



**HAL**  
open science

# Diffusion de la lumière par un objet irrégulier pour l'application à l'imagerie des sprays

Yijia Yuan

► **To cite this version:**

Yijia Yuan. Diffusion de la lumière par un objet irrégulier pour l'application à l'imagerie des sprays. Optique [physics.optics]. Université de Rouen Normandie, 2012. Français. NNT : 2012ROUES044 . tel-04050462

**HAL Id: tel-04050462**

**<https://hal.science/tel-04050462>**

Submitted on 29 Mar 2023

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

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

Copyright

# THESE

présentée

A LA FACULTE DES SCIENCES DE L'UNIVERSITE DE ROUEN

en vue de l'obtention du Doctorat

Discipline : Physique

Spécialité : Energétique

par

**Yijia YUAN**

## **Diffusion de la lumière par un objet irrégulier pour l'application à l'imagerie des sprays**

Soutenue le 29 Mars 2012

### **Directeurs de thèse**

Professeur **Kuan Fang REN**

CNRS UMR 6614 – CORIA

Université de Rouen

Professeur **Claude ROZÉ**

CNRS UMR 6614 – CORIA

Université de Rouen

### **Membres du jury**

Rapporteurs

**Fabrice ONOFRI**

Directeur de recherche au CNRS, UMR 7343 - IUSTI, Marseille

**Bernard POULIGNY**

Directeur de recherche au CNRS, CRPP, Bordeaux

Examineurs

**Xiao Shu CAI**

Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Shanghai

**Thierry GIRASOLE**

Ingénieur de recherche au CNRS, UMR 6614 - CORIA, Rouen

**Loïc MÉÈS**

Chargé de recherche au CNRS, LMFA, Ecole centrale de Lyon

**Kuan Fang REN**

Professeur à l'Université de Rouen

**Claude ROZÉ**

Professeur à l'Université de Rouen



# Remerciements

Ces travaux de thèse ont été effectués au laboratoire CORIA, UMR 6614 CNRS, Université de Rouen et INSA de Rouen. Je tiens à adresser mes remerciements au Professeur A.M. Boukhalfa, directeur du laboratoire pour m'avoir accueillie dans son laboratoire.

Je remercie tout particulièrement Messieurs Fabrice Onofri et Bernard Pouligny d'avoir accepté d'être rapporteurs de ce travail. Je tiens également à remercier M. le Prof. Xiao Shu Cai et Loïc Méès de m'avoir fait l'honneur de participer à ce jury de thèse.

J'adresse mes plus vifs sentiments de gratitude à mes directeurs de thèse : Monsieur Kuan Fang Ren et Monsieur Claude Rozé, pour la confiance qu'ils m'ont accordée, leur soutien constant, leurs précieux conseils et leur disponibilité tout au long de ma thèse.

Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur Thierry Girasole pour ses encouragements quotidiens, son aide quant à l'utilisation des machines de calcul du CRIHAN (Centre de Ressources Informatique de Haute Normandie) et pour la relecture minutieuse des publications et présentations pour les congrès issues de ce travail.

Je voudrais ici remercier les chercheurs du CORIA : Gérard Gréhan, Denis Lebrun, Sébastien Coëtmellec pour les discussions scientifiques que nous avons eues.

Bien évidemment, je tiens à remercier les différentes personnes du CORIA pour leur soutien, administratif et informatique, mais aussi et surtout pour avoir réussi à créer une super ambiance au sein et en dehors du labo : Murielle Hiblot, Valérie Thieury, Vanessa Picard, Laure Paris, les Nathalie(s), Thierry Bessac, Henri Cavalier, Hugues Aroux, Christophe Letailleur, Guillaume Edouard, Chambrelan Cédric.

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à tous mes proches et amis, qui m'ont toujours soutenue et encouragée au cours de la réalisation de cette thèse : Fon, Huanhuan, Jiajie, Jiesheng, Keli, Lei, Renxian, Saïd, Siqian, Xilan.



