .

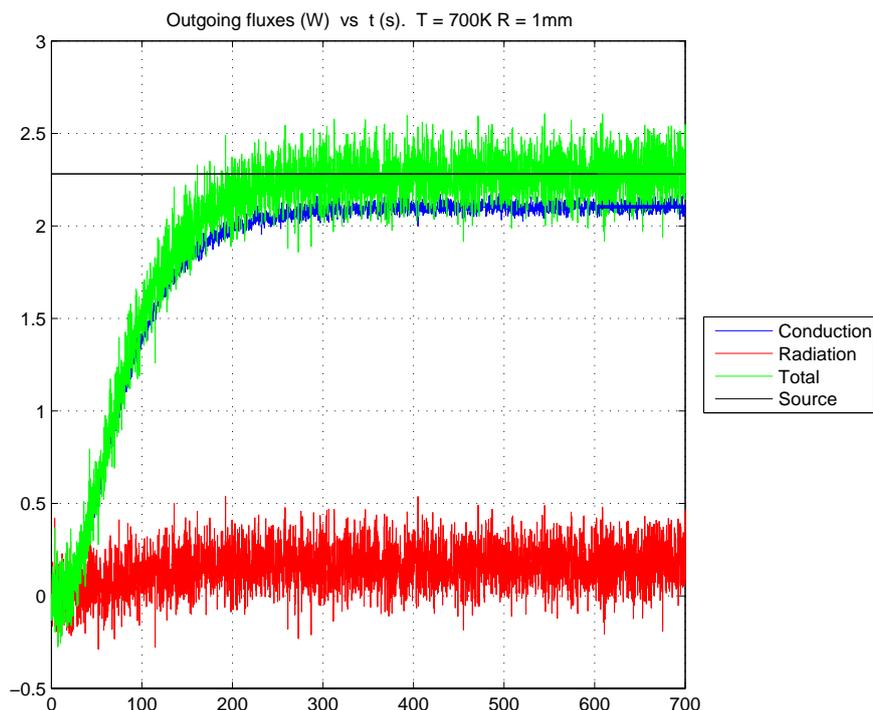
composantes radiatives et conductives des échanges entre le milieu poreux et les parois du four, mais celles-ci ne doivent être considérées que comme une vague indication, car la présence des parois, en modifiant la surface volumique et la morphologie des pores, perturbe leur importance relative. Seul le total, qui doit s'établir à  $S$ , est à prendre en considération.

C'est du reste le critère qui est utilisé pour l'arrêt du calcul. On considère que le régime est atteint quand le flux sortant diffère de  $S$  d'une valeur généralement inférieure à 0.5%.

Il est à noter que la température  $T_S$  de la sphère n'est pas un bon indicateur de convergence, puisque c'est l'élément du système qui répond le plus vite. On voit par exemple dans la figure 9.3 que  $T_S$  est établie à environ 200 s, alors qu'une part de l'énergie injectée est encore consacrée à chauffer des zones plus distante dans l'empilement. Le flux sortant ne s'établit que plus tard, vers 400 s.

Les flux montrés dans la figure 9.4 sont visiblement entachés de bruit. Ceci n'est pas forcément gênant pour l'évaluation de quantités globales dans le régime stationnaire, puisqu'on peut éliminer son influence en prenant une moyenne temporelle sur une période suffisamment longue. Toutefois, cela peut demander une poursuite inutilement coûteuse des calculs au delà de ce qui serait nécessaire à l'établissement physique du régime permanent, et d'un point de vue pratique celà complique la détection de la convergence.

Il est naturel de penser, et c'est clairement visible sur la figure 9.4, que le bruit est



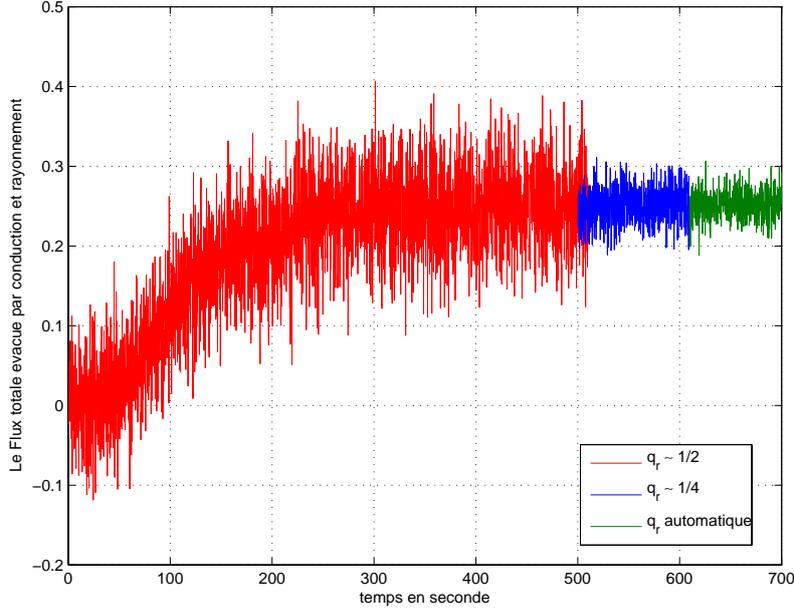
**Figure 9.4.** Flux sortant du système vers les parois du four (W), en fonction du temps (s). On montre le flux total, ses composantes radiatives et conductives, ainsi que la puissance  $S$  de la source.

introduit par la simulation du rayonnement, et non de la conduction. En conséquence, c'est la valeur  $q_r$  du quantum qui le détermine, et donc la valeur de  $\delta T$  dont  $q_r$  est déduite. Ceci est illustré dans la figure 9.5, où après avoir atteint un régime stationnaire, on a poursuivi la simulation en diminuant deux fois de suite la valeur de  $\delta T$ , de 1/2K à 1/4 K, puis à 0.121 K.

Notons que cette simulation ne concerne pas le même cas que les figures précédentes, mais une situation avec  $S = 0.253$  W et  $T_\infty = 485$  K. Du fait de la moindre amplitude des flux radiatifs, puisque le niveau de température est plus bas ( $T_S = 607$  K), le bruit prend une importance relative plus grande. Ceci souligne la nécessité d'adapter le niveau de bruit statistique toléré à l'amplitude du signal, c'est à dire à l'importance des flux radiatifs. Avec l'expérience, et pour le type de simulations décrit ici, nous avons constaté que des résultats satisfaisants étaient obtenus en indexant la valeur de  $\delta T$  à la plage de température dans le système, selon

$$\delta T = 10^{-3} (T_S - T_\infty) \tag{9.3}$$

Cette valeur adaptative est appliquée tout au long du calcul (avec un minimum de 1/16 K dans les premiers temps), et réévaluée à chaque pas de temps. Suivant les situations, la valeur finale de  $\delta T$  peut aller de l'ordre du dixième de K à plusieurs K.



**Figure 9.5.** Niveau de bruit en fonction de la taille du quantum  $q_r$ . On trace le flux total sortant du système vers le four, pour  $S = 0.25$  W et  $T_\infty = 485$  K ( $T_S = 607$  K).  $\delta T$  vaut successivement 1/2 K, 1/4 K et 0.121 K.

### 9.2.2 Prise en compte de la conduction

Le transport conductif dans le solide est pris en compte en appliquant un simple algorithme de différences finies, explicite en temps, avec un pas  $\Delta t$ . Le bilan conductif s'écrit pour un élément  $(i, j, k)$  dans le solide

$$\mathcal{B}(i, j, k) = \sum_{i', j', k'} \lambda_s a^2 \frac{T(i', j', k') - T(i, j, k)}{a} \tag{9.4}$$

où la sommation s'étend à ceux des 6 éléments voisins qui sont également solides. Les températures sont actualisées en appliquant une formule du type de (5.9).

Le pas de temps  $\Delta t$  est fixé en principe à la valeur  $a^2/8D_T$  ( $\approx 17$  ms), où  $D_T$  est le coefficient de diffusivité thermique du solide. Il est éventuellement diminué de façon à limiter les variations de température dans tout élément de volume à 10K. Ceci peut être nécessaire en début de simulation.

### 9.3 Plage de paramètres explorés

Comme nous l'avons dit plus haut, deux paramètres  $S$  et  $T_\infty$  ont été variés de façon systématique. En outre, quelques cas ont été examinés avec des valeurs de  $R$  différentes.

L'ensemble des cas avec  $R = 1\text{mm}$  peut être résumé par les Tables 9.1 à 9.4. Dans beaucoup de cas, des calculs ont été répétés ou poursuivis avec des valeurs différentes de  $q_r$ . Seuls les meilleurs résultats sont mentionnés. La première table donne la valeur de  $T_S$ . La seconde donne un indicateur très global  $C$ , rapport du flux transféré à la différence de température entre la source et le four

$$C = \frac{S}{T_S - T_\infty} \quad [\text{W/K}] \quad (9.5)$$

Il s'agit d'une simple indication de la capacité de l'empilement à transférer de la chaleur, dans le dispositif considéré et sous des conditions données, sans distinguer par quel processus physique. Pour comparaison, dans la même configuration, on obtient  $C = 1.680 \text{ mW/K}$  quand on ignore le rayonnement, et  $C = 12.80 \text{ mW/K}$  quand le grain source est entouré de solide non poreux (ce qui correspond à  $T_S = 2057 \text{ K}$  et  $T_\infty = 878 \text{ K}$ , respectivement, quand  $S = 2.28 \text{ W}$  et  $T_\infty = 700 \text{ K}$ ).

Les tables suivantes ne concernent pas des résultats physiques, mais les critères d'arrêt du calcul. La Table 9.3 donne la valeur du flux sortant normé par la source  $S$ , sur la période de prise de moyenne des résultats, tandis que la Table 9.4 indique cette période et la valeur du temps pour laquelle des résultats instantanés sont éventuellement présentés, notamment dans les chapitres 10 et 12.<sup>1</sup>

Des tables similaires (9.5 à 9.8) fournissent les mêmes indications pour les rayons  $R$  différents de  $1 \text{ mm}$ . Pour faciliter les comparaisons, on a repris ici quelques uns de cas avec  $R = 1\text{mm}$ .

<sup>1</sup> Il ne faut pas interpréter ces temps comme des temps caractéristiques d'établissement du régime stationnaire. Dans beaucoup de cas, les calculs ont été repris et poursuivis au delà de ce stade avec des valeurs de  $\delta T$  différentes pour améliorer le niveau de bruit.

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	607	721	1186		2445
$T_\infty = 700\text{ K}$	795	884	1268	1974	2468
$T_\infty = 1010\text{K}$	1070	1130	1415		

**Table 9.1.** La température moyenne  $T_s$  de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	2.08	2.23	3.22		10.4
$T_\infty = 700\text{ K}$	2.67	2.86	4.02	7.74	11.6
$T_\infty = 1010\text{K}$	4.16	4.37	5.61		

**Table 9.2.** Coefficient  $C$  ([mW/K], voir éq. 9.5) en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	1.002	0.995	0.996		0.99
$T_\infty = 700\text{ K}$	1.002	0.998	1.001	1.009	1.000
$T_\infty = 1010\text{K}$	1.001	1.002	0.995		

**Table 9.3.** Flux sortant normé par  $S$  sur la période de mesure des propriétés stationnaires, en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

$R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$0.53W$	$2.28W$	$9.87W$	$20.52W$
$T_\infty=485\text{ K}$	700/850/850	344/510/510	344/500/511		200/300/310
$T_\infty=700\text{ K}$	672/800/809	750/800/809	602/1500/1606	633/670/670	310/200/450
$T_\infty=1010\text{K}$	1050/1100/1154	360/397/397	750/750/793		

**Table 9.4.** Intervalles de prise de moyennes de propriétés dans l'état stationnaire, et temps pour lesquels des résultats instantanés sont présentés [s].

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_{infty} = 485 \text{ K}$	874	1186	1416
$T_{infty} = 700 \text{ K}$	1041	1268	
$T_{infty} = 1010\text{K}$	1275	1416	

**Table 9.5.** La température moyenne  $T_s$  de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_{infty} = 485 \text{ K}$	0.65	3.26	28.70
$T_{infty} = 700 \text{ K}$	0.74	4.02	
$T_{infty} = 1010 \text{ K}$	0.95	5.61	

**Table 9.6.** Coefficient  $C$  ([mW/K], voir éq. 9.5) en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_{infty} = 485 \text{ K}$	1.001	0.997	1.001
$T_{infty} = 700 \text{ K}$	1.000	1.001	
$T_{infty} = 1010 \text{ K}$	1.001	0.999	

**Table 9.7.** Flux sortant normé par  $S$  sur la période de mesure des propriétés stationnaires, en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_{infty} = 485 \text{ K}$	300/400/446	344/500/511	1800/800/1500
$T_{infty} = 700 \text{ K}$	300/350/350	602/1500/1606	
$T_{infty} = 1010 \text{ K}$	133/140/148	465/700/762	

**Table 9.8.** Intervalles de prise de moyennes de propriétés dans l'état stationnaire, et temps pour lesquels des résultats instantanés sont présentés [s] pour différents rayons  $R$ .

## 9.4 Résultats théoriques dans deux situations simples

Nous présentons ici deux solutions théoriques dans des situations très simples, qui serviront de guide pour la discussion des résultats numériques. La première est exacte, tandis que la seconde est une solution approchée dans une situation modèle.

### 9.4.1 Milieu continu

Le cas de référence auquel il sera le plus naturel de se comparer est celui d'une sphère entourée d'un milieu continu et homogène, de conductivité  $\lambda$ .

On suppose ici une symétrie sphérique. Une source de puissance  $S$  existe dans la sphère, et une température  $T_\infty$  est imposée à une distance  $r_\infty$ . Dans le régime stationnaire, la simple conservation du flux sortant d'une enveloppe sphérique de rayon  $r$  permet de déterminer le gradient de température

$$\frac{dT}{dr} = -\frac{S}{4\pi\lambda r^2} \quad (9.6)$$

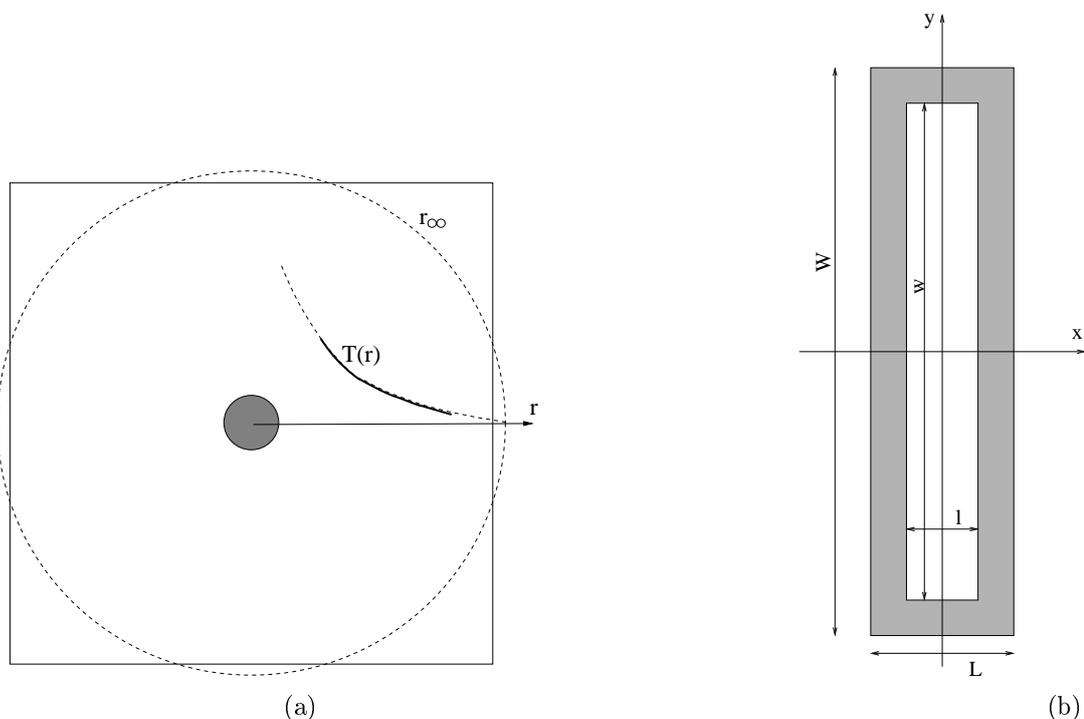
Une intégration à partir de  $r_\infty$  fournit ensuite le profil de température

$$T(r) = T_\infty + \frac{S}{4\pi\lambda} \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{r_\infty} \right) \quad (9.7)$$

On obtient notamment la température en surface de la sphère en substituant son rayon  $R$  à  $r$  dans (9.7).

Nos simulations ne sont pas conduites dans cette situation idéale. D'une part, le milieu dans la cellule n'est pas homogène. Il possède au mieux une conductivité effective  $\lambda_{eff}$  (nous faisons abstraction pour l'instant des transferts radiatifs), inconnue *a priori*. D'autre part, la symétrie sphérique ne s'applique pas au voisinage de la sphère source, puisqu'elle n'est en contact avec le milieu environnant qu'en une faible partie de sa surface, aux endroits où elle touchent d'autres grains. Tout au plus peut-on espérer qu'une symétrie sphérique se rétablit à une certaine distance. Enfin, les conditions aux limites extérieures ne sont pas sphériques non plus, puisque le four est cubique. A nouveau, on peut seulement espérer que quand on ne s'approche pas trop des parois, la forme sphérique des surfaces isothermes n'est pas trop perturbée. La seule chose qui est clairement définie est  $T_\infty$ , qui ne peut pas prendre une autre valeur que la température du four.

Ces hypothèses sont assez fortes, mais leur validité est facilement vérifiable. Il suffit de tracer  $T - T_\infty$  en fonction de l'inverse  $1/r$  de la distance au centre. On observera une dispersion près de la source et près des parois du four, où l'isotropie est rompue. Mais s'il existe une zone intermédiaire où les points fusionnent en une seule ligne, cela signifie que  $T$  n'y dépend que de  $r$ , donc que la symétrie sphérique s'applique dans cette zone. La



**Figure 9.6.** Modele 1 (a). Hors du voisinage de la source et du four, le profil de température peut se comporter comme (9.8) avec une position apparente  $r_\infty$  de la condition limite extérieure. Modele 2 (b). Cellule unité d'un milieu périodique alvéolaire.

conservation du flux impose alors que le profil de température est de la forme de (9.7), avec

$$T(r) = T_\infty + \frac{S}{4\pi\lambda_{eff}} \frac{1}{r} - \frac{S}{4\pi\lambda_{eff}r_{\infty,eff}} \quad (9.8)$$

Un simple fit linéaire dans cette zone où on est affranchi des conditions aux limites permet de déterminer d'abord la conductivité effective  $\lambda_{eff}$  du matériau, puis le rayon  $r_{\infty,eff}$ , rayon de la sphère qui *vue depuis cette zone intermédiaire* aurait la même influence que le four cubique. Ceci est illustré dans la figure 9.6a.

Le même raisonnement s'applique en présence de rayonnement, si celui-ci se traduit par un accroissement de conductivité apparente.

On verra que cette approche s'applique en général avec succès, et tout particulièrement quand les transferts radiatifs existent, parce qu'ils contribuent fortement à améliorer et "isotropiser" la connexion thermique entre la sphère source et le milieu environant.

### 9.4.2 Milieu alvéolaire

La seconde solution concerne la conductivité apparente d'un milieu modèle, alvéolaire. Elle n'est qu'approchée, et utilise de telles approximations qu'il semble douteux qu'elle puisse être d'une quelconque utilité. Ce calcul n'a été fait initialement qu'en vue de débroussailler un peu le problème, et avec l'intention de complexifier un peu le modèle géométrique en y ajoutant une porosité connectée, un peu de tortuosité, des transferts radiatifs transversaux, ... Toutefois, le résultat obtenu permet de rationaliser avec un tel succès les données des simulations numériques que nous nous en sommes tenus là à ce stade.

On considère un milieu poreux alvéolaire, périodique, dont la cellule unité est représentée dans la figure 9.6b. Ses dimensions sont  $L \times W$ , et la cavité intérieure mesure  $l \times w$ . Le milieu peut faire penser à un mur en brique creuses, par exemple. La discussion est conduite ici en bidimensionnel, mais s'appliquerait de la même façon si  $w$  et  $W$  représentaient des sections ( $[m^2]$ ) totales et ouvertes au lieu de longueurs. La porosité vaut  $\epsilon = wl/WL$ . Le solide a une conductivité thermique uniforme  $\lambda_s$  et la cavité est vide (transparente).

On applique un gradient de température moyen  $\langle \nabla T \rangle = -G$  selon la direction  $x$ , et on note  $\bar{T}$  la température dans le plan  $x = 0$ , qui est isotherme pour des raisons de symétrie. Pour la même raison, les plans  $x = \pm L/2$  sont également isothermes, à  $T = \bar{T} \pm GL/2$ . Pour permettre des simplifications, on fait les deux hypothèses suivantes

- H1 .  $l \ll w$  et  $L \ll W$ , qui permet de traiter le problème comme unidimensionnel ;
- H2 .  $GL \ll \bar{T}$ , qui permet de linéariser les équations, pour les transferts radiatifs.

Dans un premier temps, on ne considère que la conduction. En première approximation, on peut évaluer le flux conductif  $\phi_c$  comme

$$\phi_c = (W - w) \lambda_s G \quad (9.9)$$

et faire apparaître une conductivité effective  $\lambda_{c,eff}$

$$\phi_c = W \lambda_{c,eff} G, \quad \lambda_{c,eff} = \frac{W - w}{W} \lambda_s = \Phi_c \lambda_s \quad (9.10)$$

où  $\Phi_c = (W - w)/W$  est la fraction volumique des âmes des briques, *i.e.*, la fraction volumique "utile" pour la conduction.

Considérons ensuite les transferts radiatifs. Grâce à l'hypothèse [H1], on considère qu'ils ne font intervenir que les faces opposées selon  $x$  des alvéoles, en  $x = \pm l/2$ , dont les températures (uniformes) sont notées  $T_-$  et  $T_+$ . Le flux  $\phi_r$  doit traverser consécutivement une couche solide (par conduction), l'alvéole, et une seconde couche solide. La conservation du flux impose donc

$$\phi_c = w \lambda_s \frac{(\bar{T} + GL/2) - T_-}{(L - l)/2} = w \sigma (T_-^4 - T_+^4) = w \lambda_s \frac{T_+ - (\bar{T} - GL/2)}{(L - l)/2} \quad (9.11)$$

On obtient une équation du quatrième degré, qu'on peut linéariser en utilisant [H2], et on peut facilement déterminer  $T_-$  et  $T_+$  (qui dans le cadre de [H2] sont symétriques par rapport à  $\bar{T}$ ), et finalement  $\phi_r$ . Tout calcul fait, on obtient

$$\phi_r = w \lambda_s G \frac{L}{L-l} \left( 1 - \frac{1}{1 + 4\sigma \bar{T}^3 (L-l)/\lambda_s} \right) \quad (9.12)$$

On peut en déduire une conductivité effective  $\lambda_{r,eff} = \phi_r/WG$  pour cette contribution au transfert thermique

$$\lambda_{r,eff} = \frac{w}{W} \frac{L}{L-l} \frac{1}{1 + \hat{C}} \lambda_s, \quad \hat{C} = \frac{\lambda_s}{4\sigma \bar{T}^3 (L-l)} \quad (9.13)$$

Une expression équivalente est

$$\frac{L}{\lambda_{r,eff}} = \frac{W}{w} \left[ \frac{L-l}{\lambda_s} + \frac{1}{4\sigma \bar{T}^3} \right] \quad (9.14)$$

Le mérite de cette formule de type "série" est de bien faire apparaître les résistances thermiques des deux régions à franchir (solide par conduction et vide par rayonnement).

Dans ces calculs, les flux conductifs et radiatifs ont été évalués de façon découplée, et font intervenir des zones différentes, qui sont l'épaisseur ( $W - w$ ) des âmes solides et la largeur  $w$  des alvéoles. Dans le cadre de cette approximation, on peut donc additionner les deux flux, et les deux conductivités effectives correspondantes,

$$\lambda_{eff} = \lambda_{c,eff} + \lambda_{r,eff} \quad (9.15)$$

Dans l'analyse des résultats numériques, on effectuera plutôt l'opération inverse.  $\lambda_{eff}$  et  $\lambda_{c,eff}$  seront déterminées par des simulations numériques avec ou sans prise en compte des transferts radiatifs, et on en déduira  $\lambda_{r,eff}$ .

Les résultats qui précèdent font explicitement apparaître les caractéristiques ( $L, W, l, w$ ) du modèle géométrique. Il est préférable de les ré-exprimer en fonction de grandeurs intrinsèque, afin de les rendre éventuellement transposables à d'autres types de microstructure. Pour ce faire, nous introduisons les notations suivantes

$$\tilde{\lambda}_c = \frac{\lambda_{c,eff}}{\lambda_s}, \quad \mathcal{S}_x = \frac{2w}{WL} \quad (9.16)$$

$\tilde{\lambda}_c$  est une définition alternative de la fraction volumique "utile" pour la conduction, équivalente dans le cas présent mais qui ne fait pas référence au type de microstructure et a donc plus de chance que (9.9) d'être pertinente dans d'autres situations.  $\mathcal{S}_x$  est une

surface volumique, qui correspond ici à la partie "utile" pour les transferts radiatifs, selon la direction  $x$ . En ces termes, on peut ré-écrire (9.14) comme

$$\frac{1}{\lambda_{r,eff}} = \frac{1 - \tilde{\lambda}_c - \epsilon}{(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \lambda_s} + \frac{\mathcal{S}_x}{8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \sigma \bar{T}^3} \quad (9.17)$$

Ceci n'est pas encore tout à fait général, du fait de la définition de  $\mathcal{S}_x$ . Il serait préférable de ne faire référence qu'à la surface volumique totale  $\mathcal{S}$  du milieu poreux, qui est une caractéristique intrinsèque, affectée d'un coefficient  $\omega_s$

$$\frac{1}{\lambda_{r,eff}} = \frac{1 - \tilde{\lambda}_c - \epsilon}{(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \lambda_s} + \frac{\omega_s \mathcal{S}}{8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \sigma \bar{T}^3} \quad (9.18)$$

Cette dernière formule fait intervenir

- des quantités géométriques intrinsèques, la porosité  $\epsilon$  et la surface volumique  $\mathcal{S}$  ;
- un coefficient physique  $\lambda_s$  et un paramètre environnemental (*i.e.*, lié à l'ambiance thermique)  $\bar{T}$  ;
- deux coefficients géométriques éventuellement liés à la direction considérées, le coefficient de conductivité  $\tilde{\lambda}_c$  et le facteur  $\omega_s$ .