## Tables des matières

<b>Liste des notations .....</b>	<b>9</b>
<b>Introduction générale.....</b>	<b>13</b>
<b>Chapitre 1 : Rappel des théories existantes .....</b>	<b>17</b>
1.1 Introduction .....	17
1.2 Théories rigoureuses de diffusion de la lumière.....	18
1.2.1 Théorie de Lorenz-Mie .....	18
1.2.2 Théorie de Lorenz-Mie généralisée .....	19
1.3 Optique géométrique .....	19
1.3.1 Cas d'une onde incidente plane .....	19
1.3.2 Cas d'un faisceau gaussien circulaire .....	24
1.4 Diffraction .....	26
1.5 Conclusion.....	26
<b>Chapitre 2 : Modèle d'optique géométrique pour une particule non sphérique.....</b>	<b>27</b>
2.1 Introduction .....	27
2.2 Influence de différents effets ondulatoires en optique géométrique.....	28
2.2.1 Divergence d'onde.....	28
2.2.2 Déphasage dû au trajet optique .....	29
2.2.3 Déphasage dû aux lignes focales .....	30
2.2.4 Diffraction.....	31
2.3 Optique géométrique étendue pour un sphéroïde : cas d'un éclairage incliné par rapport à l'axe	34
2.3.1 Tracé de rayons d'un rayon pour déduire son angle de diffusion .....	34
2.3.2 Amplitude du champ diffusé.....	38
2.3.3 Phase d'un rayon.....	39
2.3.4 Diffraction.....	40
2.3.5 Champ total diffusé par un sphéroïde .....	40
2.4 Problèmes liés au calcul de la divergence et du déphasage dû aux lignes focales .....	40
2.4.1 Première définition de la divergence .....	41
2.4.2 Deuxième définition de la divergence .....	42
2.4.3 Troisième définition de la divergence.....	45

2.5 Conclusion .....	46
<b>Chapitre 3 : Tracé de rayons vectoriels complexes .....</b>	<b>49</b>
3.1 Introduction .....	49
3.2 Présentation du modèle.....	49
3.2.1 Direction de propagation d'un rayon .....	50
3.2.2 Equation des fronts d'onde .....	50
3.2.3 Amplitude complexe d'un rayon .....	52
3.3 Validation du modèle pour une sphère .....	53
3.4 Application du modèle à la diffusion par un sphéroïde .....	56
3.4.1 Cas d'une onde plane sur l'axe .....	56
3.4.2 Cas d'une onde plane inclinée .....	59
3.4.3 Cas d'un éclairage sur l'axe par un faisceau gaussien circulaire .....	61
3.5 Conclusion .....	64
<b>Chapitre 4 : Tracé de rayons par technique de Monte Carlo .....</b>	<b>67</b>
4.1 Introduction .....	67
4.2 Description générale du modèle original de MCTR.....	67
4.2.1 La définition de l'objet .....	68
4.2.2 Intersection d'un rayon avec la surface.....	69
4.2.3 La détection.....	69
4.2.4 Algorithme .....	70
4.3 Validation du modèle de MCTR pour une sphère en 2D sans effets ondulatoires .....	70
4.4 Modèle de MCTRO et ajout d'effets ondulatoires pour une sphère en 2D .....	72
4.4.1 Absorption .....	72
4.4.2 Forme du faisceau incident (gaussien circulaire).....	73
4.4.3 Polarisation .....	74
4.4.4 Interférences entre les photons.....	76
4.5 Comparaison avec la théorie rigoureuse.....	80
4.6 Diffusion d'un sphéroïde : comparaison avec le modèle TRVC .....	82
4.7 Validation du modèle en 3D .....	84
4.7.1 Stratégie de parallélisation du programme.....	84
4.7.2 Validation du modèle.....	85
4.8 Conclusion .....	86
<b>Chapitre 5 : Modèle de l'incertitude d'Heisenberg pour la diffraction .....</b>	<b>87</b>

5.1	Introduction .....	87
5.2	Rappel du principe de Huygens-Fresnel.....	88
5.3	Etude bibliographique sur le modèle de diffraction de l'incertitude d'Heisenberg.....	90
5.3.1	Le modèle de Heinisch .....	90
5.3.2	Le modèle de Freniere .....	91
5.3.3	Le modèle de Serikov .....	92
5.4	Notre modèle d'IH.....	93
5.4.1	Configuration géométrique .....	93
5.4.2	Le problème numérique lié au modèle de Serikov .....	94
5.4.3	Amélioration du modèle de diffraction d'IH .....	96
5.5	Validation du modèle pour la diffraction de Fraunhofer par des ouvertures de forme simple .	96
5.5.1	Diffraction par une fente.....	97
5.5.2	Diffraction par une ouverture carrée.....	97
5.5.3	Diffraction par une ouverture circulaire.....	98
5.6	Diffraction de Fraunhofer par une ouverture elliptique.....	99
5.6.1	Solution analytique .....	100
5.6.2	Résultats du modèle d'IH et comparaison avec la solution analytique.....	101
5.7	Diffraction de Fraunhofer par deux ouvertures de forme simple .....	103
5.8	Conclusion.....	106
	<b>Conclusion générale et perspectives .....</b>	<b>107</b>
	<b>Bibliographie.....</b>	<b>111</b>