Ce dernier est un facteur de forme, et on conçoit bien qu'il sera différent selon qu'on impose le gradient de température dans les directions  $x$  ou  $y$  dans le modèle de la figure 9.6b. Les milieux poreux que nous considérons dans la suite sont statistiquement isotropes. Dans ce cas,  $\tilde{\lambda}_c$  et  $\omega_s$  sont indépendants de la direction considérées, et sont donc également des propriétés géométriques intrinsèques de la microstructure.

# Chapitre 10

---

## Transferts radiatifs dans le milieu granulaire : phénoménologie

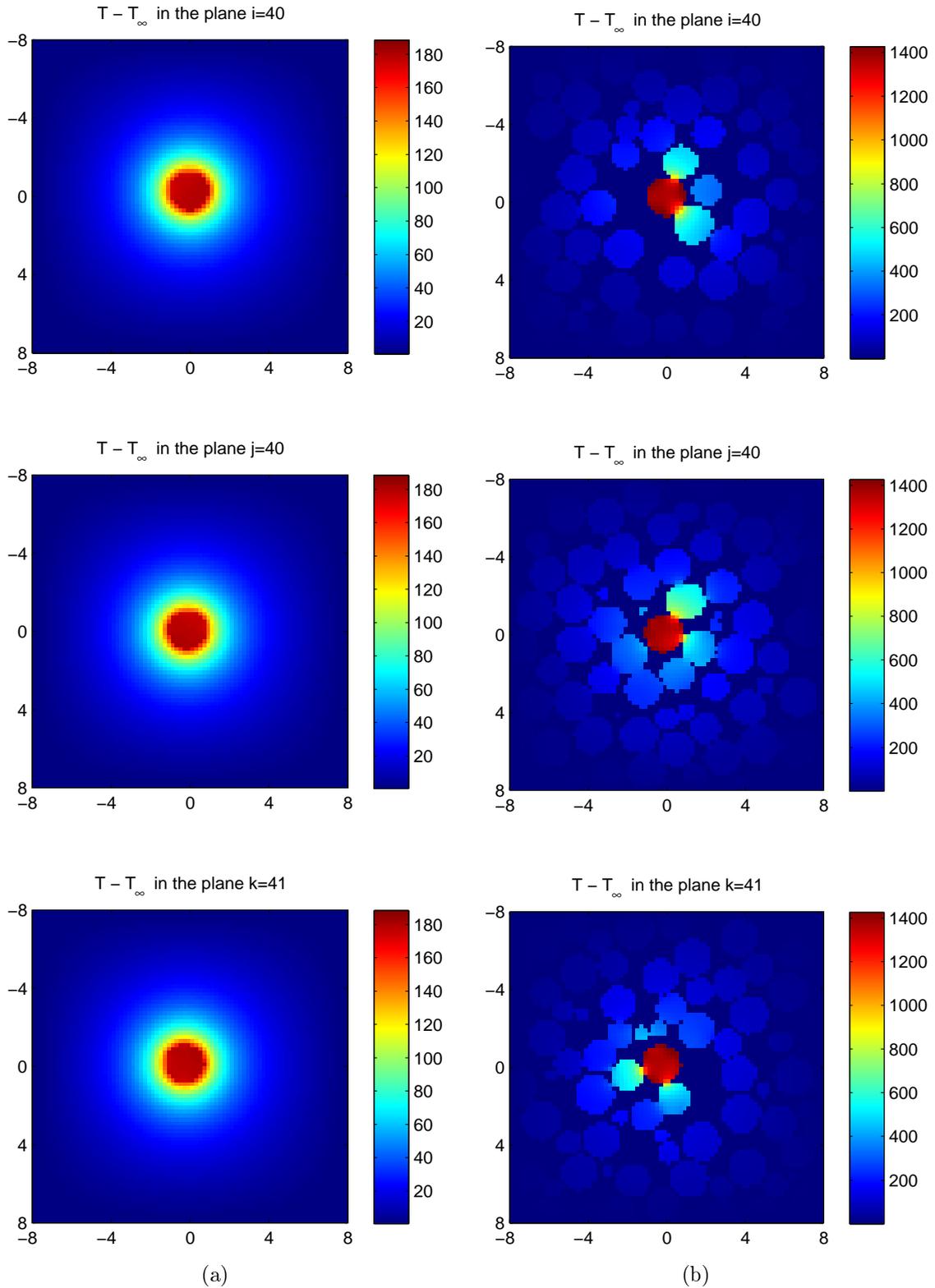
### 10.1 Introduction

On présente dans ce chapitre les résultats concernant l'empilement de grains sous un angle purement phénoménologique, c'est à dire en parcourant une galerie d'image, sans entreprendre une analyse quantitative détaillée qui fera l'objet du chapitre suivant.

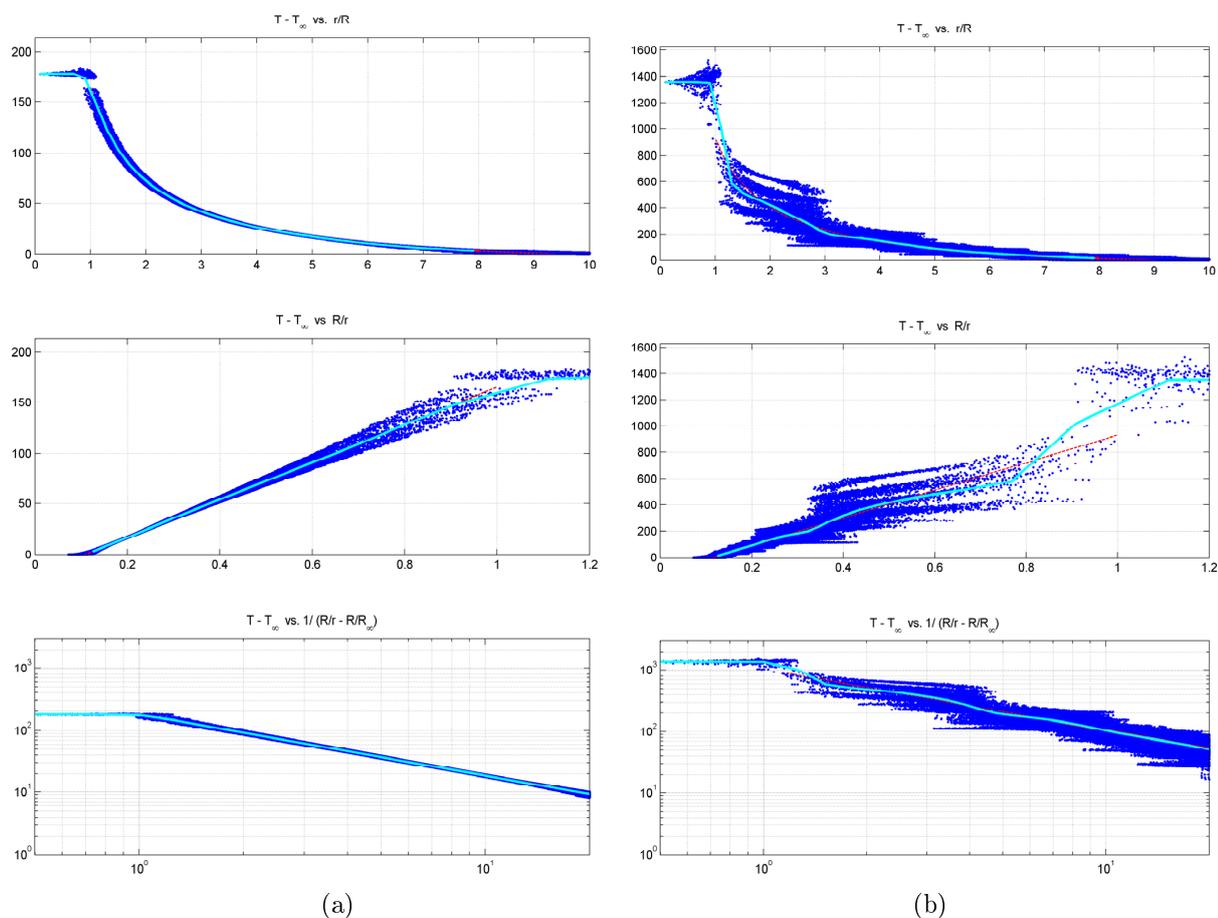
Deux situations de référence doivent être évoquées en premier lieu, où la chaleur produite à la surface du grain en combustion est évacuée uniquement par conduction. Dans la première, la sphère est entourée d'un matériau continu et uniforme (on ne considère ici que le problème thermique, sans se demander comment cette sphère peut se trouver en situation de brûler). Dans la seconde, le grain source est entouré de l'empilement, comme le montre la figure 9.1.

La figure 10.1 montre les champs de température (en régime permanent, comme dans tout ce qui suit) dans trois plans de coupe orthogonaux passant par le centre de la sphère centrale. Les trois vues sont bien entendu identiques dans le cas du milieu homogène. La figure 10.2 présente les profils radiaux de température. Il s'agit ici de données locales. Les températures dans tous les éléments de volume sont portées en fonction de la distance  $r$  au centre, normée par le rayon  $R$  des sphères. Le cadre du haut montre  $T - T_\infty$  en fonction de  $r/R$ . Celui du milieu montre  $T - T_\infty$  en fonction de l'inverse de la distance,  $R/r$ . Enfin celui du bas montre  $T - T_\infty$  en fonction de  $1/(R/r - R/r_\infty)$ , en coordonnées logarithmiques.  $r_\infty$  est le rayon apparent du four, au sens de (9.8), dont la détermination est décrite un peu plus loin.

Note importante : Les conventions utilisées dans les figures 10.1 et 10.2 seront conservées dans toutes les figures du même type dans le reste du mémoire. La température est mesurée par rapport à celle du four (*i.e.*, on trace  $T - T_\infty$ ). Les distances sont mesurées en rayon de grain  $R$ . Les échelles de température vont de 0 à 1.2 ( $T_S - T_\infty$ ) dans la figure 10.1, et de 0 à 1.2 ( $T_S - T_\infty$ ) dans la figure 10.2. Les courbes bleues de la figure 10.2 correspondent à des températures moyennes, obtenues par prise de moyenne dans des coques sphériques



**Figure 10.1.** Champs de température dans trois plans de coupe orthogonaux, pour un grain en combustion entouré de solide uniforme (a) ou de l'empilement de grains (b). Seule la conduction est prise en compte.  $S = 2.28 \text{ W}$ ,  $T_\infty = 700 \text{ K}$ ,  $R = 1 \text{ mm}$ .



**Figure 10.2.** Profils radiaux de température pour un grain en combustion entouré de solide uniforme (a) ou de l'empilement de grains (b). Seule la conduction est prise en compte.  $S = 2.28$  W,  $T_\infty = 700$  K,  $R = 1$  mm. On porte  $T - T_\infty$  en fonction de  $r/R$ , de  $R/r$  et de  $1/(R/r - R/r_\infty)$ .

concentriques avec un pas  $a$ . Les courbes rouges correspondent au fit obtenu comme décrit ci-dessous.

Le calibrage des échelles ne la met pas en évidence, mais il est bon de souligner la différence entre les températures atteintes par la sphère, pour un même flux de chaleur imposé.

Dans le cas du solide homogène, les profils de températures sont du type prédit par (9.8). On observe bien un profil linéaire en fonction de  $R/r$ . La légère dispersion autour du profil moyen provient du fait que la sphère n'est pas centrée exactement sur un point du maillage, mais en (39.70, 39.07, 40.21) en unités de maillage, ce qui fait que sa discrétisation n'est pas tout à fait symétrique (voir par exemple la figure 7.8). Un fit linéaire du type de (9.8) donne exactement la conductivité du solide, et un rayon  $r_\infty = 9.264 R$ . Ceci signifie que l'application de la condition  $T = T_\infty$  aux parois du four

cubique de dimension  $(8R)^3$  est perçue en dehors du voisinage immédiat des parois comme l'application de la même condition sur une sphère de rayon  $9.264 R$ . Le profil ainsi ajusté est tracé en rouge. Il est tellement proche des données numériques que dans le cadre du haut il est masqué par la courbe en bleu, qui représente la température moyenne mesurée dans des coques sphériques concentriques d'épaisseur  $a$ .

Les profils observés dans l'empilement sont bien moins réguliers. La figure 10.1 montre d'abord que les contacts entre la sphère centrale et l'empilement sont peu intimes. Ceci donne donc lieu à des concentrations de flux, puis la chaleur doit suivre des chemins un peu tortueux avant qu'une certaine uniformisation se mette en place. Cela induit une chute assez brutale de la température au voisinage de la sphère source, visible dans la figure 10.2. Ce point est très important, puisqu'il traduit la faillite d'une description homogénéisée au voisinage d'une paroi, tout particulièrement quand comme ici cette paroi est le siège du terme source et qu'elle n'offre que des contacts singuliers avec le milieu poreux.

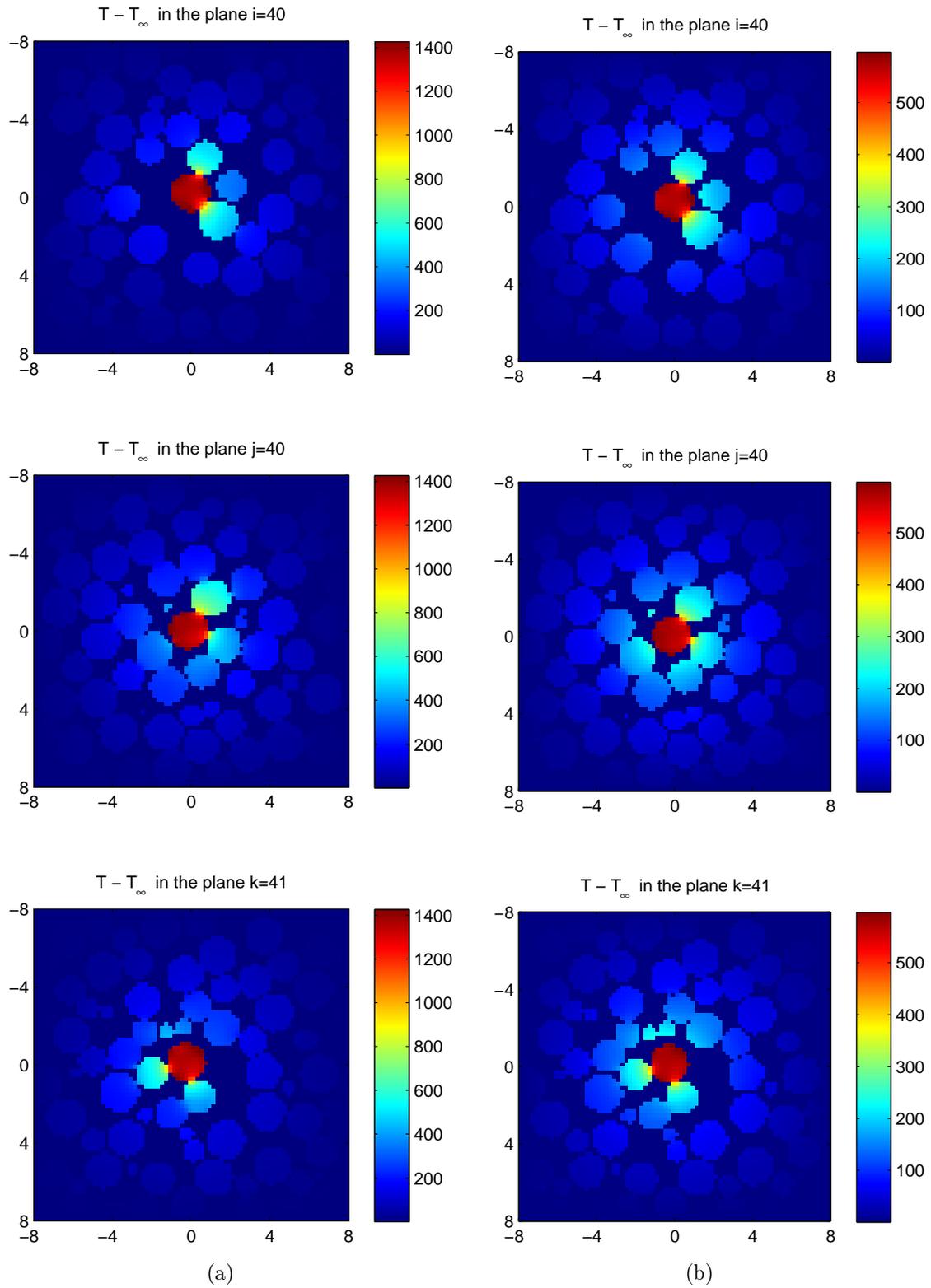
Toutefois, à partir d'une distance de l'ordre de  $r \geq 3R$ , un retour à une symétrie sphérique approximative s'est effectué, surtout visible dans le deuxième cadre de la figure 10.2. Un fit du type de (9.8) est alors possible. En retenant la plage  $[4R, 8R]$ , on obtient  $\lambda_{eff} = 0.1726$  W/m/K, très proche des valeurs  $(0.1711, 0.1784, 0.1948)\lambda_s = (0.168, 0.175, 0.191)$  W/m/K obtenues pour des flux de chaleur induits par des gradients selon les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$  (voir Section 9.1). On obtient aussi une valeur  $r_\infty = 8.87 R$ . Ce rayon apparent ne devrait en principe dépendre que de la forme du four. La différence par rapport à la valeur  $9.264 R$  obtenue pour un milieu homogène traduit donc un autre effet de frontière, contre les parois du four, du même type bien que moins marqué que celui observé près de la sphère centrale.

Venons en maintenant aux transferts conductifs et radiatifs couplés. Les figures 10.3 et 10.4, du même type que les deux précédentes, comparent cette fois deux cas avec l'empilement, sans et avec prise en compte du rayonnement.

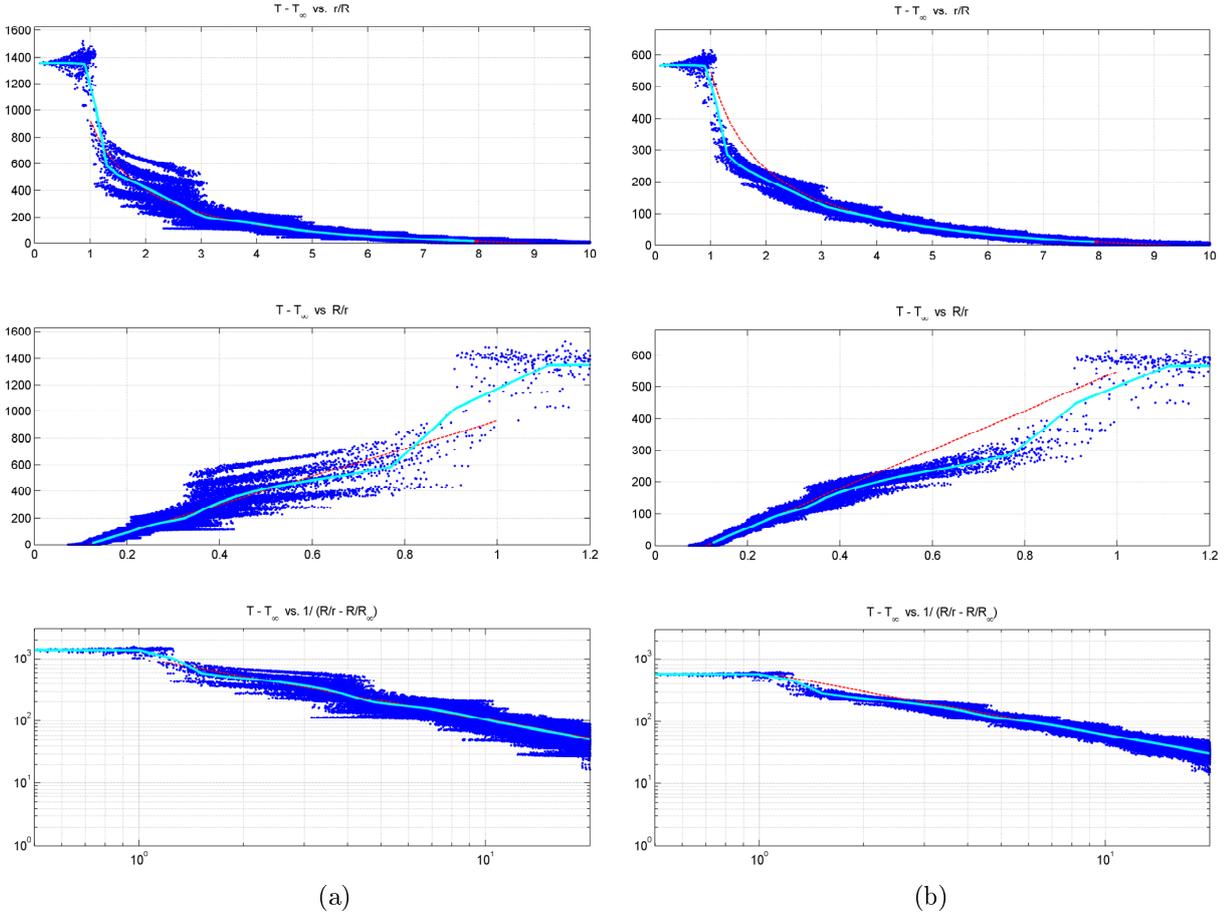
Des différences sont perceptibles entre les deux colonnes de la figure 10.3. Par exemple, dans les cadres du bas, les grains à la droite de la source semblent "illuminés". Une autre différence importante, masquée par la normalisation des échelles, est la grande différence de température de la sphère source :  $T_S = T_\infty + 568$  K avec le rayonnement, et  $T_S = T_\infty + 1357$  K en conduction pure. De façon équivalente, en terme du coefficient  $C$  (voir éq. 9.5),  $C = 4.01$  ou  $1.68$  mW/K, respectivement avec ou sans le rayonnement.

Comme on le verra, ceci ne traduit pas uniquement un accroissement de la conductivité effective du milieu poreux du fait des échanges radiatifs. Cela résulte en grande partie du meilleur "contact" thermique entre la source et le milieu environnant, qui n'est plus limité aux zones de contact physiques que doit emprunter la conduction. En conséquence, la chute de température au voisinage de la source est moins brutale, comme le montre la figure 10.4.

En outre, les échanges par rayonnement, bien que probablement de portée assez limi-



**Figure 10.3.** Champs de température dans trois plans de coupe orthogonaux, pour un grain en combustion entouré de l'empilement de grains, sans (a) ou avec (b) prise en compte des transferts radiatifs.  $S = 2.28 \text{ W}$ ,  $T_\infty = 700 \text{ K}$ ,  $R = 1 \text{ mm}$ .



**Figure 10.4.** Profils radiaux de température pour un grain en combustion entouré de l'empilement de grains, sans (a) ou avec (b) prise en compte des transferts radiatifs.  $S = 2.28$  W,  $T_\infty = 700$  K,  $R = 1$  mm. On porte  $T - T_\infty$  en fonction de  $r/R$ , de  $R/r$  et de  $1/(R/r - R/r_\infty)$ .

tée, permettent une certaine égalisation des températures entre des éléments solides qui se font face mais n'ont pas de contact matériel direct. Cet effet régularisateur est également clairement visible dans la figure 10.4, où les profils de température sont beaucoup moins chahutés en présence du rayonnement. En conséquence, un fit du type de (9.8) est à nouveau possible. Il donne  $\lambda_{eff} = 0.295$  W/m/K et  $r_\infty = 9.17 R$ .

La valeur de  $r_\infty$  proche de celle pour le milieu continu traduit la régularisation introduite par le rayonnement. La conductivité effective est supérieure à celle en conduction pure, d'un facteur 1.70. Ce rapport est bien inférieur au rapport des coefficients  $C$ , qui vaut 2.39. L'augmentation de  $C$  fait donc intervenir les deux effets, une augmentation de la conductivité effective du milieu poreux, et un meilleur contact thermique entre ce milieu et ses frontières.

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	607	721	1186		2445
$T_\infty = 700\text{ K}$	795	884	1268	1974	2468
$T_\infty = 1010\text{K}$	1070	1130	1415		

**Table 10.1.** La température moyenne  $T_s$  de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

## 10.2 Galerie de résultats

Une fois ces éléments physiques clairement établis, nous pouvons poursuivre en observant les résultats obtenus pour l'ensemble des valeurs des paramètres. Rappelons qu'une synthèse des cas considérés est disponible dans les tableaux de la Section 9.3.