## Liste des notations

$A_{j,p}$	:	amplitude d'un rayon $j$ d'ordre $p$
$a$	:	rayon pour une sphère et rayon de révolution pour un sphéroïde
$a_{ijk}$	:	coefficient d'un polynôme tricubique
$a_n$	:	coefficient de diffusion de Mie
$b$	:	rayon transversal d'un sphéroïde
$b_n$	:	coefficient de diffusion de Mie
$C$	:	courbure du dioptré
$D$	:	facteur de divergence
$d$	:	distance entre le col d'un faisceau et le centre d'une sphère
$E_0$	:	amplitude du champ électrique au centre du faisceau incident
$(E_1, E_2)$	:	composantes de la polarisation du champ électrique d'un photon
$(E_r, E_\theta, E_\varphi)$	:	composantes électriques du champ diffusé en champ lointain
$e$	:	vecteur unitaire dans la direction diffractée d'un photon
$f(\vec{x})$	:	fonction LevelSet en 3D
$g_{n,TE}^m$	:	coefficient de forme du faisceau
$g_{n,TM}^m$	:	coefficient de forme du faisceau
$H_0$	:	amplitude du champ magnétique au centre du faisceau incident
$(H_r, H_\theta, H_\varphi)$	:	composantes magnétiques du champ diffusé en champ lointain
$\mathbf{H}$	:	matrice hessienne ou matrice des dérivées secondaires
$h$	:	constante de Planck
$I_i$	:	intensité incident
$I_j$	:	intensité diffusée en champ lointain
$I_0$	:	intensité de l'onde incidente
$\mathbf{I}$	:	matrice unitaire
$J_1$	:	fonction de Bessel de premier ordre
$k$	:	nombre d'onde
$\mathbf{k}$	:	directeur de propagation d'un rayon

$k_i$	:	coefficient d'absorption
$k_n$	:	composante normale du vecteur d'un rayon
$k_\tau$	:	composante tangentielle du vecteur d'un rayon
$l$	:	distance entre les deux points d'interaction successifs d'un photon avec la surface de l'objet
$L_p, l_{tot}$	:	longueur total de trajet d'un rayon à l'intérieur d'une particule
$m$	:	indice de réfraction relatif ou d'une particule
$m_i$	:	partie imaginaire de l'indice de réfraction
$m_r$	:	partie réelle de l'indice de réfraction
$\mathbf{n}$	:	vecteur unitaire de la normale du dioptre de la particule
$\mathbf{n}_G$	:	direction normale au front d'onde du faisceau
$p$	:	ordre d'un rayon
$\mathbf{p}$	:	quantité de mouvement
$Q$	:	courbure du front d'onde de l'onde
$R$	:	rayon de courbure du faisceau et rayon de projection d'un sphéroïde
$R_1, R_2$	;	rayons de courbure du front d'onde dans les deux directions principales
$r$	:	distance d'observation
$r_j$	:	coefficient de réflexion de Fresnel
$S_{j,p}$	:	amplitude complexe d'un rayon $j$ d'ordre $p$
$S_d$	:	amplitude du champ diffracté
$S_j$	:	amplitude du champ total de diffusion
$s_j$	:	aire d'une surface de la particule
$T$	:	transmission
$t_j$	:	coefficient de réfraction de Fresnel
$U_1, U_2$	:	nombres aléatoires
$w$	:	rayon local d'un faisceau ou poids d'un photon
$w_0$	:	rayon au col d'un faisceau gaussien circulaire
$X$	:	polarisation
$x$	:	paramètre de taille d'une particule
$\mathbf{x}_k$	:	direction de propagation d'un photon
$z_R$	:	distance de Rayleigh
DDA	:	en anglais, Discrete dipole approximation
FDTD	:	en anglais, finite-difference time-domain method