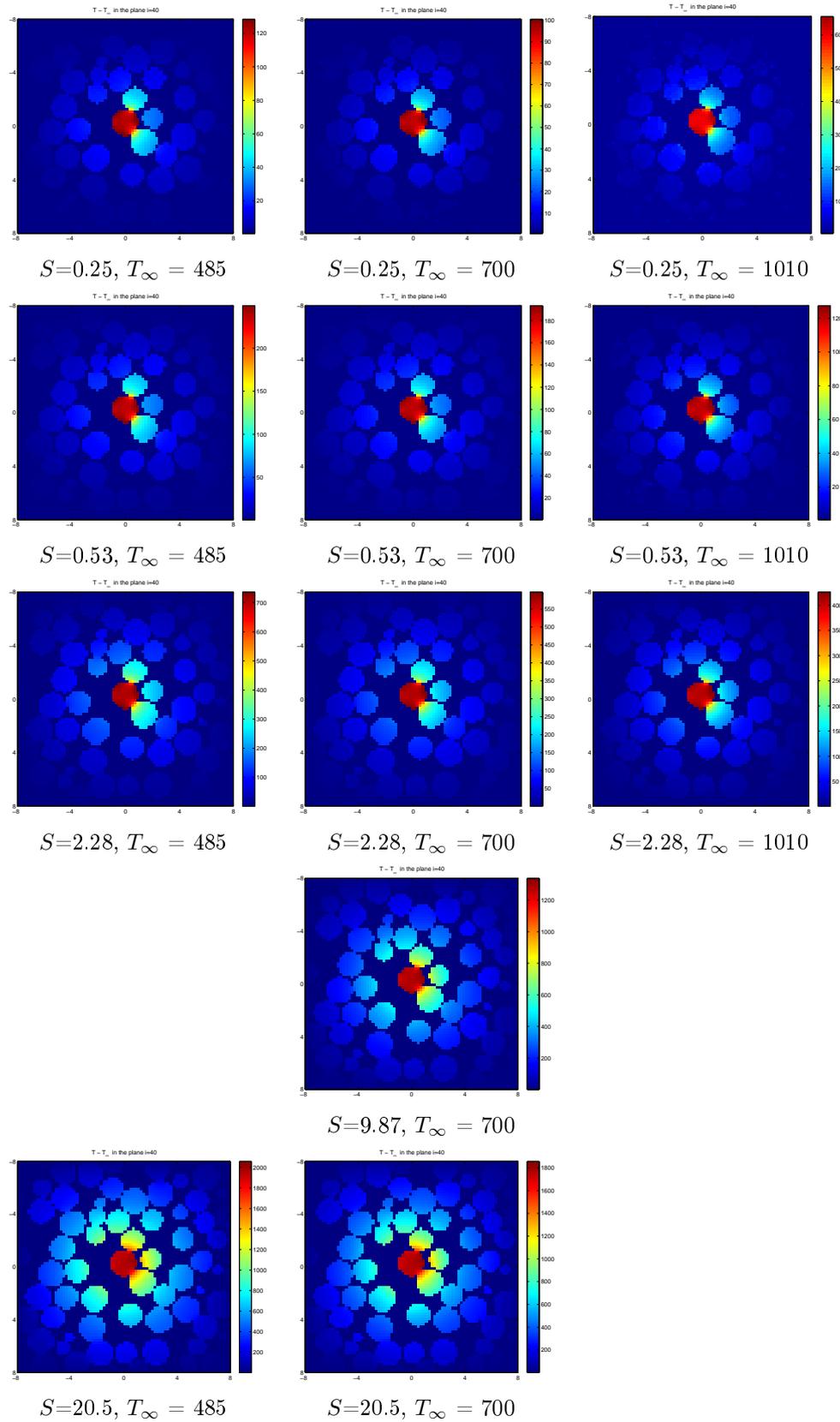
Les figures 10.5 et 10.6 concernent tous les cas où  $R = 1\text{mm}$ . Afin de pouvoir présenter l'ensemble sur une seule page, on ne présente les champs de température que dans un plan de coupe. De même, les profils radiaux ne sont présentés qu'en fonction de  $r/R$ .

Le fait le plus évident dans les cartes de températures (normalisées) de la figure 10.5 est l'élévation relative de température dans les grains autour de la source lorsque sa puissance  $S$  augmente (du haut vers le bas sur la figure). Ceci est bien sûr lié à l'élévation de la température. La température du grain source a été donnée dans la Table 9.1, et elle répétée ici (Table 10.1). Ceci résulte du transfert direct de chaleur depuis la surface du grain central, sans devoir cheminer le long des contacts physiques, et se traduit dans la figure 10.6 par une quasi-disparition du saut de température pour les rayons  $r$  juste supérieurs à  $R$ .

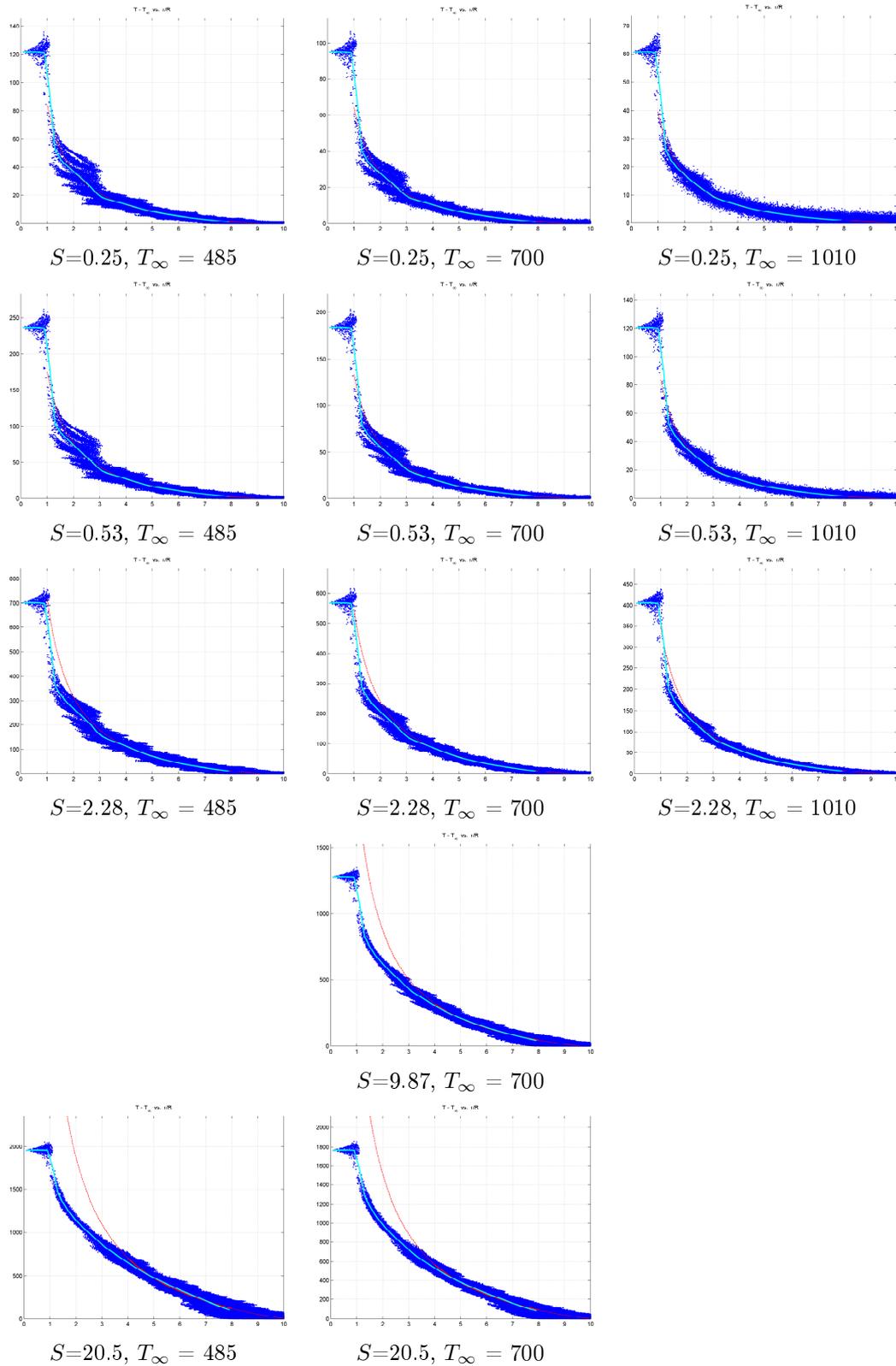
Un autre phénomène moins spectaculaire mais visible même pour les sources peu puissantes, quand  $T_\infty$  augmente, est que les grains deviennent moins isothermes. La carte de température pour  $S = 0.25\text{ W}$  et  $T_\infty = 485\text{ K}$  (en haut à gauche dans la figure 10.5) ressemble beaucoup à celle quand le rayonnement n'intervient pas (figure 10.3a). En revanche, pour  $S = 0.25\text{ W}$  et  $T_\infty = 1010\text{ K}$  (en haut à droite dans la figure 10.5), l'arrière des deux grains en contact avec la source est sensiblement plus froid.

Ceci peut s'expliquer facilement. Pour un rayonnement faible ou absent, l'essentiel de la résistance au transfert de chaleur, essentiellement conductif, est localisé aux restrictions de section que sont leurs zones de contacts. Le volume des grains offre une plus grande section et présente donc des gradients de température relativement faibles. Quand les grains peuvent également échanger de la chaleur par rayonnement, le caractère critique de ces restrictions de section disparaît, et le gradient de température s'uniformise.

Ceci se traduit par la disparition dans les profils radiaux de la figure 10.6 des striures horizontales, qui correspondaient à des températures variant faiblement sur une plage de distance radiale, à l'intérieur d'un même grain.



**Figure 10.5.** Champs de température dans un plan de coupe, pour un grain en combustion entouré de l'empilement de grains, et diverses valeurs de  $S$  et  $T_\infty$ .  $R = 1\text{mm}$ .



**Figure 10.6.** Profils radiaux de température pour un grain en combustion entouré de l'empilement de grains, et diverses valeurs de  $S$  et  $T_\infty$ .  $R = 1\text{mm}$ .

	$R = 1/3$ mm, $S = 0.25$ W	$R = 1$ mm, $S = 2.28$ W	$R = 3$ mm, $S = 20.52$ W
$T_\infty = 485$ K	874	1186	1416
$T_\infty = 700$ K	1041	1268	
$T_\infty = 1010$ K	1275	1416	

**Table 10.2.** La température moyenne  $T_s$  de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

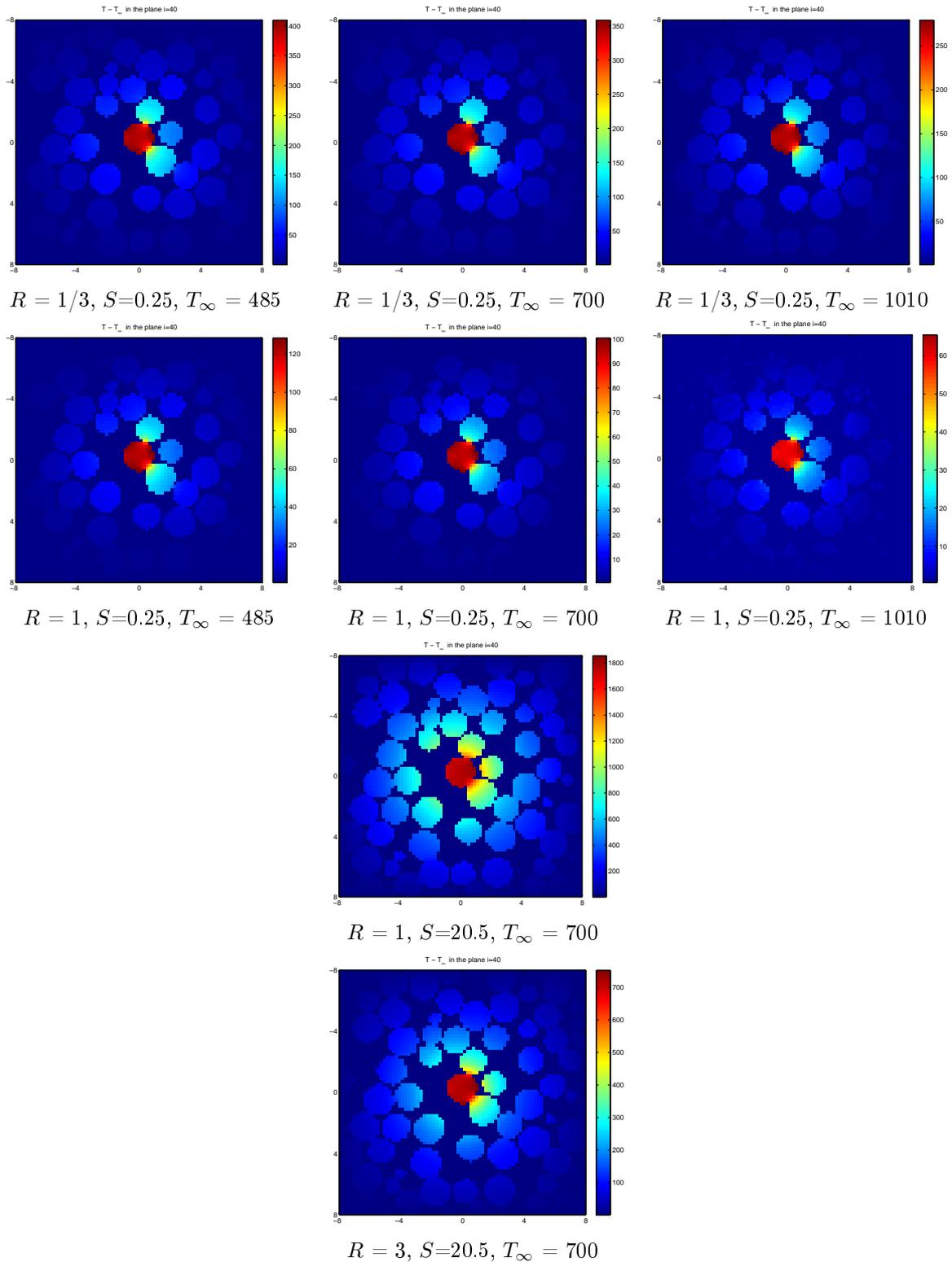
Les cas où des valeurs de  $R$  différentes de 1 mm ont été utilisées sont regroupées dans les figures 10.7 et 10.8, qui reprennent également pour une comparaison plus aisée quelques cas avec  $R = 1$  mm. On rappelle également les températures atteintes dans la sphère source dans la Table 10.2.

Les remarques formulées pour le cas  $R = 1$  mm s'appliquent de la même façon ici.

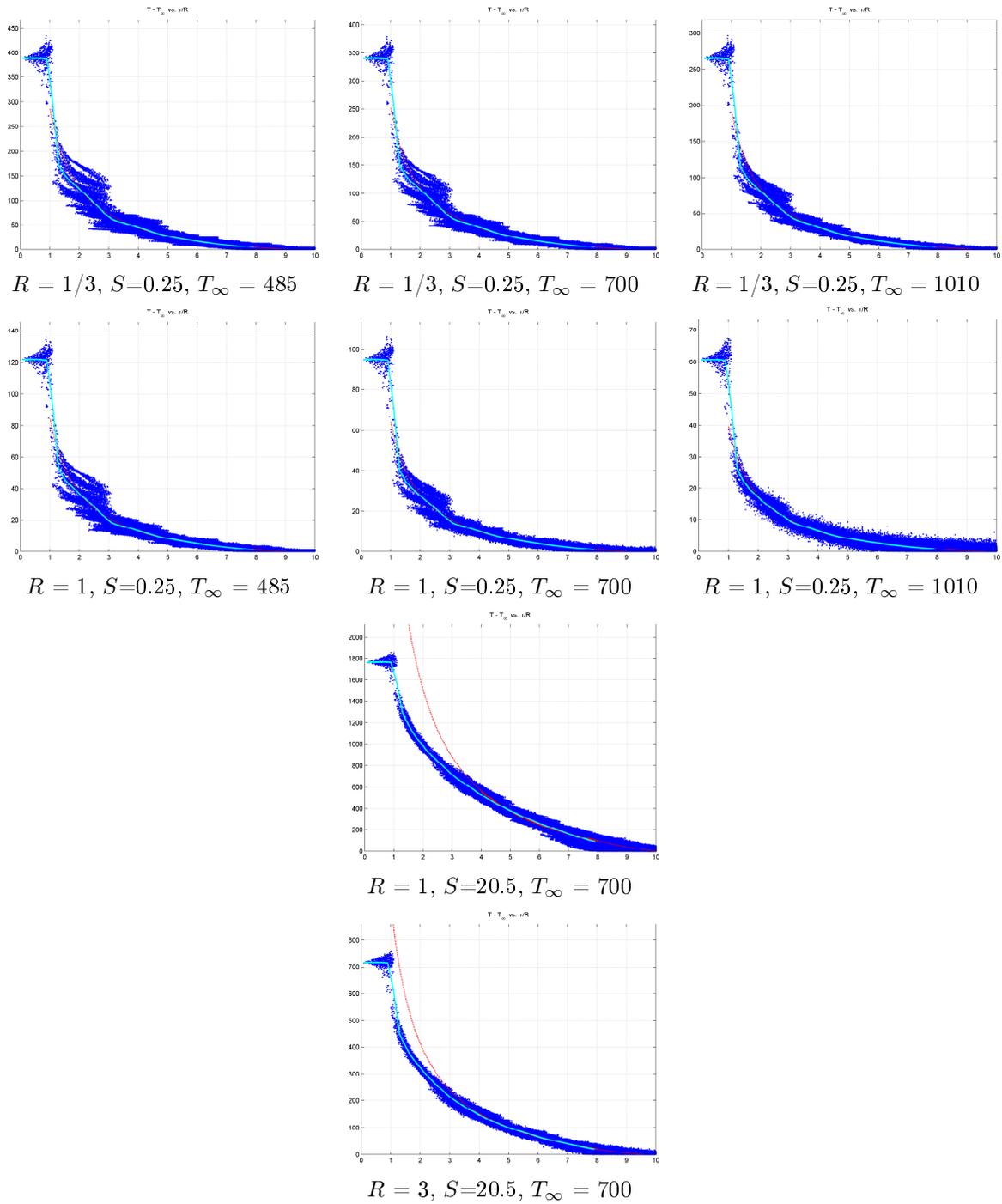
Notons que les valeurs de  $S$  utilisées pour les différentes valeurs de  $R$  dans la Table 10.2 correspondent à des situations physiques identiques du point de vue du réacteur. En effet, la puissance dégagée par la combustion d'un grain, donnée par (9.2), est proportionnelle au carré de son rayon. En conséquence, le profil de température (9.7) conduirait si  $r_\infty \gg R$  à une température pour la source  $T_S - T_\infty = T(R) - T_\infty \propto S/R \propto R$ . Les valeurs dans la Table 10.2 augmentent en effet quand  $R$  et  $S$  augmentent, mais dans des proportions très inférieures.

Ceci provient bien sûr en partie du fait que (9.7) ignore la dépendance de la conductivité à la température. Quand celle-ci augmente, les effets radiatifs prennent de l'ampleur et la conductivité effective augmente également, ce qui vient modérer la croissance de  $T_S$  prédite ci-dessus.

Mais une autre raison intervient également, c'est la dépendance de la conductivité radiative effective non seulement à la température, mais également à l'échelle. Ceci sera analysé plus en détail dans le chapitre suivant. Observons simplement à ce stade que dans le modèle (9.18)  $1/\lambda_{r,eff}$  contient un terme proportionnel à la surface volumique, qui dans un changement d'échelle se comporte comme  $1/R$ .  $\lambda_{r,eff}$  comporte donc une composante qui augmente avec l'échelle, ce qui vient encore modérer la croissance de  $T_S$  prédite ci-dessus.



**Figure 10.7.** Champs de température dans un plan de coupe, pour un grain en combustion entouré de l'empilement de grains, et diverses valeurs de  $S$ ,  $T_\infty$  et  $R$ .



**Figure 10.8.** Profils radiaux de température pour un grain en combustion entouré de l'empilement de grains, et diverses valeurs de  $S$ ,  $T_\infty$  et  $R$ .

# Chapitre 11

---

## Transferts radiatifs dans le milieu granulaire : analyse quantitative

### 11.1 Introduction

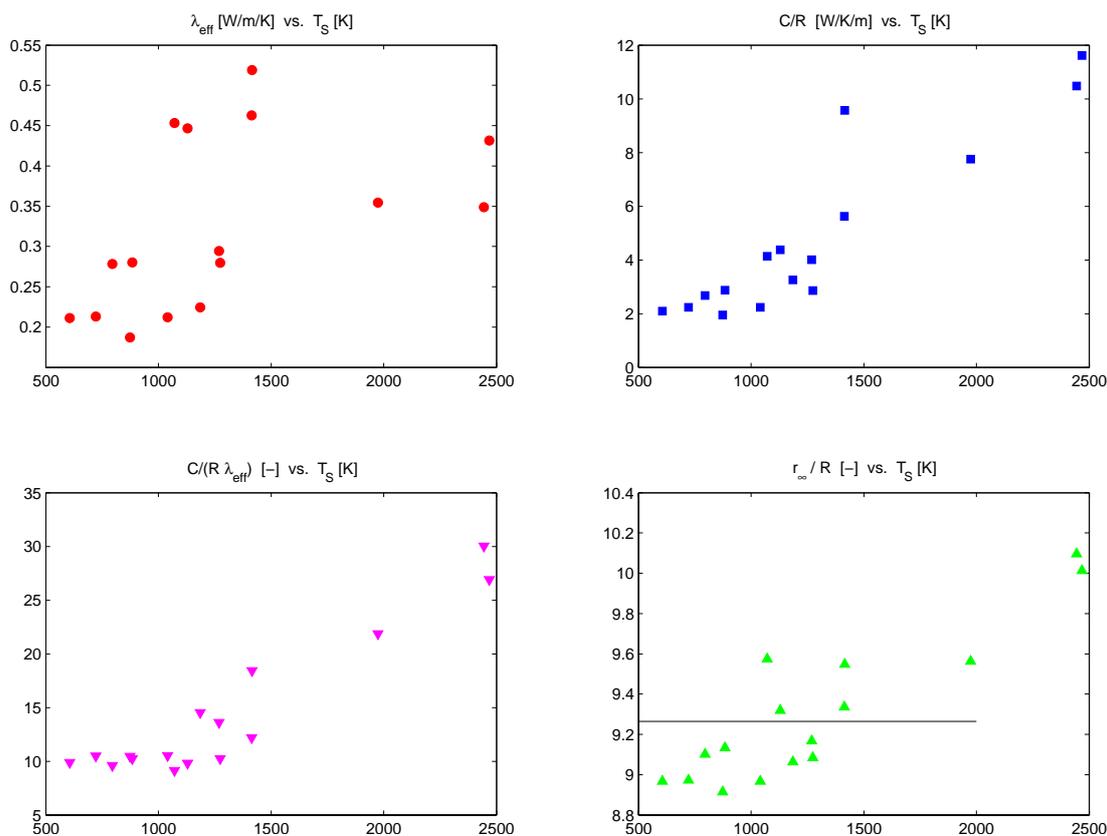
La discussion du chapitre précédent a fait apparaître divers effets des transferts thermiques radiatifs, dont deux principaux du point de vue d'une prise en compte dans une modélisation macroscopique, d'importances comparables dans cette application et qui mériteraient d'être caractérisés et quantifiés. Il s'agit d'une part de l'augmentation de la conductivité effective, et d'autre part de l'amélioration du contact thermique entre la source et le milieu environnant.

Le second point peut être vu comme une facette du premier, puisque ce sont les mêmes échanges entre parois solides en vis-à-vis qui en sont à l'origine. Il demanderait pourtant un traitement spécifique, puisqu'il s'agit d'un effet *a priori* non homogénéisable.

Quoiqu'il en soit, ce point ne sera pas traité ici pour une raison simple. Tous les résultats présentés dans ce chapitre et le précédent ont été obtenus pour *une seule* configuration géométrique, pour laquelle on a exploré l'influence des paramètres opératoires. Cette réalisation donne lieu à une certaine configuration autour du grain source, en contact avec sept autres grains, mais d'autres réalisations produiraient d'autres configurations, toutes aussi singulières mais toutes différentes. Une étude statistique sur un grand nombre de configurations s'imposerait pour sérieusement traiter le problème, qui n'a pu être conduite faute de temps.

Nous nous focaliserons donc plutôt dans la suite sur la caractérisation et la modélisation de l'augmentation de la conductivité effective. Celle-ci peut être étudiée en considérant la partie du domaine à une certaine distance de la source et des parois du four, en s'affranchissant ce-faisant de l'influence de ces conditions aux limites.

Deux approches vont être appliquées successivement. La première est dans le prolongement de la discussion amorcée dans le chapitre précédent, basée sur le modèle de la Section 9.4.1. La seconde, plus féconde, est basée sur une analyse plus fine des données numériques.



**Figure 11.1.**  $\lambda_{eff}$  [W/m/K],  $C/R$  [W/m/K],  $C/R\lambda_{eff}$  [-] et  $r_{\infty}/R$  [-] en fonction de la température de la sphère  $T_S$  [K]. Le trait horizontal est la valeur  $r_{\infty}/R = 9.264$  obtenue en l'absence de rayonnement.

## 11.2 Première approche : fit global des profils de température

On a montré pour quelques cas dans la Section 10.1 que les profils radiaux de température peuvent être représentés assez fidèlement, dans une plage intermédiaire de distance où l'influence des conditions aux limites n'est pas trop sensible, par une loi de la forme de (9.8).

De tels fits linéaires de  $T - T_{\infty}$  en fonction de  $R/r$  ont été systématiquement effectués, en opérant sur la plage  $4R \leq r \leq 8R$ . Les résultats correspondent aux courbes en rouge dans les figures 10.6 et 10.8. Ils représentent en général bien les données numériques dès que  $r \geq 3R$ . Les coefficients  $\lambda_{eff}$  et  $r_{\infty}$  qui en sont déduits sont donnés dans les Tables 11.3, 11.4, 11.7 et 11.8 .

Concernant le rayon apparent  $r_{\infty}$ , qu'on s'attend à trouver constant si on a bien un comportement conducteur et si les effets de parois ne s'étendent pas trop loin, on note une tendance à l'augmentation avec la température. Toutefois, ces variations restent limitées. Toutes les valeurs sont dans un intervalle  $\pm 4\%$  de la valeur  $9.264 R$  obtenue en l'absence de

rayonnement, à l'exception des deux cas avec  $S = 20.52$  W et  $R = 1$  mm. La température  $T_S$  est alors très élevée ( $\sim 2450$  K), et  $r_\infty$  atteint  $10.1 R$ .

Comme on pouvait s'y attendre,  $\lambda_{eff}$  comme  $C$  augmentent avec  $T_S$ . Toutefois, ces deux quantités ne sont pas proportionnelles, comme le montre la figure 11.1 où la conductivité effective  $\lambda_{eff}$ , le coefficient  $C/R$  et leur rapport  $C/R\lambda_{eff}$  sont tracés en fonction de  $T_S$ , pour tous les cas considérés. Le coefficient  $C$  est normé par le rayon des grains, pour éliminer l'effet d'échelle, et le rapport  $C/R\lambda_{eff}$  est adimensionnel.

Concernant ce dernier, deux régions apparaissent clairement. Il est approximativement constant jusqu'à  $T_S$  de l'ordre de 1000 K, puis augmente de façon apparemment linéaire. Ceci démontre que l'augmentation de  $C$  résulte de deux mécanismes, qui interviennent dans des plages de température qui ne se recouvrent pas complètement.

L'analyse selon cette approche ne sera pas poursuivie plus avant, car elle présente un défaut fondamental. En effet, elle repose sur l'hypothèse d'un profil radial de température de la forme de (9.8), obtenu par des considérations qui supposent que la conductivité est constante sur la plage de distance radiale considérée. Or tous nos résultats, y compris ceux obtenus en utilisant cette méthode, démontrent que  $\lambda_{eff}$  dépend de la température, qui varie fortement.

Un autre type d'analyse va donc être présenté maintenant, où ces variations de température sont explicitement prises en compte.

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	607	721	1186		2445
$T_\infty = 700\text{ K}$	795	884	1268	1974	2468
$T_\infty = 1010\text{K}$	1070	1130	1415		

**Table 11.1.** La température moyenne  $T_s$  de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	2.08	2.23	3.22		10.1
$T_\infty = 700\text{ K}$	2.67	2.86	4.02	7.74	10.1
$T_\infty = 1010\text{K}$	4.16	4.37	5.61		

**Table 11.2.** Coefficient  $C$  ([mW/K], voir éq. 9.5) en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	0.2111	0.2130	0.2243		0.3490
$T_\infty = 700\text{ K}$	0.2784	0.2801	0.2947	0.3547	0.4314
$T_\infty = 1010\text{K}$	0.4535	0.4467	0.4628		

**Table 11.3.** Conductivités effectives  $\lambda_{eff}$  [W/m/K] obtenues par un fit du type de (9.8) dans la plage  $4R \leq r \leq 8R$ , en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

Rayon $R = 1\text{mm}$	$S_r = 0.25W$	$S_r = 0.53W$	$S_r = 2.28W$	$S_r = 9.87W$	$S_r = 20.52W$
$T_\infty = 485\text{ K}$	8.9674	8.9722	9.0638		10.097
$T_\infty = 700\text{ K}$	9.1018	9.1343	9.1681	9.3356	10.014
$T_\infty = 1010\text{K}$	9.5749	9.3197	9.3356		

**Table 11.4.** Rayons apparents  $r_\infty/R$  obtenus par un fit du type de (9.8) dans la plage  $4R \leq r \leq 8R$ , en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour  $R = 1\text{mm}$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_\infty = 485 \text{ K}$	874	1186	1416
$T_\infty = 700 \text{ K}$	1041	1268	
$T_\infty = 1010\text{K}$	1275	1416	

**Table 11.5.** La température moyenne  $T_s$  de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_\infty = 485 \text{ K}$	0.65	3.26	28.70
$T_\infty = 700 \text{ K}$	0.74	4.02	
$T_\infty = 1010 \text{ K}$	0.95	5.61	

**Table 11.6.** Coefficient  $C$  ([mW/K], voir éq. 9.5) en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_\infty = 485 \text{ K}$	0.1869	0.2243	0.5190
$T_\infty = 700 \text{ K}$	0.2121	0.2947	
$T_\infty = 1010\text{K}$	0.2796	0.4628	

**Table 11.7.** Conductivités effectives  $\lambda_{eff}$  [W/m/K] obtenues par un fit du type de (9.8) dans la plage  $4R \leq r \leq 8R$ , en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

	$R = 1/3 \text{ mm}, S = 0.25\text{W}$	$R = 1 \text{ mm}, S = 2.28 \text{ W}$	$R = 3 \text{ mm}, S = 20.52\text{W}$
$T_\infty = 485 \text{ K}$	8.9146	9.0638	9.5471
$T_\infty = 700 \text{ K}$	8.9681	9.1681	
$T_\infty = 1010 \text{ K}$	9.0854	9.3356	

**Table 11.8.** Rayons apparents  $r_\infty/R$  obtenus par un fit du type de (9.8) dans la plage  $4R \leq r \leq 8R$ , en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour différents rayons  $R$ .

### 11.3 Deuxième approche : analyse locale

Afin de tenir compte de la température locale dans l'analyse des résultats, une première phase de tri des données est nécessaire. On définit pour cela une série de sphères concentriques autour du centre de la source, de rayons croissants avec un pas  $a$ . On opère ensuite une prise de moyenne des températures des éléments de volumes solides dont le centre se trouvent entre deux de ces sphères consécutives. On obtient ainsi une température moyenne en fonction de la distance radiale,  $\bar{T}(r)$ . Par simple différentiation, on peut aussi obtenir le gradient  $d\bar{T}/dr$ , avec la même résolution en distance radiale. Ces définitions ont un sens dans la mesure où les tracés des données individuelles par point de maillage présentés dans le chapitre précédent ont montré que le champ de température présente effectivement une assez bonne symétrie sphérique.

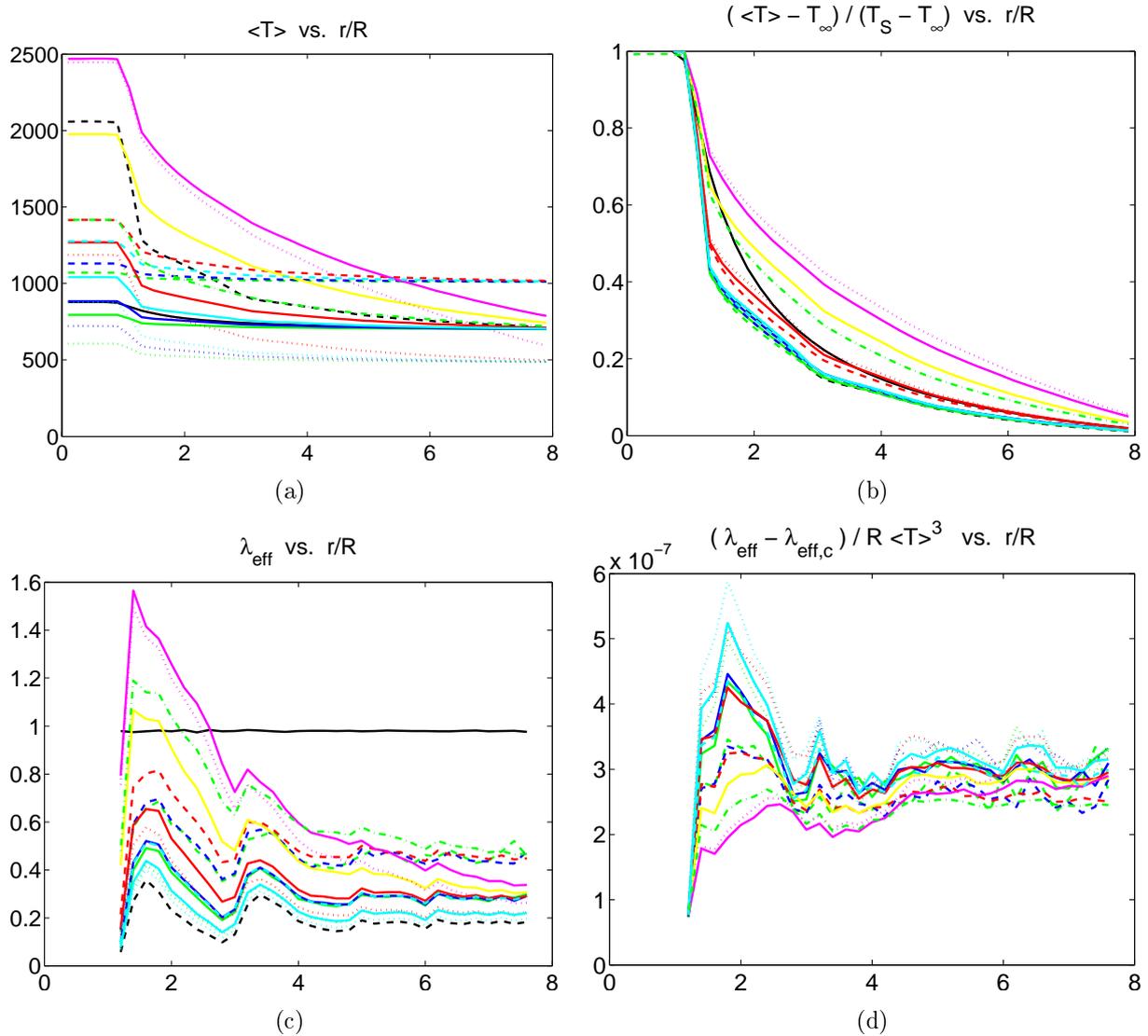
Dans l'état stationnaire, le même flux  $S$  traverse chacune des coques sphériques. On peut donc formellement définir et déterminer une conductivité effective en chaque position radiale (et non plus comme dans la méthode précédente par un fit sur l'ensemble du profil), à partir de la relation

$$S = -4\pi r^2 \lambda_{eff}(r) \frac{d\bar{T}}{dr} \quad (11.1)$$

Notons qu'on peut de la même façon déterminer une conductivité effective  $\lambda_{eff,c}(r)$  pour la conduction seule, à partir des données des simulations sans rayonnement. L'accroissement de conductivité induit par les transferts radiatifs est simplement  $\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c}$ . On s'attend à ce qu'il dépende de la température, alors que  $\lambda_{eff,c}$  n'en dépend pas. En revanche, elle peut fluctuer spatialement, surtout au voisinage de la source, du fait de l'empêchement stérique qui se fait sentir et de l'aire assez faible de la surface de prise de moyenne. Ces fluctuations devraient disparaître au delà d'une certaine distance.

Tout ceci est confirmé par les observations. Pour être complet, on présente d'abord les profils de température moyenne dans la figure 11.2a,b. La conductivité effective  $\lambda_{eff}$  est tracée dans la figure 11.2c. Elle est naturellement toujours supérieure à  $\lambda_{eff,c}$ , et présente d'importants pics pour les faibles rayons, probablement parce que la chaleur peut alors être directement transférée de la source vers d'autres grains visibles, jusqu'à une distance d'environ  $2R$ .  $\lambda_{eff}$  peut même alors dépasser la conductivité  $\lambda_s$  du solide. Notons que  $\lambda_{eff,c}$  devient effectivement à peu près constant pour  $r \geq 4R$ . Finalement, l'accroissement de conductivité  $\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c}$ , normé par  $R\bar{T}^3$ , est tracé dans la figure 11.2d. La normalisation par  $R$  est nécessaire pour compenser le changement d'échelle pour les sphères de rayons différents. On observe que cette quantité fluctue assez peu autour d'une valeur indépendante de la position radiale, quand  $r \geq 3R$ .

Pour compléter l'analyse, nous allons faire appel au modèle de la Section 9.4.2, et plus précisément rechercher une relation entre l'accroissement de conductivité, les propriétés



**Figure 11.2.** Profils de température  $\bar{T}$  (a,b), de conductivité effective  $\lambda_{eff}$  (c) et de  $(\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c})/R\bar{T}^3$  (d) en fonction de  $r/R$  pour toutes les simulations présentées jusqu'ici dans l'empilement. Les types de lignes correspondent à  $T_\infty$  : 485 K ( $\cdots$ ), 700 K (—) et 1010 K (---). Les couleurs correspondent à la combinaison  $(R, S)$ . Pour  $R = 1$  mm, 0.25 W (vert), 0.53 W (bleu), 2.28 W (rouge), 9.86 W (jaune), 20.5 W (magenta).  $R = 1/3$  mm,  $S=0.25$  W (cyan). Exception :  $R = 3$  mm,  $S = 20.5$  W (vert,  $-\cdot-\cdot-$ ). Les courbes en noir concernent la conduction pure, dans un milieu solide continu (—) et dans l'empilement (---).

morphologiques du milieu poreux et la température locale de la forme de (9.18), où  $\lambda_{r,eff}$  est ici interprété comme l'accroissement de conductivité  $\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c}$ .

Pour celà, nous traçons  $1/(\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c})$  en fonction de  $\mathcal{S}/\left(8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2\sigma\bar{T}^3\right)$  dans la figure 11.3. Chaque courbe correspond à l'un des jeux de paramètres  $(R, S, T_\infty)$  considérés. Nous avons porté tous les points pour  $3R \leq r \leq 8R$ . La figure est en réalité décomposée en trois cadres, parce que la plage de variation de l'abscisse est très grande, du fait des grandes variations de  $\bar{T}^3$ . Le cadre du haut contient toutes les données, mais seules celles pour les systèmes les plus froids sont clairement visibles. Le second et le troisième cadres sont des zooms successifs près de l'origine. Le cadre du bas montre donc en détail les résultats pour les systèmes où la température est la plus élevée. La ligne droite (identique dans tous les cadres) est le résultat du fit linéaire,

$$\frac{1}{\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c}} = 0.6523 + 0.3993 \frac{\mathcal{S}}{8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2\sigma\bar{T}^3} \quad (11.2)$$

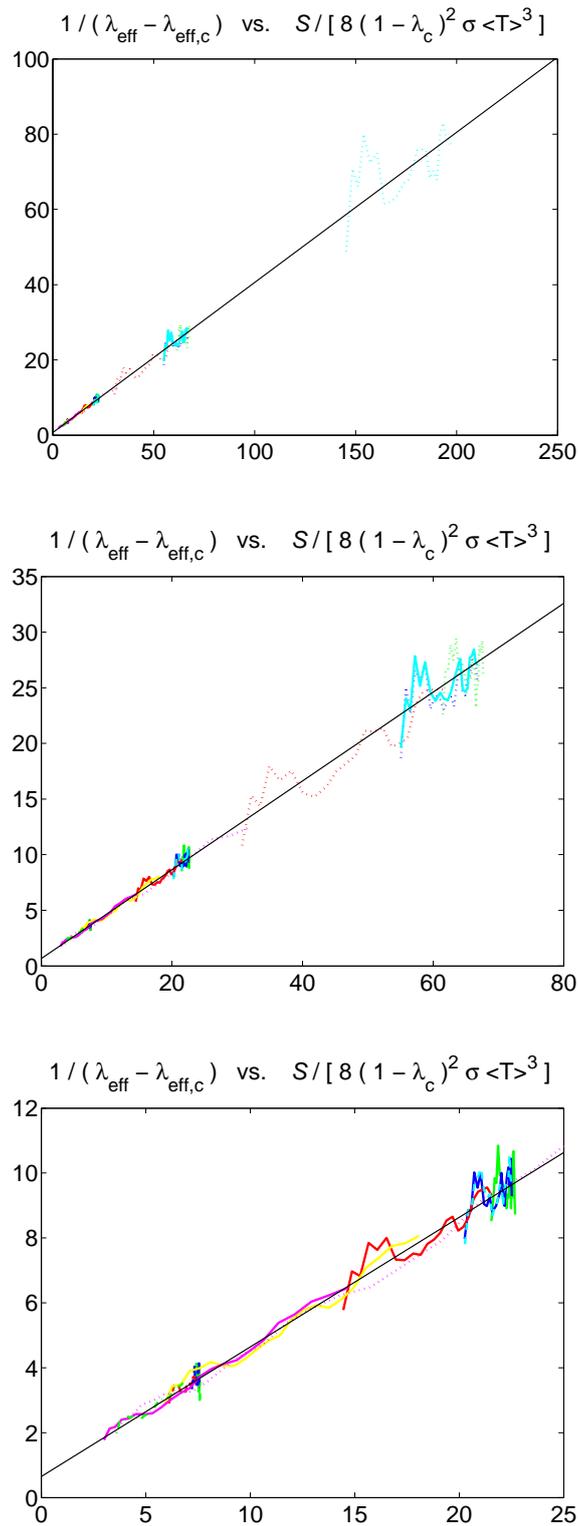
On a utilisé ici la surface volumique mesurée directement sur l'échantillon,  $\mathcal{S} = 2.38/R$ , et on a pris pour  $\tilde{\lambda}_c$  la moyenne 0.1814 des valeurs (0.1711, 0.1784, 0.1948) calculées en appliquant un gradient moyen dans les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$  (voir Section 9.1).

La pente de la droite est exactement le facteur de forme  $\omega_s$  de (9.18), et 0.4 est une valeur parfaitement raisonnable. L'ordonnée à l'origine 0.6523 devrait être égale à  $\frac{1 - \tilde{\lambda}_c - \epsilon}{(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \lambda_s}$ , qui vaut ici 0.617. Ceci est un accord tout à fait remarquable, surtout si l'on considère, comme le montre la figure 11.3, que ce terme contribue finalement très peu à  $\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c}$ .

Il est du reste naturel qu'il soit très faible. On voit en faisant tendre  $\bar{T}$  vers l'infini dans (9.18) qu'il correspond à la résistance thermique du solide que le flux radiatif doit traverser par conduction. Mais le modèle (9.18) a été bâti à partir d'un milieu alvéolaire, dont les pores ne sont pas connectés. Ce n'est pas le cas dans l'empilement de grains, et un flux purement radiatif, traversant tout l'espace des pores en se propageant de surface solide en surface solide peut parfaitement exister.

On constate donc que le modèle (9.18), malgré la brutalité des approximations sur lesquelles il repose, permet de modéliser avec une précision remarquable le surcroît de conductivité induit par le rayonnement dans ce milieu poreux particulier, et ce dans une plage de température extrêmement étendue (d'environ 500 K à au moins 1500 K, température maximale atteinte dans nos simulations pour  $r \geq 3R$ ).

Il est donc particulièrement tentant de le mettre à l'épreuve dans d'autres types de microstructures. Ceci fait l'objet du chapitre suivant.



**Figure 11.3.**  $1/(\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c})$  en fonction de  $\mathcal{S} / \left(8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \sigma \bar{T}^3\right)$ , pour toutes les simulations conduites dans l'empilement. Chaque courbe correspond à un jeu de paramètres  $(R, S, T_\infty)$ . Les cadres au milieu et en bas sont des agrandissements successifs du cadre du haut. Même conventions que dans la figure 11.2. La droite correspond au fit (11.2).

## Chapitre 12

---

# Transferts radiatifs dans les milieux reconstruits

Le succès de la modélisation de la conductivité d'origine radiative effectuée pour un milieu poreux particulier dans le chapitre précédent incite fortement à explorer d'autres type de microstructures. Les milieux reconstruits selon la méthode de Adler et al. (1990) constituent un choix naturel, puisqu'il permettent de prescrire séparément la porosité et une fonction de corrélation spatiale qui définit la texture. Notons que les milieux obtenus sont d'une nature très différente des milieux granulaires considérés précédemment. Ils sont plus représentatifs de milieux consolidés. A porosité égale, la phase solide est beaucoup mieux connectée, dans le sens où elle ne présente pas les restrictions de section qu'un flux conductif de chaleur doit traverser pour passer d'un grain à ses voisins.

### 12.1 Description des milieux reconstruits

#### 12.1.1 Principe de la reconstruction

La microstructure d'un milieu poreux binaire peut être décrite par la fonction de phase  $Z$ , qui prend les valeurs 0 ou 1 dans un élément de volume selon que celui-ci est occupé par la phase solide ou interstitielle. Cette fonction correspond en pratique au tableau  $[IND]$  défini dans la Section 5.2.

Du fait de son caractère aléatoire, il est naturel de la caractériser par ses moments statistiques. Le moment d'ordre 1, la moyenne volumique, est simplement la porosité (si l'on considère que  $Z = 1$  correspond aux pores).

$$\epsilon = \langle Z(\mathbf{x}) \rangle \quad (12.1)$$

Le moment d'ordre deux est la fonction de corrélation spatiale, qui mesure la probabilité que deux points séparés par un vecteur  $\mathbf{u}$  reposent dans la même phase, vide ou solide.

$$R_Z(\mathbf{u}) = \frac{\langle (Z(\mathbf{x}) - \langle Z \rangle)(Z(\mathbf{x} + \mathbf{u}) - \langle Z \rangle) \rangle}{\epsilon(1 - \epsilon)} \quad (12.2)$$

Pour des matériaux isotropes,  $R_Z$  est une fonction seulement de la norme  $u$  de  $\mathbf{u}$ . Cette fonction caractérise la morphologie de la microstructure, et notamment la finesse de sa texture, qui est liée à la longueur de corrélation  $\mathcal{L}$  définie par l'intégrale

$$\mathcal{L} = \int_0^\infty R_Z(u) du \quad (12.3)$$

La méthode de Adler et al. (1990) permet d'engendrer de façon stochastique des échantillons de milieu poreux en prescrivant séparément les porosités  $\epsilon$  et fonction de corrélation  $R_Z$ . Nous n'en donnons ici qu'un aperçu très rapide. Tous les détails sont fournis par Adler et al. (1990) ou Adler (1992).

La procédure consiste à engendrer d'abord un champ gaussien  $Y$  spatialement corrélié. Ce champ est obtenu en convoluant un champ gaussien  $X$  non corrélié avec un noyau qui est déduit de la fonction  $R_Z$  qu'on souhaite obtenir. Le seuillage de  $Y$  permet ensuite d'obtenir le champ binaire  $Z$ , avec la porosité désirée. La méthode, qui repose sur des transformations de Fourier, est particulièrement adaptée à la production de milieux spatialement périodiques.

### 12.1.2 Application

Nous avons appliqué cette méthode pour reconstruire des échantillons avec des valeurs cible de la porosité  $\epsilon$  allant de 0.2 à 0.9. Du fait de la nature stochastique de l'algorithme, les valeurs effectivement obtenues diffèrent légèrement de ces prescriptions.

Des corrélations spatiales de forme gaussienne pour le champ  $Y$  ont été imposées, de la forme  $\exp(-(u/l_c)^2)$ . Pour conserver les dimensions utilisées dans les simulations avec l'empilement de grains, nous avons reconstruit des échantillons de taille  $(Nc a)^3$ , avec  $Nc = 80$ . La longueur  $l_c$  a été fixée à  $l_c = 3a$ , mais pour plusieurs valeurs de la porosité on a également traité  $l_c = 2a$  et  $l_c = 4a$ . Ceci produit des échantillons de même porosité et de même morphologie, mais qui diffèrent par un facteur d'échelle.

Un grain source sphérique a finalement été inséré au centre de chaque échantillon, de rayon  $R = 5a$  comme dans les cas traités précédemment. Ce grain vient simplement se substituer à la distribution vide/solide qui existait à cet endroit. Il n'y donc plus de notion d'empêchement stérique, et les surfaces d'échange entre cette source et le solide dans le milieu environnant ne se réduisent pas à quelques contacts singuliers, comme c'était le cas dans l'empilement. D'autre part, pour la même raison, la sphère peut cette fois être positionnée exactement au centre de l'échantillon.

Dans tous les cas, on fixe  $a = 200 \mu\text{m}$  et  $R = 1 \text{ mm}$ . La sphère discrétisée a un volume  $552 a^3$ , ce qui correspondrait à un rayon  $5.089 a$ , très proche du rayon nominal. Ce volume se décompose en 312 éléments intérieurs et 240 en contact avec la surface. L'aire extérieure totale est  $480 a^2$ . L'aire exposée aux pores, où le terme source de chaleur est imposé, dépend de la porosité.