IH	:	Incertitude d'Heisenberg
MCTR	:	Monte Carlo par tracé de rayons
MCTRO	:	Monte Carlo par tracé de rayons d'ondes
NAG	:	nombre aléatoire généré
OG	:	Optique géométrique
OGE	:	Optique géométrique étendue
TLM	:	Théorie de Lorenz-Mie
TLMG	:	Théorie de Lorenz-Mie généralisée
$(\vec{t}_1, \vec{t}_2)$	:	repère pour décrire la courbure du front d'onde de l'onde
$(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$	:	repère pour décrire la courbure du dioptre
$(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$	:	directions des deux composantes de polarisation
$\Delta z, \Delta y$	:	incertitude de position d'un photon
$\Delta p_z, \Delta p_y$	:	incertitude de quantité de mouvement
$\Theta$	:	matrice de projection
$\Psi_i$	:	amplitude complexe du faisceau incident
$ \Psi_i $	:	amplitude scalaire du faisceau incident
$\Omega$	:	angle solide
$\alpha_0$	:	angle d'incidence du faisceau incident par rapport à l'axe de propagation
$\beta$	:	angle d'un rayon de référence par rapport à l'axe de propagation
$\varepsilon_j$	:	facteur d'amplitude
$\theta$	:	angle de diffusion
$\theta_c$	:	angle critique pour la réflexion totale
$\theta_i$	:	angle d'incidence d'un rayon par rapport à la normale de la surface de la particule
$\theta_p$	:	angle de diffusion d'un rayon d'ordre $p$
$\theta_p'$	:	angle de déviation total d'un rayon d'ordre $p$
$\theta_r$	:	angle de réfraction
$\lambda$	:	longueur d'onde
$\xi_p$	:	facteur d'absorption
$\pi_n$	:	fonction de Legendre généralisée
$\pi_{n,TE}^m$	:	fonction de Legendre associée
$\rho_1, \rho_2$	:	rayons de courbure de la surface

$\sigma$	:	variance de la déviation angulaire
$\tau$	:	position angulaire d'un rayon
$\tau_n$	:	fonction de Legendre généralisée
$\tau_{n,TE}^m$	:	fonction de Legendre associée
$\varphi$	:	angle azimutal
$\phi_G$	:	déphasage dû à la courbure du front d'onde
$\phi_i, \phi_{inc}$	:	phase incident du faisceau
$\phi_{j,p}$	:	phase d'un rayon $j$ d'ordre $p$
$\phi_{j,RR}$	:	déphasage dû à la réflexion et à la réfraction
$\phi_{j,TOT}$	:	déphasage dû à la réflexion totale
$\phi_{p,FL}$	:	déphasage dû aux lignes focales d'un rayon d'ordre $p$
$\phi_{p,PH}$	:	déphasage dû au trajet optique d'un rayon d'ordre $p$

# Introduction générale

L'optimisation de la consommation d'énergie dans les moteurs nécessite de bien connaître la suite des processus qui mène à la combustion : fractionnement du liquide en spray, écoulement des gouttes, évaporation, production des polluants, etc. La métrologie optique est particulièrement adaptée à l'analyse de ces différents processus : elle possède l'avantage d'être non-intrusive, rapide et adaptée aux milieux difficiles.

Afin de concevoir de nouvelles techniques de mesure et d'améliorer les techniques existantes pour la caractérisation des écoulements diphasiques, l'étude de l'interaction lumière-particule est essentielle. De nombreux outils théoriques et numériques ont été développés pour décrire l'interaction de la lumière avec des objets macroscopiques. On peut les classer en trois types : les théories rigoureuses, les méthodes numériques et les méthodes approchées.

Les théories rigoureuses sont basées sur la résolution des équations de Maxwell par la méthode de séparation des variables. Elles résolvent le problème de la diffusion d'une onde plane par un diffuseur de forme qui correspond à un système de coordonnées mathématiques (sphère, cylindre infini, ellipsoïde...). Lorsque le diffuseur est de forme sphérique, il s'agit de la théorie de Lorenz-Mie (TLM). Cependant, cette théorie ne prend pas en compte le fait que le faisceau incident n'est pas uniforme [1]. Le laser, qui en est l'exemple typique, est pourtant largement utilisé dans les techniques de diagnostic optique. Afin de pouvoir décrire l'interaction entre un faisceau laser et des particules, la TLM a été complétée par la théorie de Lorenz-Mie généralisée (TLMG) qui tient compte de la forme du faisceau incident. Cette dernière a été appliquée pour modéliser différentes techniques de diagnostic optique : anémométrie Phase Doppler, réfractométrie d'arc-en-ciel, holographie numérique... [2-4].