$\epsilon$ (cible)	$l_c/a$	$\epsilon$ (réel)	$a\mathcal{S}$	$\tilde{\lambda}_c$	$A_p/a^2$
0.20	3	0.1950	0.3059	0.6416	101
0.25	3	0.2445	0.3491	0.5619	122
0.30	3	0.2948	0.3832	0.4862	146
0.40	3	0.3949	0.4280	0.3485	178
0.50	3	0.4951	0.4420	0.2294	221
0.60	3	0.5955	0.4276	0.1326	260
0.70	3	0.6955	0.3848	0.0596	287
0.80	3	0.7958	0.3099	0.0124	333
0.90	3	0.8965	0.1942	0.0	377

**Table 12.1.** Propriétés des échantillons reconstruits pour  $l_c = 3a$ .

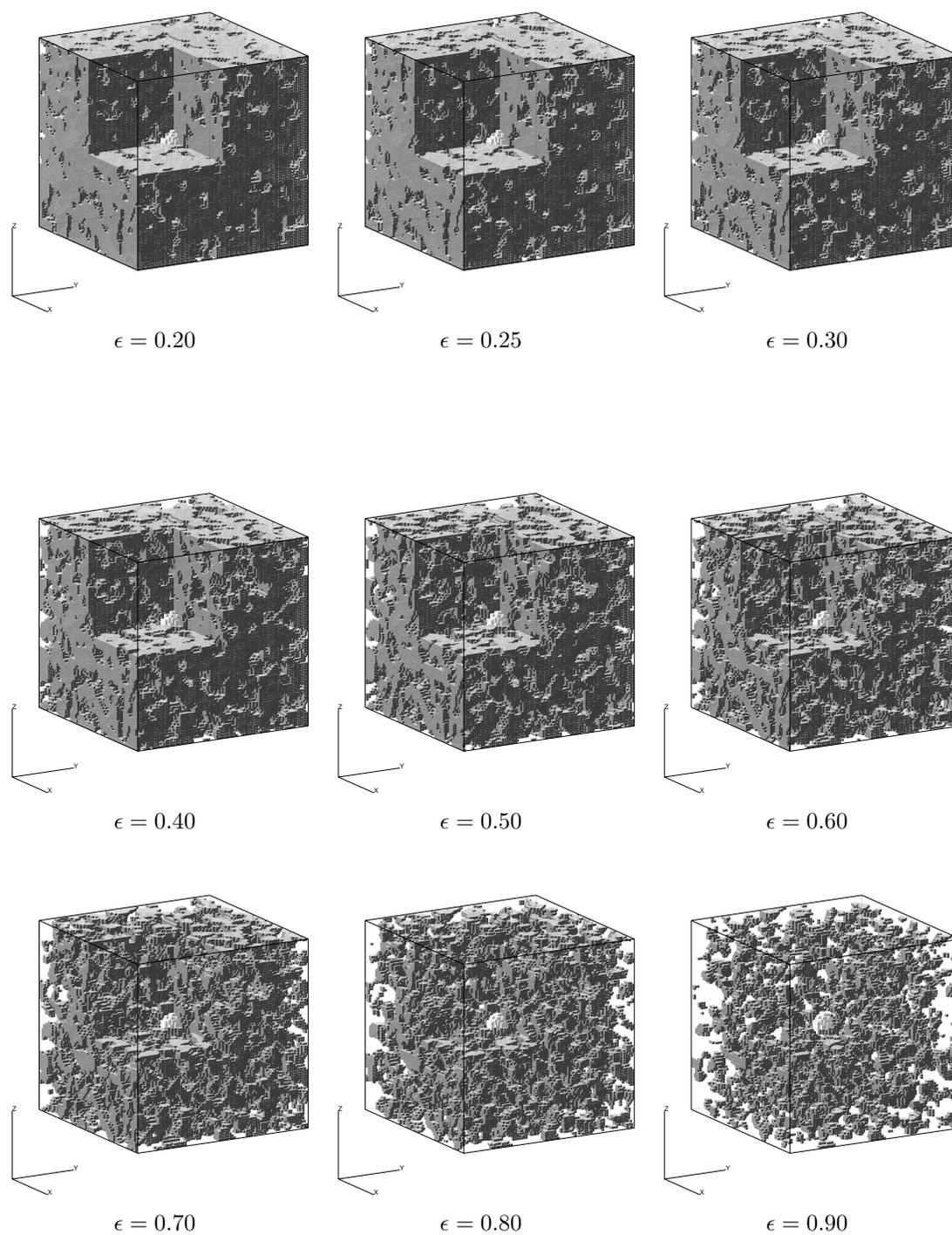
$\epsilon$ (cible)	$l_c/a$	$\epsilon$ (réel)	$a\mathcal{S}$	$\tilde{\lambda}_c$	$A_p/a^2$
0.25	2	0.2445	0.5099	0.5359	101
0.25	3	0.2476	0.3491	0.5619	122
0.25	4	0.2445	0.2626	0.5732	124
0.40	2	0.3949	0.6260	0.3248	174
0.40	3	0.3971	0.4280	0.3485	178
0.40	4	0.3949	0.3217	0.3607	188
0.60	2	0.5955	0.6299	0.1163	253
0.60	3	0.5967	0.4276	0.1326	260
0.60	4	0.5945	0.3212	0.1419	251
0.80	2	0.7958	0.4518	0.00708	341
0.80	3	0.7967	0.3099	0.01240	333
0.80	4	0.7925	0.2339	0.01836	319

**Table 12.2.** Propriétés des échantillons reconstruits pour diverse valeurs de  $l_c$ .

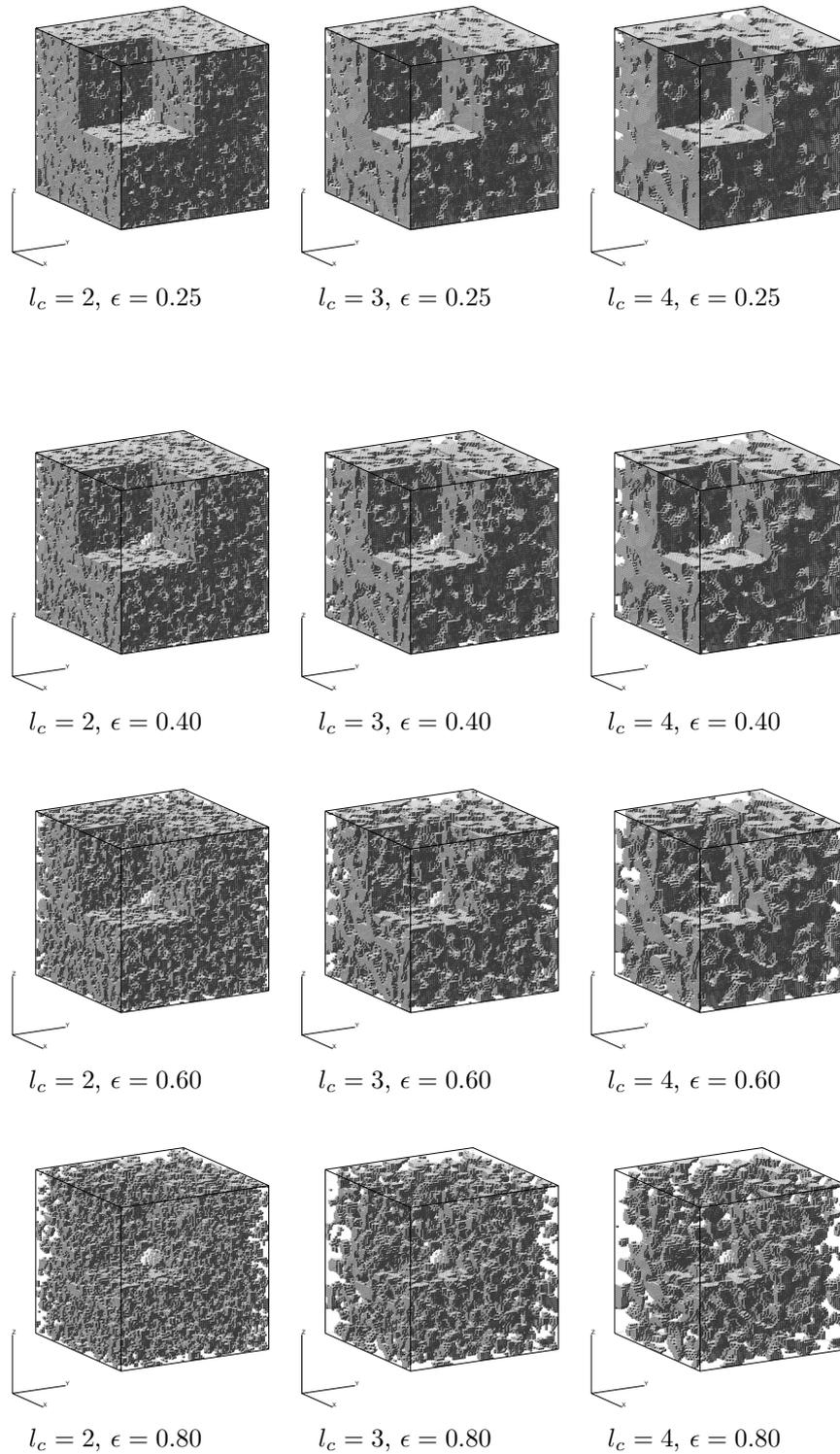
Des visualisations 3D de tous les échantillons sont présentées dans la figure 12.1, pour  $l_c = 3a$  et toutes les valeurs de la porosité, et dans la figure 12.2, pour quelques valeurs de la porosité et  $l_c = 2a, 3a$  et  $4a$ . Les tables 12.1 et 12.2 regroupent quelques propriétés des échantillons de milieux reconstruits.

- La porosité réelle de l'échantillon, qui diffère un peu de la valeur cible<sup>1</sup>
- La surface volumique en unité de maillage,  $a\mathcal{S}$ .
- Le coefficient de conductivité  $\tilde{\lambda}_c$  obtenu par des calculs où on impose un gradient moyen de température successivement dans les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Comme les échantillons sont ici périodiques dans les trois directions, il n'y a pas de différence significative entre les trois résultats, et c'est leur moyenne qui est donnée.
- L'aire  $A_p$  de la surface de la source exposée aux pores, en unité de maillage  $a^2$ .

<sup>1</sup> Pour simplifier, on utilisera la valeur cible dans la discussion pour se référer à un échantillon, mais il faut se souvenir que la porosité réelle est celle donnée dans ces tables.



**Figure 12.1.** Echantillons de milieux reconstruits avec différentes porosités  $\epsilon$  et une longueur  $l_c = 3a$ .



**Figure 12.2.** Echantillons de milieux reconstruits avec différentes porosités  $\epsilon$  et diverses longueurs  $l_c$ .

## 12.2 Résultats : Phénoménologie

La procédure suivie pour les simulations, concernant par exemple la façon dont la puissance de la source est distribuée ou les conditions aux limites extérieures représentées par les parois d'un four, est exactement identique à celle appliquée pour l'empilement, et nous n'y reviendrons pas. Nous ne décrirons pas non plus en détail les critères d'arrêt et la détection de l'établissement du régime établi. Disons simplement que du point de vue du bruit et de la tolérance sur le flux sortant, les résultats sont toujours au moins aussi bons et souvent meilleurs que pour l'empilement. Ceci résulte principalement de l'expérience acquise dans la gestion de la valeur  $q_r$  des quanta d'énergie.

### 12.2.1 Comparaison Milieu reconstruit/empilement

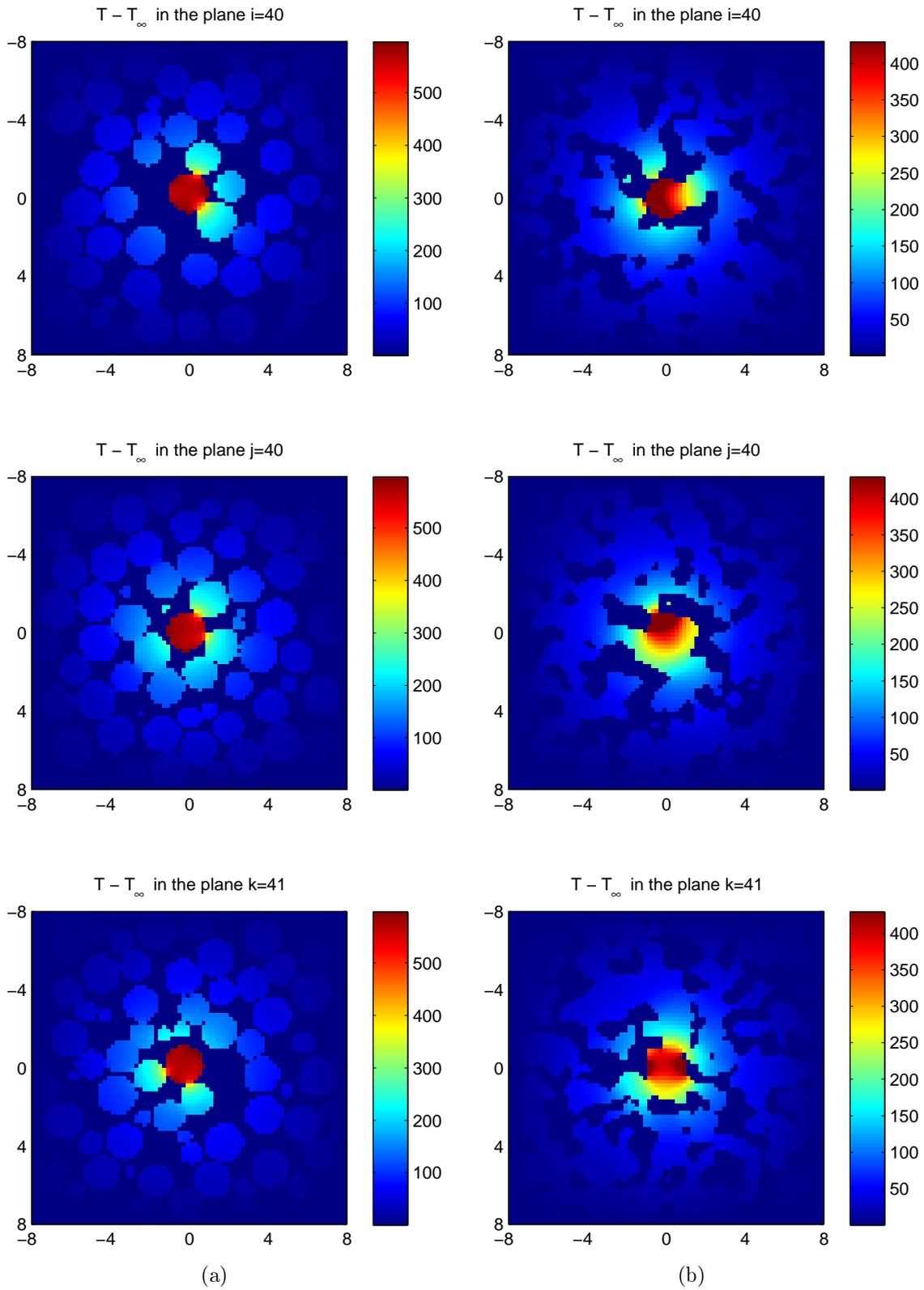
La première idée qui vient est naturellement de comparer, pour des caractéristiques et dans des conditions équivalentes, les comportements de l'empilement et d'un milieu reconstruit. Rappelons que l'empilement a une porosité  $\epsilon = 0.413$ , une surface volumique  $\mathcal{S} = 2.38/R$ , et un coefficient de conductivité  $\tilde{\lambda}_c = 0.181$ .

Le milieu reconstruit avec  $\epsilon = 0.40$  a une porosité réelle 0.395 et une surface volumique  $\mathcal{S} = 2.14/R$ . Ces valeurs sont assez proches de celles pour l'empilement. En revanche, son coefficient  $\tilde{\lambda}_c = 0.349$  est bien supérieur. Ceci provient de la différence de morphologie, qui n'impose pas comme dans l'empilement au flux conductif de traverser des successions de restrictions de section aux contacts entre les grains.

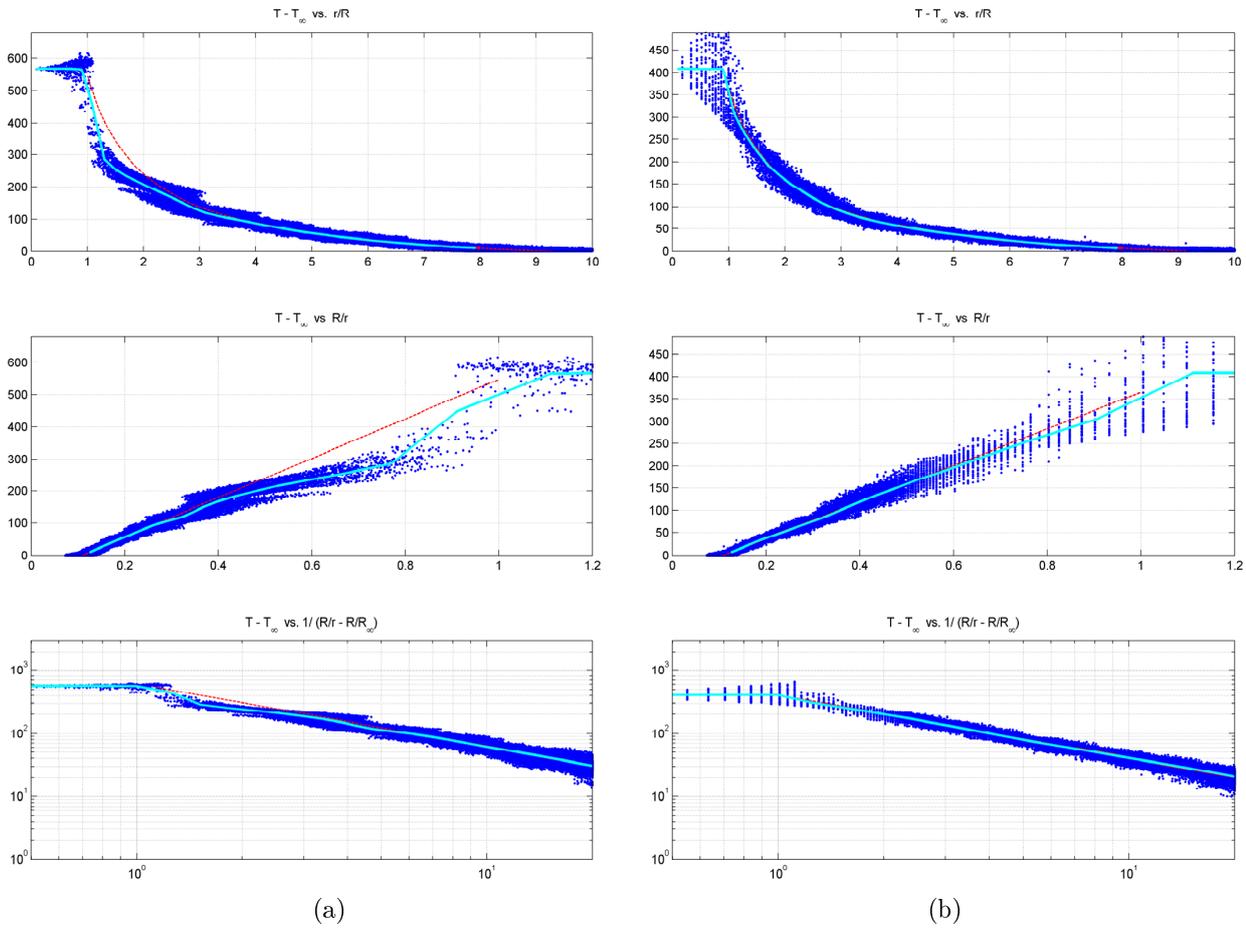
Les champs de température dans trois plans de coupe et les profils radiaux sont comparés dans les figures 12.3 et 12.4, respectivement, dans des conditions opératoires identiques,  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K.

Les différences de microstructure sont bien visibles dans la figure 12.3. On voit par exemple très bien que le contact conductif entre la source et le milieu reconstruit fait intervenir une fraction bien plus grande de son contour. En conséquence, on n'observe pas dans la figure 12.4 de chute brutale de température au voisinage de  $r = R$ . Notons que les alignements de points verticaux viennent du fait que la sphère est exactement centrée au milieu de la cellule. Beaucoup de points de maillage se trouvent donc à des distances égales de son centre.

Le profil de température est beaucoup moins chahuté que dans l'empilement, et une variation linéaire en fonction de  $R/r$  est observée jusqu'au voisinage de la source. On pourrait donc tenter d'utiliser comme pour l'empilement l'approche basée sur le modèle de la Section 9.4.1 et sur l'équation (9.8). Du reste, les courbes en rouges dans les figures qui montrent les profils de température sont effectivement les résultats de fits de la forme de (9.8). Toutefois, pour la raison déjà mentionnée que ce modèle ne tient pas compte de la variation de conductivité effective en fonction de la position radiale, nous ne discuterons pas ses résultats.



**Figure 12.3.** Champs de température dans trois plans de coupe orthogonaux, pour un grain en combustion dans l'empilement (a) ou dans un milieu reconstruit (b) avec  $\epsilon = 0.40$  et  $l_c/a = 3$ .  $S = 2.28$  W,  $T_\infty = 700$  K,  $R = 1$ mm.



**Figure 12.4.** Profils radiaux de température pour un grain en combustion dans l’empilement (a) ou dans un milieu reconstruit (b) avec  $\epsilon = 0.40$  et  $l_c/a = 3$ .  $S = 2.28$  W,  $T_\infty = 700$  K,  $R = 1$  mm. On porte  $T - T_\infty$  en fonction de  $r/R$ , de  $R/r$  et de  $1/(R/r - R/r_\infty)$ .

### 12.2.2 Galerie de résultats.

On peut se faire une idée rapide de l’ensemble des cas qui ont été considérés en se référant aux Tables 12.3 et 12.4, qui donnent les températures  $T_S$  atteintes pas la sphère source, et le coefficient  $C$  correspondant. La galerie de figures suivante présente la plupart de ces cas, en montrant les champs de température dans un plan de coupe, et leur profils radiaux.

On commence par présenter différentes conditions opératoires, y compris un cas sans rayonnement, pour le milieu reconstruit avec  $\epsilon = 0.60$  et  $l_c/a = 3$  (figures 12.5 et 12.6). Dans le cas sans rayonnement, on retrouve le mode de transfert de chaleur de la source vers le milieu poreux via quelques contacts singuliers, et le caractère très accidenté du profil radial associé, qui comporte à nouveau des striures horirontales, signature du caractère

isotherme de certaines régions solides. Dans ce cas, il s'agit de bras morts, connectés au squelette solide et portés à la température régnant au point de connexion, mais qui ne sont pas traversés par un flux de chaleur. Ces caractéristiques s'atténuent en présence de rayonnement, et finissent par disparaître entièrement quand le niveau de température s'élève. Il est notamment visible que tout le solide en vis à vis avec la source en reçoit alors de la chaleur.

Ensuite, les résultats pour  $S = 2.28 \text{ W}$  et  $T_\infty = 700\text{K}$  sont présentés quand  $l_c/a = 3$ , pour toutes les valeurs de la porosité (figures 12.7 et 12.8). Pour comparaison, les résultats obtenus dans les mêmes configurations sans tenir compte du rayonnement sont présentés dans les figures 12.9 et 12.10. Pour les faibles porosités ( $\epsilon \leq 0.30$ ), les résultats diffèrent peu entre les deux cas. Du reste, la température atteinte par la source est très peu diminuée par la prise en compte des transferts radiatifs (voir table 12.3). Ceci résulte de la grande conductivité thermique de ces milieux poreux, et du très bon contact qu'ils présentent avec la source. Quand la porosité est plus importante, on retrouve les différences qui viennent d'être signalées pour le cas de  $\epsilon = 0.60$ .

Il est à noter que quand  $\epsilon = 0.90$  le solide ne percole pas, et ne permet pas l'évacuation de la chaleur par conduction de la source vers les parois du four. En outre, le milieu est tellement ouvert que des échanges radiatifs directs entre la source et le four sont possibles (ceci est également visible dans la figure 12.1). Les données correspondant à ce cas sont donc peu fiables et n'ont pas été prises en compte dans l'analyse de la Section 12.3. Il conviendrait pour traiter convenablement ce cas (et dans une moindre mesure celui pour  $\epsilon = 0.80$ ) d'agrandir sensiblement la taille de l'échantillon. Ceci n'a pas été fait ici, mais serait d'un grand intérêt, car les milieux reconstruits avec de telles porosités se rapprochent des mousses, utilisées dans beaucoup d'applications industrielles et dont les propriétés radiatives ont suscité beaucoup de travaux (voir Section 4.3.2).

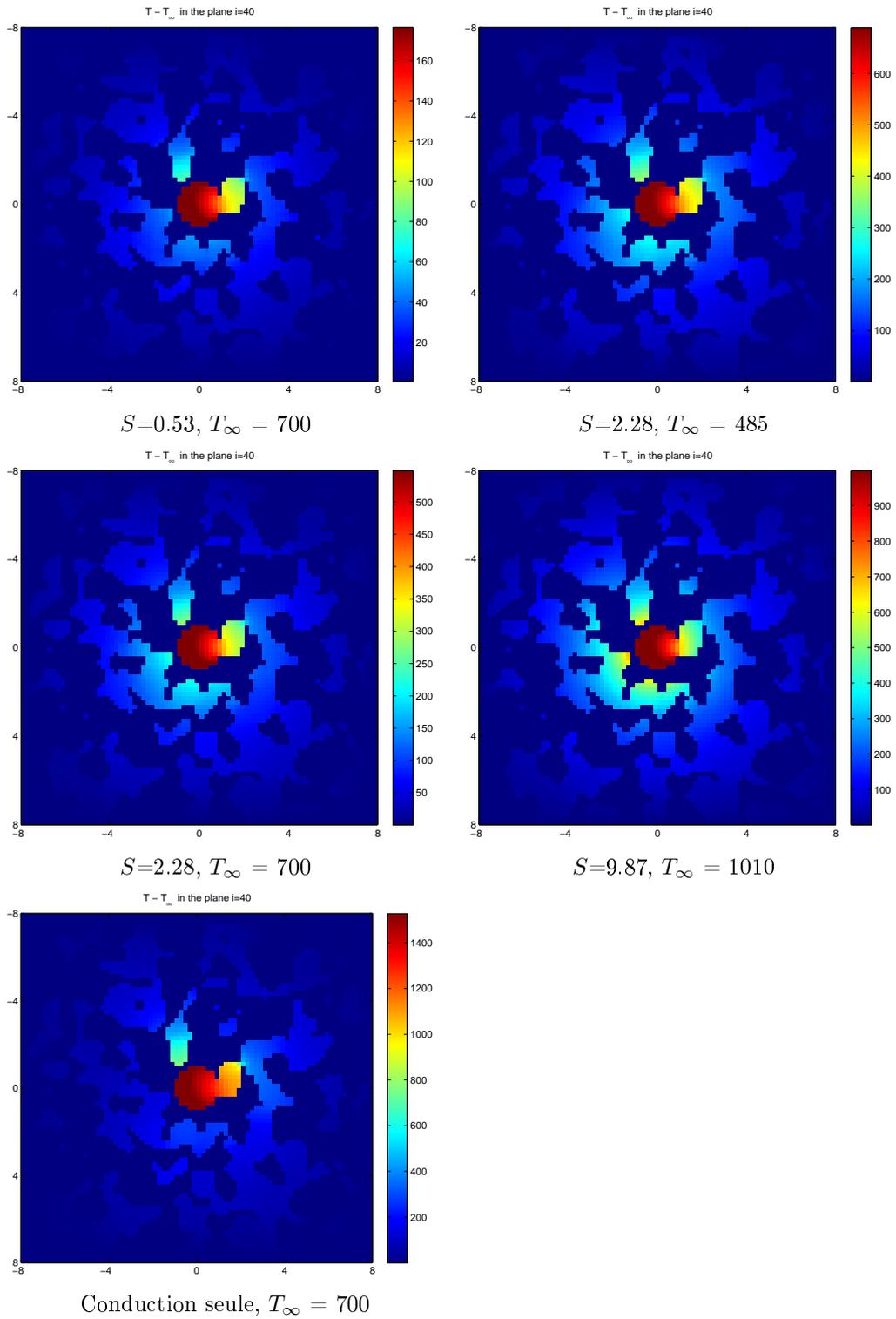
Enfin, toujours pour  $S = 2.28 \text{ W}$  et  $T_\infty = 700\text{K}$ , on présente un ensemble de combinaisons avec  $\epsilon = 0.25, 0.40, 0.60$  et  $0.80$ , et  $l_c/a = 2, 3$  et  $4$  (figures 12.11 et 12.12). Il est difficile à partir de ces figures de mettre clairement en évidence l'influence de  $l_c$ , c'est à dire de l'échelle caractéristique de la microstructure, en partie du fait que les configurations géométriques sont différentes (à la différence du cas du Chapitre 10, où un simple changement d'échelle avait été effectué, sans modifier la forme du milieu poreux). Du reste, cette influence est très modeste dans les cas où la conductivité est forte, c'est à dire pour les faibles porosités. Toutefois, la principale différence est révélée par les tables 12.3 et 12.4, pour les grandes porosités. On voit ici que  $T_S$  décroît (ou de façon équivalente que  $C$  augmente) très fortement quand  $l_c$  augmente. Ceci résulte directement de la dépendance déjà signalée de  $\lambda_{r,eff}$  à l'échelle (Section 10.2).

$\epsilon$	$l_c/a$	$S = 0.53 \text{ W}$ $T_\infty = 700 \text{ K}$	$S = 2.28 \text{ W}$ $T_\infty = 485 \text{ K}$	$S = 2.28 \text{ W}$ $T_\infty = 700 \text{ K}$	$S = 9.86 \text{ W}$ $T_\infty = 1010 \text{ K}$	$S = 2.28 \text{ W}$ $T_\infty = 700 \text{ K}$ Conduction seule
0.20	3		777	980	1914	1005
0.25	3	777	820	1015	1938	1059
0.30	3			1043		1107
0.40	3	808	951	1109		1267
0.50	3			1180		1638
0.60	3	867	1141	1213		2154
0.70	3	890		1248		3226
0.80	3		1229	1267		6839
0.25	2			1007		1032
0.25	3			1015		1059
0.25	4			1020		1093
0.40	2			1122		1245
0.40	3			1109		1267
0.40	4			1111		1346
0.60	2			1266		2202
0.60	3			1213		2154
0.60	4			1188		1939
0.80	2			1314		13479
0.80	3			1267		6839
0.80	4			1239		4404

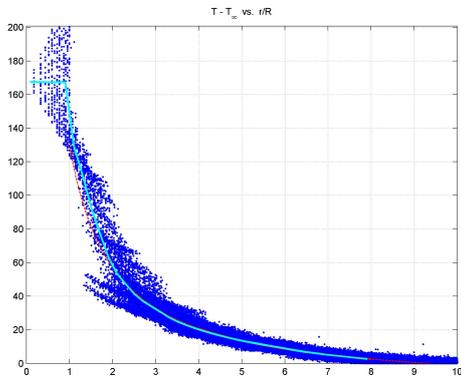
**Table 12.3.** La température moyenne  $T_s$  [K] de la sphère source en fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour les milieux reconstruits.

$\epsilon$	$l_c/a$	$S = 0.53 \text{ W}$	$S = 2.28 \text{ W}$	$S = 2.28 \text{ W}$	$S = 9.86 \text{ W}$	$S = 2.28 \text{ W}$
		$T_\infty = 700 \text{ K}$	$T_\infty = 485 \text{ K}$	$T_\infty = 700 \text{ K}$	$T_\infty = 1010 \text{ K}$	$T_\infty = 700 \text{ K}$ Conduction seule
0.20	3		7.80	8.16	10.8	7.47
0.25	3	6.85	6.81	7.27	10.6	6.35
0.30	3			6.67		5.60
0.40	3	4.89	4.91	5.58		4.02
0.50	3			4.76		2.43
0.60	3	3.17	3.48	4.37		1.56
0.70	3	2.79		4.16		0.90
0.80	3		3.07	4.03		0.37
0.25	2			7.43		6.85
0.25	3			7.27		6.35
0.25	4			7.14		5.80
0.40	2			3.98		4.18
0.40	3			5.58		4.02
0.40	4			5.59		3.53
0.60	2			4.03		1.51
0.60	3			4.37		1.56
0.60	4			4.67		1.84
0.80	2			3.71		0.18
0.80	3			4.03		0.37
0.80	4			4.23		0.61

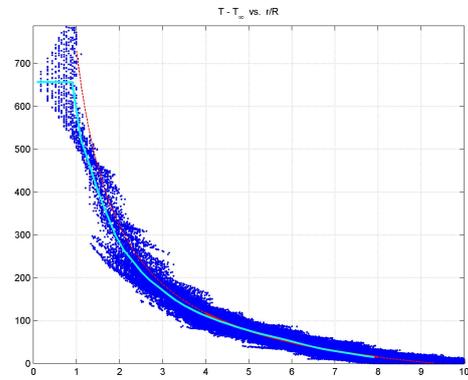
**Table 12.4.** Le coefficient  $C$  [mK/K] fonction des conditions  $S$  et  $T_\infty$ , pour les milieux reconstruits.



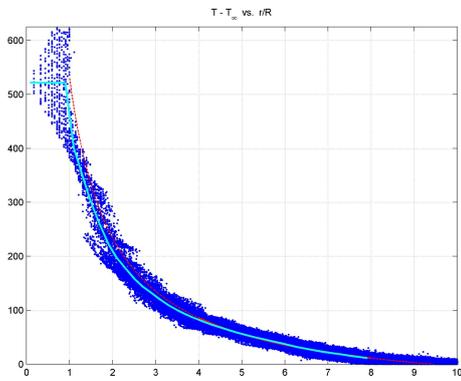
**Figure 12.5.** Champs de température dans un plan de coupe, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec  $\epsilon = 0.60$  et  $l_c/a = 3$ , et sous diverses conditions.



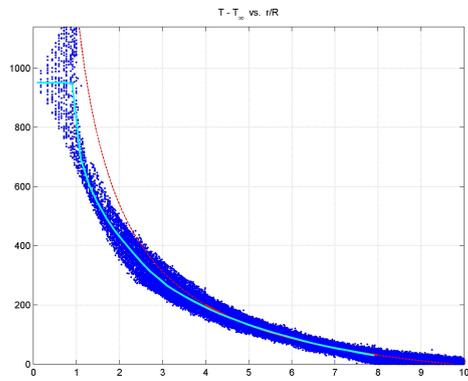
$S=0.53, T_\infty = 700$



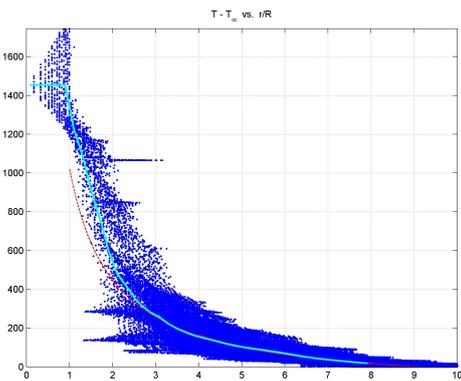
$S=2.28, T_\infty = 485$



$S=2.28, T_\infty = 700$

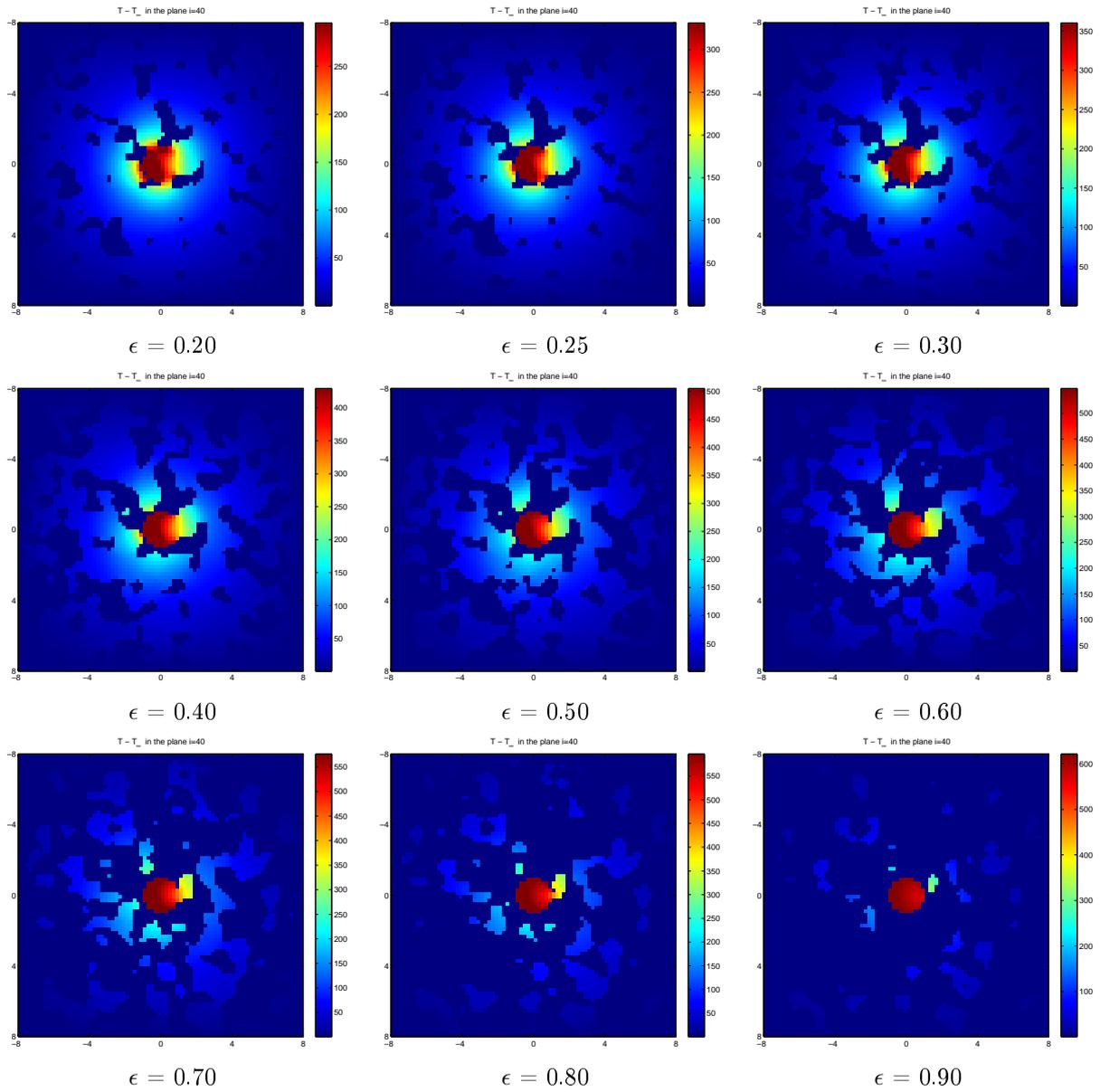


$S=9.87, T_\infty = 1010$

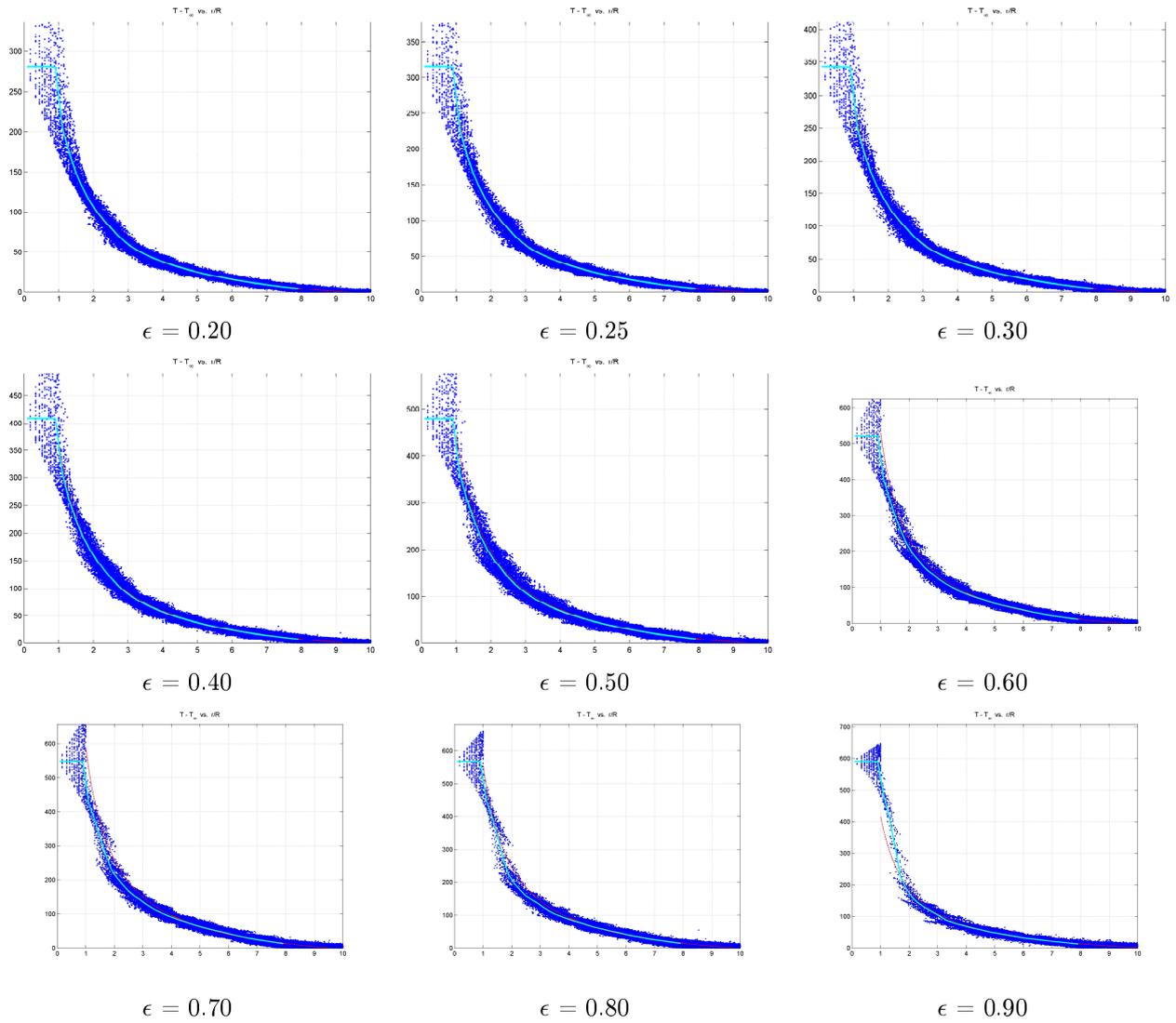


Conduction seule,  $S=2.28, T_\infty = 700$

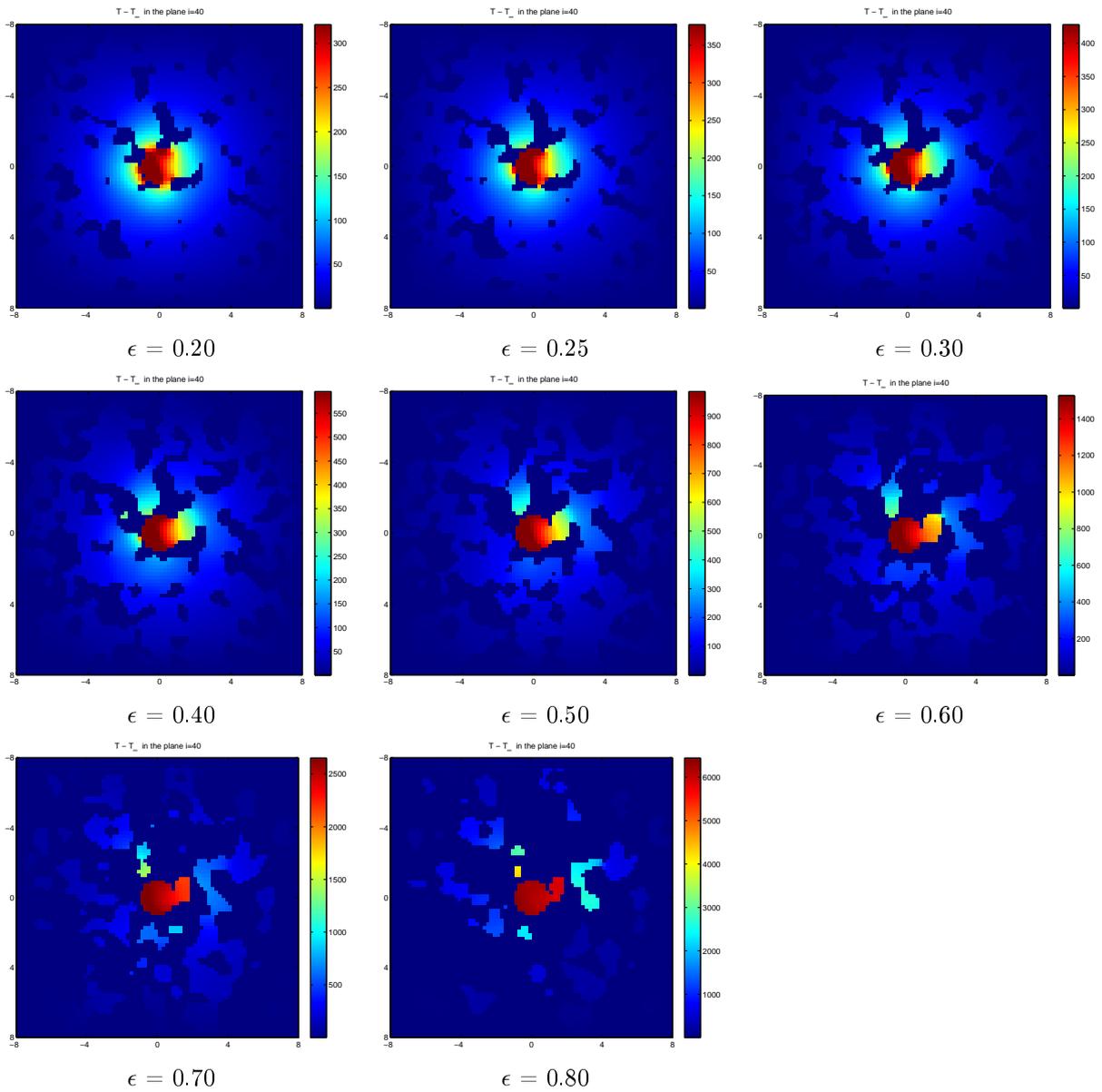
**Figure 12.6.** Profils radiaux de température, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec  $\epsilon = 0/80$  et  $l_c/a = 3$ , et sous diverses conditions.



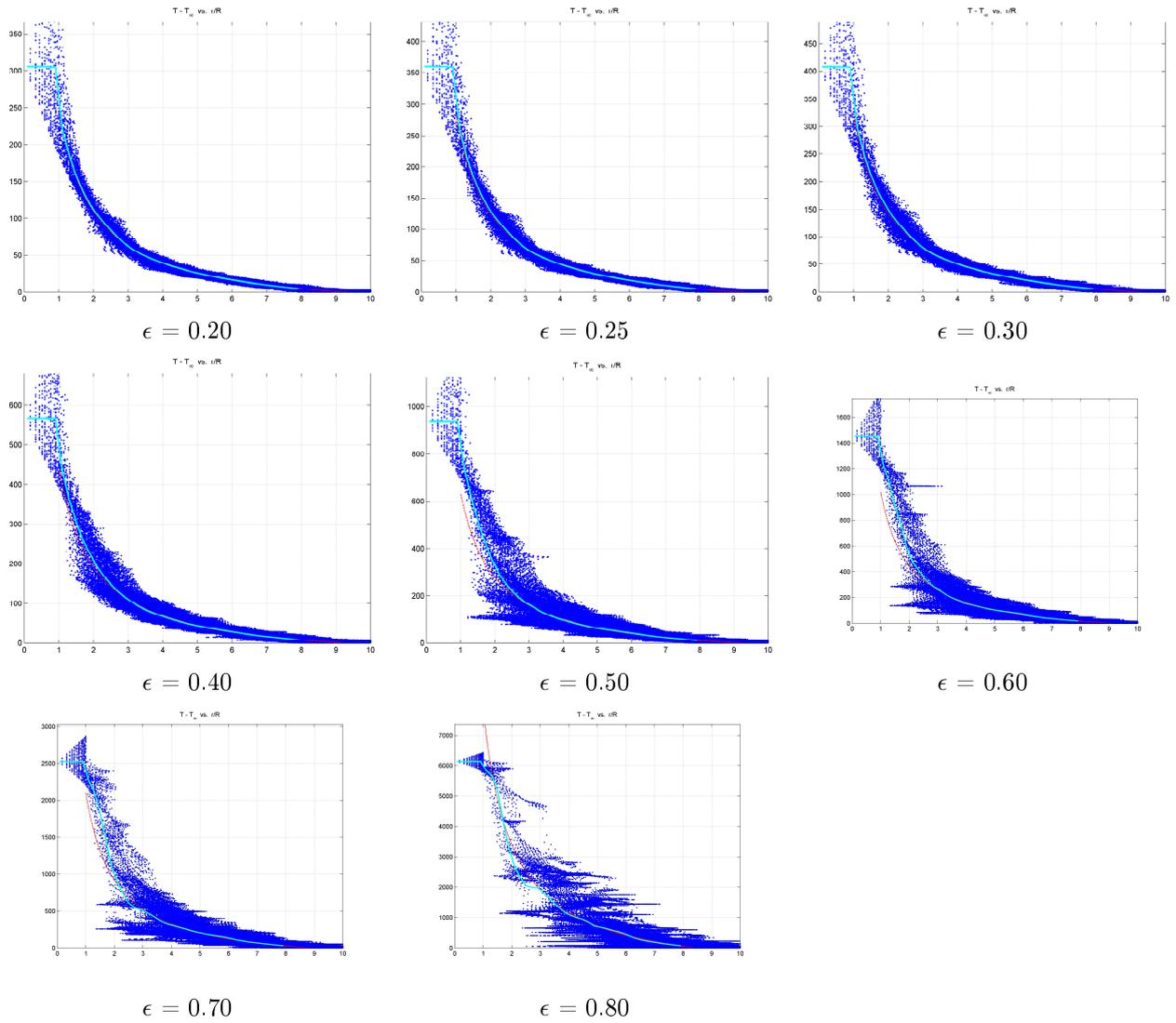
**Figure 12.7.** Champs de température dans un plan de coupe, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec diverses porosités  $\epsilon$  et  $l_c/a = 3$ .  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K.



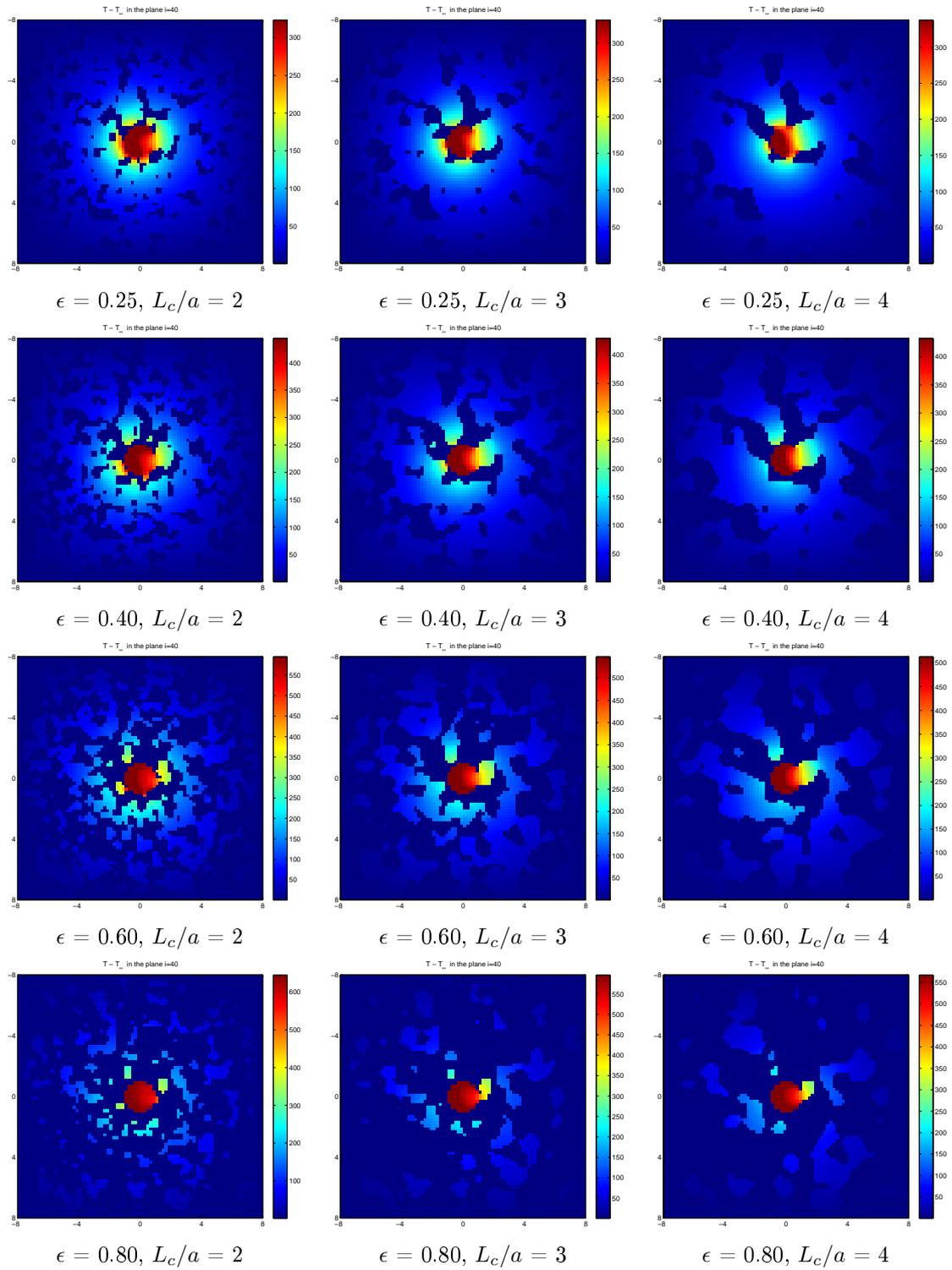
**Figure 12.8.** Profils radiaux de température, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec diverses porosités  $\epsilon$  et  $l_c/a = 3$ .  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K.



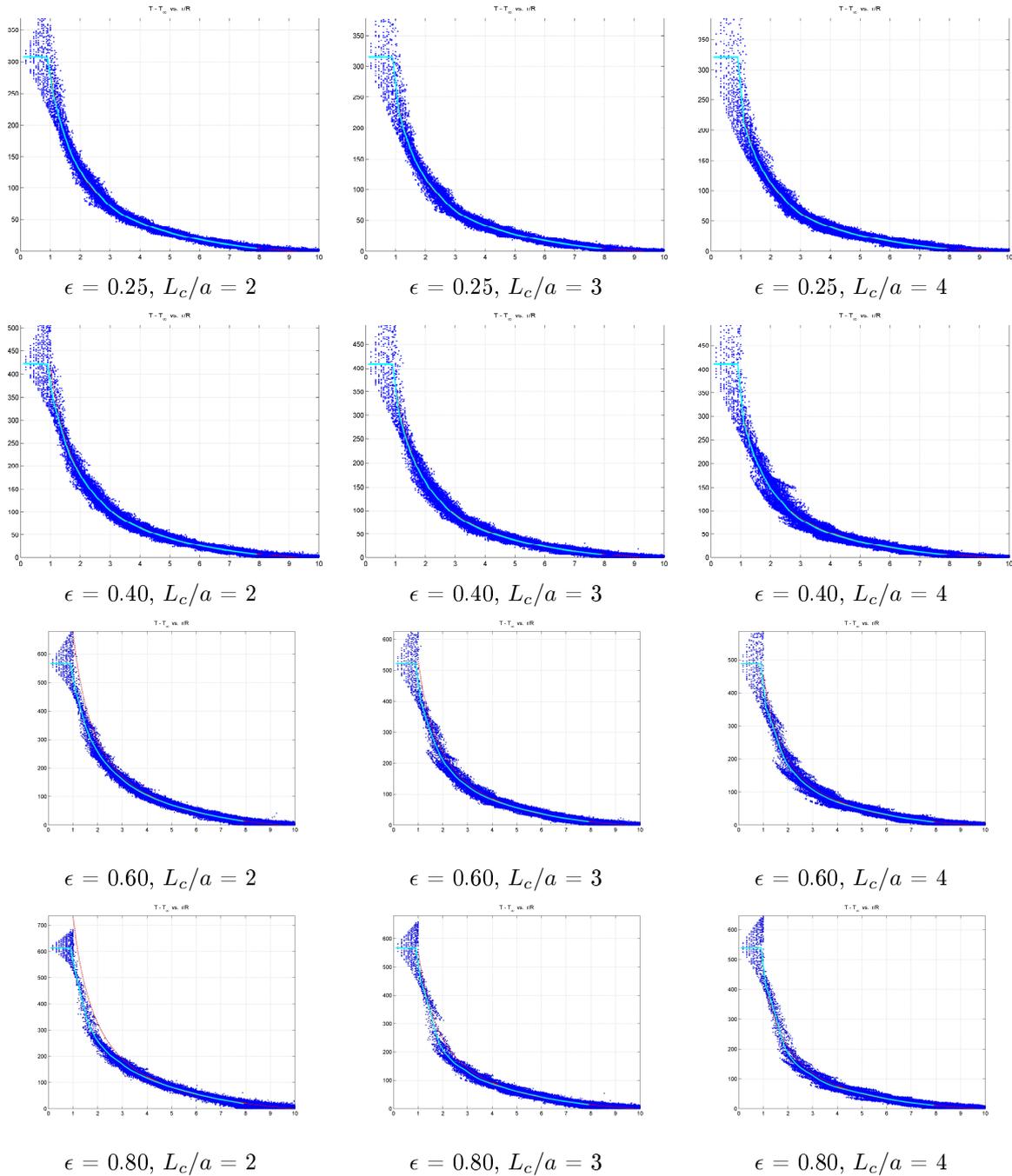
**Figure 12.9.** Champs de température dans un plan de coupe, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec diverses porosités  $\epsilon$  et  $l_c/a = 3$ .  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K (pas de rayonnement).



**Figure 12.10.** Profils radiaux de température, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec diverses porosités  $\epsilon$  et  $l_c/a = 3$ .  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K (pas de rayonnement).



**Figure 12.11.** Champs de température dans un plan de coupe, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec diverses porosités  $\epsilon$  et longueurs  $l_c$ .  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K.



**Figure 12.12.** Profils radiaux de température, pour un grain en combustion entouré d'un milieu reconstruit avec diverses porosités  $\epsilon$  et longueurs  $l_c$ .  $S = 2.28$  W et  $T_\infty = 700$  K.

### 12.3 Analyse quantitative

La présentation de cette analyse sera très brève, car elle a été conduite exactement de la même façon que dans la Section 11.3, par référence au modèle de la Section 9.4.2, et en cherchant à représenter les données numériques par une formule de la forme de (9.18). Nous n'en donnons que le résultat final, dans la figure 12.13, qui est la contrepartie de la figure 11.3 pour l'empilement.

Les résultats de toutes les simulations présentes dans la table 12.3 (à l'exception de celles pour  $\epsilon = 0.90$ , pour les raisons mentionnées plus haut) sont reportés dans la figure 12.13. Il y a trop de cas différents pour donner une légende intelligible qui permettrait d'identifier chacun d'eux, mais l'idée même de cette représentation est justement de montrer que tous les résultats se regroupent sur une même droite, indépendamment de la porosité  $\epsilon$ , de l'échelle  $l_c$ , où des conditions opératoires  $S$  et  $T_\infty$ . On retiendra simplement la tendance générale que comme dans le cas de la figure 11.3 pour l'empilement, les valeurs les plus grandes de l'abscisse correspondent aux systèmes les moins chauds, et inversement.

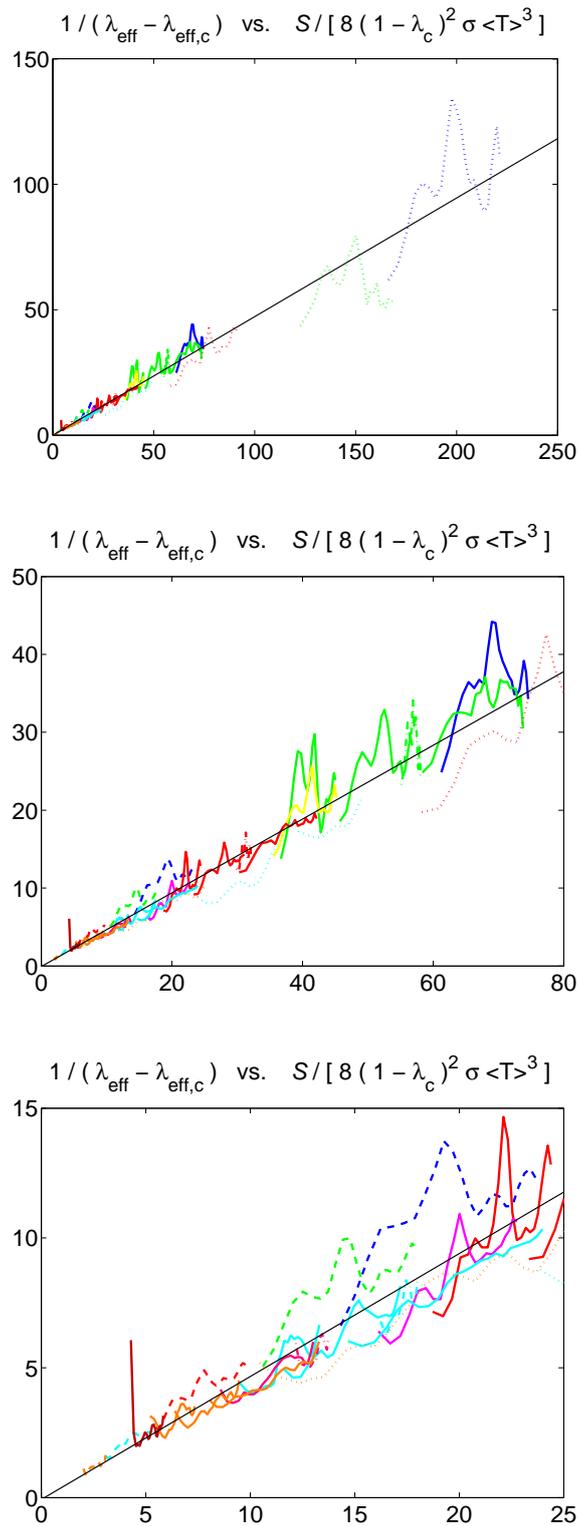
La droite obtenue par un fit linéaire de l'ensemble des données correspond à

$$\frac{1}{\lambda_{eff} - \lambda_{eff,c}} = -0.0698 + 0.4733 \frac{\mathcal{S}}{8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \sigma \bar{T}^3} \quad (12.4)$$

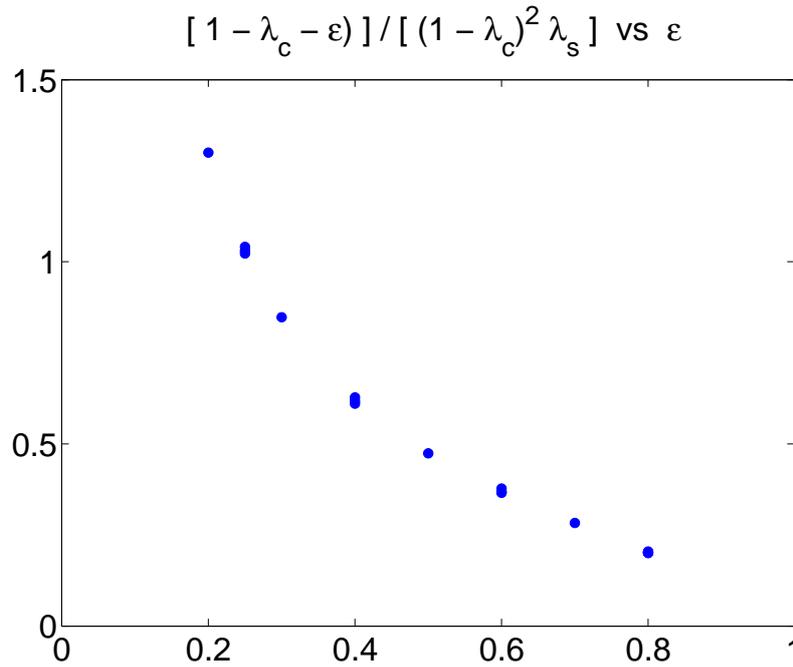
Pour chaque configuration géométrique, on a utilisé les valeurs de  $\mathcal{S}$  et de  $\tilde{\lambda}_c$  données dans les tables 12.1 et 12.2.

Le facteur de forme  $\omega_s = 0.4733$  est légèrement différent de celui obtenu pour l'empilement ( $\approx 0.400$ ), ce qui n'est pas innatendu, puis que les morphologies des deux types de milieux poreux sont très différentes. Il est en revanche remarquable qu'une seule valeur de  $\omega_s$  soit capable de rendre compte de tous les résultats, sur une plage de porosité aussi étendue.

La valeur négative du coefficient constant est plus surprenante, eut égard à sa signification physique, dans le cadre du modèle de la Section 9.4.2. Toutefois, elle est à considérer avec trois idées présentes à l'esprit. En premier lieu, la figure 12.13 montre que si la pente de la droite d'ajustement est parfaitement claire, des fluctuations significatives existent néanmoins, dont l'amplitude excède de très loin la valeur absolue de l'abscisse à l'origine donnée (12.4). D'autre part, la même figure montre qu'en général la contribution du terme constant dans (12.4) est tout à fait mineure. Une incertitude de l'ordre de 1 pour ce terme n'entraînerait que des variations de quelques pourcents de la prédiction (12.4), en dehors de quelques cas où le système est extrêmement chaud, avec des température à la source assez peu réalistes  $T_S > 3000$  K. Pour ces deux raisons, on peut d'un point de vue pratique ignorer le terme constant de (12.4) en le considérant comme nul. Rappelons qu'un constat similaire s'appliquait dans une certaine mesure pour l'empilement, pour des températures ambiantes faibles ou modérées.



**Figure 12.13.**  $1/(\lambda_{\text{eff}} - \lambda_{\text{eff},c})$  en fonction de  $S/[8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \sigma \bar{T}^3]$ , pour toutes les simulations conduites dans les milieux reconstruits. Chaque courbe correspond à un jeu de paramètres  $(\epsilon, l_c, S, T_\infty)$ . Les cadres au milieu et en bas sont des agrandissements successifs du cadre du haut. La droite correspond au fit (12.4).



**Figure 12.14.**  $\frac{1 - \tilde{\lambda}_c - \epsilon}{(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \lambda_s}$  en fonction de la porosité  $\epsilon$  pour les milieux reconstruits, d'après les données des Tables 12.1 et 12.2.

Enfin, on doit aussi considérer que la forme même de la loi (12.4) est peut être défectueuse. Par exemple, le coefficient constant qu'elle fait apparaître devrait d'après (9.18) valoir  $\frac{1 - \tilde{\lambda}_c - \epsilon}{(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \lambda_s}$ . Or, cette quantité est différente pour les divers milieux poreux considérés ici. Sa valeur, estimée d'après les données des tables 12.1 et 12.2, est tracée dans la figure 12.14 en fonction de la porosité. On peut donc envisager deux possibilités.

Il est possible qu'un examen approfondi de données pour différentes valeurs de  $\epsilon$  donne lieu à des fits du type de (9.18) qui différeraient par leurs ordonnées à l'origine, conformément aux prédictions illustrées dans la figure 12.14. C'est un peu douteux dans la mesure la valeur de (12.4) n'appartient pas à la plage de variation observée dans la figure 12.14. En outre, compte tenu des fluctuations non négligeables, cela exigerait l'examen d'un nombre plus important d'échantillons, afin de pouvoir opérer en moyenne statistique. Ceci n'a pas pu être fait dans le cadre de ce travail.

Il est possible également que le modèle sous-jacent à (9.18) ignore une composante. Il repose en effet sur un modèle géométrique alvéolaire, où toute la porosité est fermée, et qui n'autorise donc pas un transfert radiatif sans intermédiaire conducteur. Ceci n'est clairement pas adapté aux milieux les plus poreux parmi ceux que nous considérons ici.

Une extension de ce modèle pourrait donc se révéler plus en conformité avec les observations numériques. Rappelons cependant que d'un point de vue pratique, la prise en compte du seul terme linéaire dans (12.4) est suffisante pour représenter les données avec une précision satisfaisante.

## Conclusion

---

La conclusion de cette troisième partie tient en assez peu de mots, puisqu'il y a essentiellement deux faits marquants à mentionner. Ils sont toutefois d'une très grande importance pratique. On a montré d'une part, par simulation directe dans des situations réalistes, que l'approximation de Rosseland est effectivement applicable si l'on est suffisamment éloigné de parois. Les transferts radiatifs se traduisent donc dans ce cas par un accroissement de conductivité thermique effective. Le second fait marquant est la possibilité de regrouper une quantité considérable de données de simulation, pour une grande variété de situations géométriques et de paramètres opératoires, en une formule d'une grande simplicité,

$$\lambda_{eff} \approx \lambda_{eff,c} + \frac{8(1 - \tilde{\lambda}_c)^2 \sigma \bar{T}^3}{\omega_s \mathcal{S}} \quad (12.5)$$

si l'on fait abstraction du terme constant dans (11.2) ou (12.4), dont l'importance est minimale en dehors des plages de températures extrêmement élevées.

Cette formule ne fait intervenir que la température moyenne locale  $\bar{T}$ , et des caractéristiques intrinsèques du milieu poreux, de nature géométrique : le coefficient de conductivité  $\tilde{\lambda}_c$ , la surface volumique  $\mathcal{S}$ , et un facteur de forme  $\omega_s$ . Ce dernier dépend *a priori* de la morphologie de la microstructure, mais une valeur unique s'applique pour tous les milieux reconstruits sur une très grande plage de porosité, et une valeur peu différente s'applique pour le milieu granulaire.

Nous avons ainsi la réponse à la question initialement posée. Les échanges radiatifs peuvent effectivement avoir une influence considérable dans le processus de smoldering considéré, et (12.5) fournit un moyen de les inclure de façon simple dans une description macroscopique. Le deuxième élément de la réponse a d'ailleurs une portée plus générale et peut s'avérer très utile dans beaucoup d'autres situations.

Il serait bien sûr intéressant d'approfondir l'étude numérique et d'enrichir l'échantillon statistique de milieux considérés, pour cataloguer les facteurs de forme  $\omega_s$  de la plus grande variété possible de microstructures, et également pour mieux élucider la forme du coefficient constant dans (11.2) ou (12.4) qui est ignoré dans (12.5). Ceci peut avoir son importance pour des applications à très haute température. Pour celà, il sera sans doute nécessaire d'enrichir un peu le modèle conceptuel de la Section 9.4.2 et donc de modifier la forme de (9.18).

Un point important a été laissé de côté dans les applications qui précèdent, concernant les conditions de raccord entre les parois (du four ou de la source de chaleur) et le milieu poreux. On a vu que le rayonnement améliore considérablement le contact thermique, avec une influence sur la capacité du dispositif à évacuer la chaleur potentiellement aussi significative que celle de l'augmentation de conductivité apparente dans le volume du milieu poreux. Le même mécanisme a d'ailleurs un autre effet très important dans le processus de smoldering, qui est de régulariser fortement le champ de température, de lisser les points chauds et de ramener le système vers des conditions plus proches de l'équilibre thermique local.

Toutefois, cet aspect dépend très fortement de caractéristiques géométriques locales, qui peuvent être singulières dans le cas d'un milieu granulaire, et une investigation sérieuse devra nécessairement reposer sur une étude statistique de grande ampleur. Elle n'a pas été conduite ici, mais constitue un prolongement souhaitable et naturel du présent travail.

# Références

---

- Adler P.M., 1992. Porous Media : Geometry and Transports, *Butterworth/ Heinemann*, Stoneham, MA.
- Adler P.M., Jacquin C.G. et Quiblier J.A., 1990. Flow in simulated porous media ; *Int. J. Multiphase Flow*, **16**, 691-712.
- Argento C., D. Bouvard, 1996. A ray tracing method for evaluating the radiative heat transfer in porous media, *Journal of Heat Transfer*, **39**, 3175-3180.
- Apersyan L.A., Yu.A. Kravtsov, 1996. Radiation transfer. Statistical and wave aspects. *Gordon and Breach Science Publishers*, Amsterdam.
- Born M., B.J. Wolf, 1986. Principles of optics : Electromagnetic theory of the propagation ,interference and diffraction of light, 6th edn, *Pergamon Press*.
- Boulet P., 1992. Etude des Transferts par rayonnement à travers les milieux fibreux, Thèse de Doctorat de l'Université de Lyon.
- Carcione J.M., 2007. Wave Fields in Real Media : Wave propagation in anisotropic, anelastic, porous and electromagnetic media 2nd ed., *Elsevier*, Amsterdam.
- Chandrasekhar S., 1960. Radiation transfer, *Dover*.
- Chalopin E., 2008. Radiative properties of a porous medium- application to the radiative transfer calculation in a Pressurized Water Nuclear Reactor core, Thèse Ecole Doctorale Sciences de l'Ingénieur Ecole Centrale Paris.
- Chang P.C.Y., J.G. Walkera, K.I. Hopcraft, 2005. Ray tracing in absorbing media, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **96**, 327-41.
- Coelho D., 1996. Génération, géométrie et propriétés de Transport de milieux granulaires, Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers.
- Coelho D., J.-F. Thovert, P.M. Adler, 1997 Geometrical and transport properties of random packings of spheres and aspherical particles *Phys. Rev. E*, **55**, 1959-1978.
- Coquard R., D. Baillis, 2004. Radiative characteristics of the opaque Spherical Particles beds : A new Method of prediction, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, **18**, 178-186.
- Coquard R., D. Baillis, 2006. Modeling of heat transfer in low-density EPS foams, *J. Heat Transf.*, **128**, 538-549.
- Coquard R., D. Baillis, D. Quenard, 2008. Experimental and theoretical study of the hot-ring method applied to low-density thermal insulators, *Int. J. Thermal Sci.*, **47**, 324-338.
- Dan B., F. XuJi, 2007. On the combined heat transfer in the multilayer non-gray porous fibrous insulation, *Journal Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*.
- Debenest G., 2003. Simulation numérique tridimensionnelle, à la microéchelle, de la combustion en lit fixe de schistes bitumineux, Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers.
- Debenest G., V.V. Mourzenko, J.-F. Thovert, 2005a. Smoldering in fixed beds of oil shale grains. A three-dimensional microscale numerical model, *Combust. Theory Modelling*, **9**, 113-135.

- Debenest G., V.V. Mourzenko, J.-F. Thovert, 2005b. Smoldering in fixed beds of oil shale grains. Governing parameters and global regimes, *Combust. Theory Modelling*, **9**, 301-321.
- Del Coz Diaz J.J. et al., 2008. Non-linear thermal optimization and design improvement of a new internal light concrete multi-holed brick walls by FEM *Journal Applied Thermal Engineering*, **28**, 1090-1100.
- Dupertuis M.A., M. Proctor, B. Acklin, 1994. Generalization of complex Snell-Descartes and Fresnel laws, *J. Opt. Soc. Am. A*, **11**, pp. 1159-1166.
- Elayeb M., 2008. Modélisation à l'échelle microscopique de transport avec réaction, Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers (en cours)
- Hackert C.L., J.L. Ellzey, O.A. EZEKOYE, 1998. Combustion and heat transfer in model two dimensional porous Burners, *Journal of Departement of Mechanical Eneginering The University of Texas USA*.
- Heaslet M.A., R.F Warming, 1965. Radiative Transport and wall temperature slip in an absorbing planar medium, *Int. J. of Heat and Masse Transfer*, **8**, 979-994.
- Hecht E., 1987. Optics, 2nd edn, *Addison and Wesly Publishing Company*.
- Hering A., 1947. Refraction of plane non-uniform electromagnetic waves between absorbing media, *Phys. Rev.*, **72**, pp. 232-235.
- Jhy-When W., C. Hsien-Sen, 1999. Combiend Conduction and radiation heat transfer in plane-parallel packed bed with variable porosity, *Journal Quant Spectrosc Radiation Heat Transfer*, **4**, 443-452.
- Kamiuto K., S.S. Yee, 2005. Correlated radiative transfer through a packed bed of opaque spheres, *Journal Heat and Mass Transfer*, **32**, 133-139.
- Kamiuto et al, 1993. Correlated radiative transfer through a packed bed of opaque spheres, *Inetrnational Communication in Heat and Mass Transfer*, **43**, 133-139 .
- Loretz M., R. Coquard, D. Baillis, E. Maire, 2008. Metallic foams : Radiative properties comparison between different models, *JQRST*, **109**, pp. 16-27.
- Mahan J.R., 2002. Radiation heat Transfer A statistical approach, *Willy*.
- Martins F.M., J. Salvador, 2008. Thermochemical characterization of a combustion front propagation in reactive porous medium : A new experimental device, *rapport ACI*.
- Metropolis N., S. Ulam, 1949. The Monte Carlo method, *Journal of the American Statotical Aasso*, **44**, 335-341.
- Mihalas D., B.W. Mihalas, 1984. Foundations of Radiation Hydrodynamics. *Oxford University Press*, New York.
- Modest M.F., 2003. Radiative Heat Transfer second edition, *Acedemic Press An imprint of Elsevier Science*.
- Muresan C., 2005. Etude des transferts thermiques rayonnements spectral-Conductio-Convection naturelle, Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers.
- Oliveira A.A.M., M. Kaviany, 2001. Nonequilibrium in the transport of heat and reactants in combustion in porous media, *Progress in Energy and Combustion Sciences*, **27**, 523-545.
- Ozisik M.N., 1973. Radiative Transfer and interaction with conduction and convection, *New, York, Edition Wiley*.
- Pincherle L., 1947. Refraction of plane non-uniform electromagnetic waves between absorbing media, *Phys. Rev.*, **72**, pp. 232-235.
- Pomraning G.C., 1973. The equations of radiation hydrodynamics. *Pergamon Press, Oxford*.
- Randrianalisoa J., D. Baillis, 2004. Independant and dependent scattering for semitransparent

- media containing bubbles, *Proceeding of IMECE 2004, ASME International Mechanical Engineering Congress*.
- Reif F., 1965. Fundamentals of statistical and thermal physics, *McGraw-Hill, New York*.
- Rosseland S., 1936. Theoretical Astrophysics; Atomic theory and the Analysis of Stellar Atmospheres and Envelops, *Clarendon Press*.
- Rothwell E. J., M.J. Cloud, 2001. Electromagnetics, *CRC Press, Boca Raton*
- Rousseau B., D. De Sousa Meneses, P. Echegut, M. Di Michiel M. et J.-F. Thovert, 2007. Prediction of the thermal radiative properties of an x-ray tomographed porous silica glass, *Appl. Optics*, **46**, 4266-4276.
- Rousseau B., 2007. Communication privée.
- Rubiolo P., J.M. Gatt, 2002. Modelling of the radiative contribution to heat transfer in porous media composed of spheres or cylinders, *Journal International of Thermal Sciences* , **41**, 401-411.
- Sanchez-Palencia E., 1980. Non-homogeneous media and vibration theory, *Springer Verlag, Berlin*
- Schult D.A., B.J. Matkowsky, V.A. Volpert, A.C. Fernandez-Pello, 1995. Propagation and extinction of forced opposed flow smolder waves, *Combust. Flame*, **101**, 471-490.
- Singh B.P., et M.Kaviani, 1991, Modelling radiative heat transfer in packed beds *Journal of Heat Transfer* , **35**, 1397-1405.
- Singh B.P., M. Kaviani, 1992. Modelling radiative heat transfer in packed beds, *International Journal of Heat and Mass Transfer* , **35**, 1397-1405.
- Singh B.P., M. KAVIANY, 1994. Effect of solid conductivity on radiative heat transfer in packed beds, *Journal Heat Transfer* , **37**, 2579-2583.
- Siegel R., C.M Spuckler, 1992. Effects of index of refraction on a radiation characteristics in a heated absorbing, emitting and scatter layer, *Journal of Heat and Transfer*, **114**, 301-321.
- Siegel R., J.R. Howell, 1992. Thermal radiation heat transfer (3eme edition), *Mc Graw-Hill New Work*.
- Sommerfeld A., 1954. Lectures on Theoretical Physics, v. 4 : Optics. *Academic Press, London*.
- Stratton J.A., 1941. Electromagnetic theory, *McGraw-Hill, New York*.
- Tancrez M. et J. Taine, 2003. 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*, **47**, 373-383.
- Tancrez M., 2002. Modélisation du rayonnement et transferts couplés dans des milieux poreux réactifs : Applications aux brûleurs radiants à gaz, Thèse de doctorat Ecole Centrale de Paris Laboratoire d'Energie Moléculaire et Macroscopique.
- Viskanta R., M.P. Mengüç, 1989. Radiative transfer in dispersed media, *Appl. Mech. Rev.*, **42**, 241 - 259.
- Thovert J.-F., F. Wary et P.M. Adler, 1990. Thermal conductivity of random media and regular fractals, *J. Appl. Phys.*, **68**, 3872-3883.
- Whale C.W. and B.J. Matkowsky, 2001. Rapid, upward buoyant filtration combustion waves driven by convection, *Combustion and Flames*, **124**, 14-34.

# Appendix A

---

## Appendice au Chapitre 8

### A.1 Une onde incidente à partir d'un milieu non absorbant

Dans le cas de la propagation d'une onde homogène provienne à partir d'un milieu non absorbant ( $k_1 = 0$ ) dans un milieu absorbant toutes les formules sont réduites à des relations connues.

Comme il découle des équations (8.19-8.20) pour des ondes homogènes ( $\alpha = 0$ ) dans le premier milieu  $K_1 = 0, N_1 = n_1$ . A partir de (8.51-8.52) on peut obtenir

$$\begin{aligned}(N_2 \cos \theta_2)^2 &= \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2 + k_2^2)^2 + 4n_2^2 k_2^2} - n_1^2 \sin^2 \theta_1 + n_2^2 - k_2^2 \right] \\ (K_2 \cos \psi_2)^2 &= \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2 + k_2^2)^2 + 4n_2^2 k_2^2} + n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2 + k_2^2 \right]\end{aligned}$$

et à partir de l'équation (8.46) l'angle de réfraction

$$\sin \theta_2 = \frac{n_1 \sin \theta_1}{\sqrt{(N_2 \cos \theta_2)^2 + n_1^2 \sin^2 \theta_1}} \quad (\text{A.1})$$

Ces expressions sont les mêmes comme celle qui ont été donnée par (57) et (60) dans Stratton (1941) avec des notations

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{\omega}{c} n_2, & \alpha_2 &= \frac{\omega}{c} n_1, & \beta_1 &= \frac{\omega}{c} k_2, & \theta_0 &= \theta_1, & \psi &= \theta_2 \\ q &= \frac{\omega}{c} N_2 \cos \theta_2, & p &= \frac{\omega}{c} K_2 \cos \psi_2\end{aligned}$$

La réflectivité  $R_{PE}$  pour PE-onde (Eq. 8.94) peut être réécrite comme

$$R_{PE} = \frac{(\mu_2 n_1 \cos \theta_1 - \mu_1 N_2 \cos \theta_2)^2 + (\mu_1 K_2 \cos \psi_2)^2}{(\mu_2 n_1 \cos \theta_1 + \mu_1 N_2 \cos \theta_2)^2 + (\mu_1 K_2 \cos \psi_2)^2} \quad (\text{A.2})$$

qui est de la même expression comme celle pour  $\rho_{\perp}^2$  in Eq. (74) dans la page p.505 du Stratton (1941) (on note que les indices "1" and "2" sont inversés ici par rapport au livre).

La réflectivité  $R_{PM}$  pour PM-onde (Eq. 8.107) est

$$R_{PM} = \frac{[\mu_1 \cos \theta_1 (n_2^2 - k_2^2) - \mu_2 n_1 N_2 \cos \theta_2]^2 + [2\mu_1 n_2 k_2 \cos \theta_1 - \mu_2 n_1 K_2 \cos \psi_2]^2}{[\mu_1 \cos \theta_1 (n_2^2 - k_2^2) + \mu_2 n_1 N_2 \cos \theta_2]^2 + [2\mu_1 n_2 k_2 \cos \theta_1 + \mu_2 n_1 K_2 \cos \psi_2]^2} \quad (\text{A.3})$$

qui correspond à la formule pour  $\rho_{\parallel}^2$  dans Eq. (77) on p.506 de Stratton (1941).

Dans les deux cas l'intensité de l'interférence  $I = 0$  and  $T = 1 - R$ .

Quand le deuxième milieu est non absorbant ( $k_2 = 0$ ) et les deux perméabilités du deux matériaux ne diffèrent pas  $\mu_1 = \mu_2$  les relations correspondantes deviennent plus simples

$$(N_2 \cos \theta_2)^2 = n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_1, \quad N_2 = n_2, \quad K_2 = 0 \sin \theta_2 = \frac{\sin \theta_1}{n_{12}}, \quad n_{12} = \frac{n_2}{n_1} \quad (\text{A.4a})$$

$$R_{PE} = \frac{(\cos \theta_1 - n_{12} \cos \theta_2)^2}{(\cos \theta_1 + n_{12} \cos \theta_2)^2} = \frac{\sin^2(\theta_1 - \theta_2)}{\sin^2(\theta_1 + \theta_2)} \quad (\text{A.4b})$$

$$R_{PM} = \frac{(n_{12} \cos \theta_1 - \cos \theta_2)^2}{(n_{12} \cos \theta_1 + \cos \theta_2)^2} = \frac{(\sin \theta_1 \cos \theta_1 - \cos \theta_2 \sin \theta_2)^2}{(\sin \theta_1 \cos \theta_1 + \cos \theta_2 \sin \theta_2)^2} = \frac{\tan^2(\theta_1 - \theta_2)}{\tan^2(\theta_1 + \theta_2)} \quad (\text{A.4c})$$

Dans le dernier cas l'identité trigonométrique  $\sin(\theta_1 + \theta_2) \cos(\theta_1 - \theta_2) = \sin \theta_1 \cos \theta_1 + \cos \theta_2 \sin \theta_2$  est utilisé.

## A.2 La vérification du bilan de l'énergie

### A.2.1 Ondes polarisées en PE-mode

L'énergie du bilan exprimée sous la forme (8.95) peut être vérifié par une substitution directe des formules de Fresnel. En effet, quand

$$\begin{aligned} |r_{PE}|^2 &= (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2)^* H \\ 2i\Im(r_{PE}) &= r_{PE} - r_{PE}^* = (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2)^* H - \\ &\quad (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 - \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2)^* (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2) H = \\ &\quad 2H [(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2)^* - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1)^*] \\ |t_{PE}|^2 &= (2\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1) (2\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1)^* H \\ H^{-1} &= (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1 / \mu_1 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2 / \mu_2)^* \end{aligned}$$

sont substituées dans (8.94), (8.96), on peut réécrire la partie gauche de l'équation (8.95) comme

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^* H}{\mu_1^2} \left[ 1 + \frac{4N_2 \cos \theta_2 \mu_1}{N_1 \cos \theta_1 \mu_2} \right] + \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)^* H}{\mu_1 \mu_2} \left[ -1 - \frac{2K_1 \cos \psi_1}{iN_1 \cos \theta_1} \right] + \\ \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^* H}{\mu_2 \mu_1} \left[ -1 + \frac{2K_1 \cos \psi_1}{iN_1 \cos \theta_1} \right] + \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)^* H}{\mu_2^2} \end{aligned}$$

Réécrivant les deux multiplicateurs comme

$$\begin{aligned}
 -1 - \frac{2K_1 \cos \psi_1}{iN_1 \cos \theta_1} &= 1 - 2 + \frac{2iK_1 \cos \psi_1}{N_1 \cos \theta_1} = 1 - \frac{2(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^*}{N_1 \cos \theta_1} \\
 -1 + \frac{2K_1 \cos \psi_1}{iN_1 \cos \theta_1} &= 1 - 2 - \frac{2iK_1 \cos \psi_1}{N_1 \cos \theta_1} = 1 - \frac{2(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)}{N_1 \cos \theta_1}
 \end{aligned}$$

on peut regrouper les termes

$$\begin{aligned}
 &\left[ \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^*}{\mu_1^2} + \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)^*}{\mu_1 \mu_2} + \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^*}{\mu_2 \mu_1} + \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)^*}{\mu_2^2} \right] H + \\
 &\left[ \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^* H}{\mu_1^2} \cdot \frac{2N_2 \cos \theta_2 \mu_1}{N_1 \cos \theta_1 \mu_2} - \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)^* H}{\mu_1 \mu_2} \cdot \frac{2(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^*}{N_1 \cos \theta_1} \right] + \\
 &\left[ \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^* H}{\mu_1^2} \cdot \frac{2N_2 \cos \theta_2 \mu_1}{N_1 \cos \theta_1 \mu_2} - \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)^* H}{\mu_2 \mu_1} \cdot \frac{2(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)}{N_1 \cos \theta_1} \right]
 \end{aligned}$$

Le premier terme est exactement 1. Le second terme est

$$\frac{2H|(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)|^2}{N_1 \cos \theta_1 \mu_1 \mu_2} [N_2 \cos \theta_2 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)^*] = \frac{2iH|(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)|^2 K_2 \cos \psi_2}{N_1 \cos \theta_1 \mu_1 \mu_2}$$

et le troisième terme est

$$\frac{2H|(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)|^2}{N_1 \cos \theta_1 \mu_1 \mu_2} [N_2 \cos \theta_2 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_2)] = -\frac{2iH|(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_1)|^2 K_2 \cos \psi_2}{N_1 \cos \theta_1 \mu_1 \mu_2}$$

alors les deux derniers anéantir un de l'autre et l'équation de bilan (8.95) est prouvée.

### A.2.2 Ondes polarisées en PM-mode

Dans le but de vérifier la validité le bilan d'énergie (8.95) la réflectivité et la transmittivité pour un PM-ondes données par (8.75-8.76) sont réécrite dans la forme suivante

$$r_{PM} = \frac{Z_1 - Z_2}{Z_1 + Z_2}, \quad t_{PM} = \frac{2Z_1}{Z_1 + Z_2}, \quad Z_\alpha = \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{P}_\alpha) \mu_\alpha}{\tilde{n}_\alpha^2}, \quad \alpha = 1, 2 \quad (\text{A.5})$$

so

$$\begin{aligned}
 |r_{PM}|^2 &= H(Z_1 - Z_2)(Z_1 - Z_2)^*, \quad |t_{PM}|^2 = H(2Z_1)(2Z_1)^* \quad (\text{A.6}) \\
 2i\Im(r_{PM}) &= r_{PM} - r_{PM}^* = H(Z_1 - Z_2)(Z_1 + Z_2)^* - \\
 &\quad H(Z_1 - Z_2)^*(Z_1 + Z_2) = 2H(Z_1 Z_2^* - Z_1^* Z_2) \\
 H^{-1} &= (Z_1 + Z_2)(Z_1 + Z_2)^*
 \end{aligned}$$

En remplaçant (8.107), (A.6) dans la partie gauche du coté de l'équation (8.95) on obtient

$$H|Z_1|^2 \left( 1 + 4 \frac{A_2}{A_1} \right) + HZ_1 Z_2^* \left( -1 - 2 \frac{B_1}{iA_1} \right) + HZ_2 Z_1^* \left( -1 + 2 \frac{B_1}{iA_1} \right) + H|Z_2|^2 \quad (\text{A.7})$$

et en regroupant les termes (A.7)

$$\begin{aligned}
 & H (|Z_1|^2 + Z_1 Z_2^* + Z_2 Z_1^* + |Z_2|^2) + \\
 & 2H \left[ |Z_1|^2 \frac{A_2}{A_1} - Z_1 Z_2^* \left( 1 - \frac{iB_1}{A_1} \right) \right] + \\
 & 2H \left[ |Z_1|^2 \frac{A_2}{A_1} - Z_1^* Z_2 \left( 1 + \frac{iB_1}{A_1} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

Le premier terme est exactement 1. En comparant (8.105) et (A.5) on peut réécrire  $Z_\alpha$  comme  $A_\alpha + iB_\alpha$  et obtenir pour le deuxième terme de (A.8)

$$2H \frac{|Z_1|^2}{A_1} (A_2 - Z_2^*) = 2H \frac{|Z_1|^2}{A_1} iB_2 \tag{A.9}$$

et pour le terme dernier

$$2H \frac{|Z_1|^2}{A_1} (A_2 - Z_2) = -2H \frac{|Z_1|^2}{A_1} iB_2 \tag{A.10}$$

donc l'équation du bilan (8.95) est aussi prouvée pour une onde polarisée en PM-mode.

### A.3 Procédure d'évaluation des paramètres de transmission et les ondes réfléchies

Voici un résumé de la procédure d'évaluation des paramètres des ondes de transmission et des ondes réfléchies en vue d'une possible application dans le modèle numérique.

On considère une onde non homogènes arrivant d'un milieu 1 et rencontrant une interface qui sépare avec un autre milieu 2. Pour une simplification il est supposé que  $\mu_1 = \mu_2$ , mais ce n'est pas obligatoire.

- (i) Les deux milieux sont décrits par leurs indices de réfraction  $n_1, k_1, n_2, k_2$ , et  $\mathbf{s}$  est la normale à l'interface dirigée du milieu 1 au milieu 2.
- (ii) L'onde est caractérisée par ses deux vecteurs directionnelles,  $\mathbf{e}$  - pour la phase de propagation, et  $\mathbf{f}$  - les plans d'amplitudes constants. On note que  $\cos \alpha = \mathbf{e} \cdot \mathbf{f} \geq 0$ . Les angles d'incidence sont  $\cos \theta_1 = \mathbf{e} \cdot \mathbf{s}$  et  $\cos \psi_1 = \mathbf{f} \cdot \mathbf{s}$ .
- (iii) Le calcul des indices effectives  $N_1$  et  $K_1$  pour l'onde incident en utilisant (8.19-8.20).
- (iv) Le calcul des combinaisons  $N_2 \sin \theta_2$ ,  $K_2 \sin \psi_2$ ,  $(N_2 \cos \theta_2)^2$ ,  $(K_2 \cos \psi_2)^2$  à partir des équations (8.46-8.49, 8.51-8.52 et 8.35).
- (v) Par l'utilisation de cette combinaison on calcule  $N_2, K_2, \sin \theta_2$ , and  $\sin \psi_2$ .
- (vi) Les signes  $\cos \theta_2$  et  $\cos \psi_2$  sont évaluées séparément pour PE-mode et PM-mode polarization de l'onde.

Pour PE-wave : on utilise (8.108–8.110) ;

For PM-wave :

(a) on calcule  $\text{sign}(G)$  à partir (8.47)

(b) on calcule la combinaison

$$M = N_2 |\cos \theta_2| (n_2^2 - k_2^2) + 2 \text{sign}(G) n_2 k_2 K_2 |\cos \psi_2| \quad (\text{A.11})$$

(c) on assigne  $\text{sign}(\cos \theta_2) = \text{sign}(M)$  et  $\text{sign}(\cos \psi_2) = \text{sign}(G) \cdot \text{sign}(\cos \theta_2)$

(vii) Les transmittivités de deux ondes :

$$T_{PE} = \frac{4N_2 \cos \theta_2}{N_1 \cos \theta_1} \cdot \frac{(N_1 \cos \theta_1)^2 + (K_1 \cos \psi_1)^2}{(N_2 \cos \theta_2 + N_1 \cos \theta_1)^2 + (K_2 \cos \psi_2 + K_1 \cos \psi_1)^2} \quad (\text{A.12a})$$

$$T_{PM} = \frac{4A_2}{A_1} \cdot \frac{A_1^2 + B_1^2}{(A_1 + A_2)^2 + (B_1 + B_2)^2} \quad (\text{A.12b})$$

avec  $A_\alpha, B_\alpha$  définies dans (8.105). On note que le cosinus dans les transmittivités devrait avoir le signe obtenu pour les modes de polarisations correspondantes selon item (vi).

(viii) La réflectivité "effective" est évaluée comme étant

$$R_{eff} = 1 - \frac{1}{2}(T_{PE} + T_{PM}) \quad (\text{A.13})$$

## A.4 La réflectivité et l'intensité des interférences

### A.4.1 La polarisation PE

En substituant l'expression (8.73) pour  $r_{PE}$  dans Eq. (8.94) on peut obtenir la prochaine formule pour le coefficient de réflexion

$$R_{PE} = \frac{(N_2 \cos \theta_2 - N_1 \cos \theta_1)^2 + (K_2 \cos \psi_2 - K_1 \cos \psi_1)^2}{(N_2 \cos \theta_2 + N_1 \cos \theta_1)^2 + (K_2 \cos \psi_2 + K_1 \cos \psi_1)^2} \quad (\text{A.14})$$

D'une manière similaire en substituant (8.73) dans l'équation (8.96) on obtient l'expression de l'intensité de l'interférence

$$I_{PE} = \frac{4K_1 \cos \psi_1}{N_1 \cos \theta_1} \cdot \frac{N_1 K_2 \cos \theta_1 \cos \psi_2 - N_2 K_1 \cos \theta_2 \cos \psi_1}{(N_2 \cos \theta_2 + N_1 \cos \theta_1)^2 + (K_2 \cos \psi_2 + K_1 \cos \psi_1)^2} \quad (\text{A.15})$$

### A.4.2 La polarisation PM

En substituant de l'expression (8.75) pour  $r_{PM}$  dans Eq. (8.107) et en prenant en compte (8.105) on peut obtenir les expressions suivantes

$$R_{PM} = \frac{(A_1 - A_2)^2 + (B_1 - B_2)^2}{(A_1 + A_2)^2 + (B_1 + B_2)^2} \quad (\text{A.16})$$

$$I_{PM} = \frac{4B_1}{A_1} \cdot \frac{A_1 B_2 - A_2 B_1}{(A_1 + A_2)^2 + (B_1 + B_2)^2} \quad (\text{A.17})$$

## A.5 Les relations entre deux systèmes d'angles

Rappelons que  $\theta$  et  $\psi$  sont les angles entre deux vecteurs  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{s}$ ,  $\mathbf{f}$  et  $\mathbf{s}$ , et  $\gamma$  est l'angle entre  $\mathbf{e} \times \mathbf{s}$  et  $\mathbf{f} \times \mathbf{s}$ . L'angle  $\alpha$  entre les vecteurs  $\mathbf{e}$  et  $\mathbf{f}$  est donnée par Eq. (8.35). Quand  $\alpha$  et  $\beta$  sont données, les angles  $\psi$  and  $\gamma$  peuvent être trouvés à partir

$$\cos \psi = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos \beta \quad (\text{A.18})$$

$$\cos \gamma \sin \psi = \sin \theta \cos \alpha - \cos \theta \sin \alpha \cos \beta \quad (\text{A.19})$$

et l'expression qui s'ensuit à partir de ces deux :

$$\sin \gamma \sin \psi = \sin \alpha \sin \beta \quad (\text{A.20})$$

Le Jacobien de la transformation à partir de pair de variables  $(\psi, \gamma)$  vers  $(\alpha, \beta)$  peut être obtenu par la différenciation des équations. (A.18), (A.20)

$$-\psi_\alpha \sin \psi = -\cos \theta \sin \alpha + \sin \theta \cos \alpha \cos \beta \quad (\text{A.21})$$

$$-\psi_\beta \sin \psi = -\sin \theta \sin \alpha \sin \beta \quad (\text{A.22})$$

$$\gamma_\alpha \cos \gamma \sin \psi + \psi_\alpha \sin \gamma \cos \psi = \cos \alpha \sin \beta \quad (\text{A.23})$$

$$\gamma_\beta \cos \gamma \sin \psi + \psi_\beta \sin \gamma \cos \psi = \sin \alpha \cos \beta \quad (\text{A.24})$$

En multipliant (A.23) par  $\psi_\beta \sin \psi$ , (A.24) par  $\psi_\alpha \sin \psi$  et soustrayant le dernier du premier, on peut obtenir

$$\cos \gamma \sin^2 \psi (\gamma_\alpha \psi_\beta - \gamma_\beta \psi_\alpha) = \psi_\beta \cos \alpha \sin \beta \sin \psi - \psi_\alpha \sin \alpha \cos \beta \sin \psi \quad (\text{A.25})$$

Une substitution de (A.21–A.22) donne

$$\cos \gamma \sin^2 \psi \frac{D(\gamma, \psi)}{D(\alpha, \beta)} = \quad (\text{A.26})$$

$$\cos \alpha \sin \beta \cdot \sin \theta \sin \alpha \sin \beta - \sin \alpha \cos \beta \cdot (\cos \theta \sin \alpha - \sin \theta \cos \alpha \cos \beta)$$

$$\frac{D(\gamma, \psi)}{D(\alpha, \beta)} \equiv (\gamma_\alpha \psi_\beta - \gamma_\beta \psi_\alpha)$$

Le coté droit de (A.26) est

$$\cos \alpha \sin \theta \sin \alpha - \sin^2 \alpha \cos \beta \cos \theta \quad (\text{A.27})$$

et selon (A.19) est

$$\sin \alpha \cos \gamma \sin \psi \quad (\text{A.28})$$

le Jacobian est

$$\frac{D(\gamma, \psi)}{D(\alpha, \beta)} = \frac{\sin \alpha}{\sin \psi} \quad (\text{A.29})$$

qui donne la relation pour un élément de la sphère unité autour du vecteur  $\mathbf{e}$  parcouru par le vecteur  $\mathbf{f}$  décrite par ces deux paires des variables

$$\sin \psi d\psi d\gamma = \sin \alpha d\alpha d\beta \quad (\text{A.30})$$

## A.6 Le vecteur de Poynting

Dans le cas d'une onde incidente avec une polarisation en PE-mode le vecteur de Poynting correspondant est donnée par l'équation (8.82). En substituant  $\mathbf{h}_1$  à partir de (8.57) donne

$$\frac{|E_{PE1}|^2}{2\omega\mu_1 Z} [\mathbf{P}_1^* |\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1|^2 - (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1^*) \{\mathbf{P}_1^* \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1)\}] \quad (\text{A.31})$$

$$Z = \left| \sqrt{(\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1) \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1)} \right|^2$$

Le dernier terme dans (A.31) est

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_1^* \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1) &= P_0^2 [iN_1 K_1 (\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{f}_1)) - iK_1 N_1 (\mathbf{f}_1 \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{e}_1))] = \\ &= 2iP_0^2 N_1 K_1 [\mathbf{s} \cdot (\mathbf{f}_1 \times \mathbf{e}_1)] = 2iP_0^2 N_1 K_1 \sin \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma \end{aligned}$$

où

$$\mathbf{s} \cdot (\mathbf{f}_1 \times \mathbf{e}_1) = \sin \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma \quad (\text{A.32})$$

est utilisée. En utilisant

$$\begin{aligned} \mathbf{s} \times \mathbf{P}_1 &= P_0 N_1 \mathbf{s} \times \mathbf{e}_1 + iP_0 K_1 \mathbf{s} \times \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{s} \times \mathbf{P}_1^* &= P_0 N_1 \mathbf{s} \times \mathbf{e}_1 - iP_0 K_1 \mathbf{s} \times \mathbf{f}_1 \\ |\mathbf{s} \times \mathbf{P}_1|^2 &= P_0^2 N_1^2 \sin^2 \theta_1 + P_0^2 K_1^2 \sin^2 \psi_1 \end{aligned}$$

on peut écrire la partie réelle de l'expression dans les crochets de (A.31) comme étant

$$P_0^3 N_1 [(N_1^2 \sin^2 \theta_1 + K_1^2 \sin^2 \psi_1) \mathbf{e}_1 - 2K_1^2 \sin \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma \cdot \mathbf{s} \times \mathbf{f}_1] \quad (\text{A.33})$$

La longueur de cette vecteur est

$$P_0^3 N_1 \sqrt{(N_1^2 \sin^2 \theta_1 + K_1^2 \sin^2 \psi_1)^2 - (2K_1 N_1 \sin^2 \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma)^2} \quad (\text{A.34})$$

A partir de (A.33) on peut exprimer l'angle  $\varphi$  entre ce vecteur et la normale  $\mathbf{s}$

$$\begin{aligned} \cos \varphi_1 &= \frac{(N_1^2 \sin^2 \theta_1 + K_1^2 \sin^2 \psi_1) \cos \theta_1}{\sqrt{(N_1^2 \sin^2 \theta_1 + K_1^2 \sin^2 \psi_1)^2 - (2K_1 N_1 \sin^2 \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma)^2}} \quad (\text{A.35}) \\ \sin \varphi_1 &= \frac{\sqrt{(N_1^2 \sin^2 \theta_1 + K_1^2 \sin^2 \psi_1)^2 - (2K_1 N_1 \sin^2 \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma)^2}}{\sqrt{(N_1^2 \sin^2 \theta_1 + K_1^2 \sin^2 \psi_1)^2 - (2K_1 N_1 \sin^2 \theta_1 \sin \psi_1 \sin \gamma)^2}} \sin \theta_1 \end{aligned}$$