En fait, les particules rencontrées dans les milieux diphasiques industriels sont souvent de forme irrégulière et complexe : ligaments liquides en tout début d'atomisation d'un jet liquide, structures d'un système micro-fluidique ou encore surface d'un liquide déformée par une particule, etc. Les théories rigoureuses ne sont plus adaptées. Plusieurs méthodes numériques ont été développées pour traiter la diffusion par des particules irrégulières, comme la décomposition en dipôles (en anglais, Discrete dipole approximation, DDA) [5-7], la méthode des différences finies dans le domaine temporel (en anglais, Finite Difference Time Domain ou FDTD) [8], la méthode de *T*-Matrice [9] et la

méthode de *Sh*-Matrix [10]. Cependant, le paramètre de taille reste très limité [11], malgré la puissance des ordinateurs actuels.

Parmi les méthodes approchées adaptées à la diffusion de la lumière par des objets irréguliers, nous nous intéressons à l'optique géométrique (OG) qui est une méthode simple et intuitive pour traiter la diffusion par un objet de taille très grande par rapport à la longueur d'onde du faisceau incident. Dans les modèles basés sur l'optique géométrique, l'effet d'interférence est rarement pris en compte. Xu et al. ont montré qu'en tenant compte des interférences entre la réflexion, la réfraction et la diffraction [12], l'OG peut prédire correctement le diagramme de diffusion dans toutes les directions, même si la diffusion près de l'angle critique et de l'angle d'arc-en-ciel doit être encore améliorée [13-19]. L'OG a été étendue par Xu et al. [20] (on parle d'optique géométrique étendue ou OGE) à la diffusion d'un faisceau gaussien sur l'axe par une grosse particule sphéroïdale. Par ailleurs, la diffusion de la lumière par des cristaux de glace non sphériques a été étudiée par Yang et al. en utilisant les modèles basés sur l'OG [21-23].

Dès qu'on veut étendre cette étude au cas d'une particule non-axisymétrique, les calculs analytiques du facteur de divergence et du changement de phase dû aux lignes focales deviennent très difficiles, voire impossibles [24]. Pour contourner ces obstacles, nous avons développé une méthode d'optique géométrique par tracé de rayons vectoriels complexes (TRVC) qui permet de décrire l'interaction de la lumière par un objet de surface lisse et de forme quelconque [25]. Dans ce modèle, les rayons lumineux sont décrits non seulement par la direction de propagation, la polarisation, mais aussi par la phase et la divergence ou la convergence de l'onde. La divergence et le déphasage dû aux lignes focales sont calculés par la géométrie différentielle. La version actuelle du code permet de prédire la diffusion d'une onde plane par un ellipsoïde de grande taille dans le plan de symétrie.

Le modèle de Monte Carlo par tracé de rayons (MCTR) est, d'autre part, un outil très flexible et peut être facilement adapté à la diffusion par des particules de forme complexe en 3D. Il a été largement appliqué à la simulation de la diffusion multiple par toute sorte de particules, sphériques, non-sphériques, ou avec inclusions [26-39]. En se basant sur l'expérience du laboratoire en termes de techniques de Monte Carlo, nous avons développé un modèle de Monte Carlo par tracé de rayons d'ondes (MCTRO) qui prend en compte les propriétés ondulatoires telles que la polarisation, mais aussi la phase, la divergence ou la convergence d'onde pour prédire correctement les interférences.

Lorsque des ondes rencontrent un obstacle, elles peuvent être diffractées par celui-ci. La diffraction est une propriété ondulatoire très importante. Elle doit être prise en compte dans les deux modèles développés (TRCV et MCTRO). Certaines approches ondulatoires, comme le principe de Huygens-Fresnel, proposent une description du phénomène de diffraction. Puisque les ondes lumineuses sont décrites par des paquets de rayons dans le modèle TRVC et que le faisceau incident est considéré comme composé de nombreux photons dans le modèle MCTRO, nous nous intéresserons à la diffraction d'un rayon ou d'un photon.

La théorie géométrique de la diffraction prolonge les lois de l'optique géométrique à des phénomènes de diffraction en introduisant des rayons diffractés [40], mais elle est difficile à appliquer au modèle MCTRO. Ici, le modèle de l'incertitude d'Heisenberg (IH), réalisé dans l'esprit de la méthode de Monte Carlo, sera employé. Il permet d'étudier la diffraction d'un photon par un objet et de prédire le champ diffracté total pour prendre en compte l'effet de diffraction.

A partir de ces deux modèles développés (TRVC et MCTRO), on peut répondre à l'objectif de cette thèse qui est de décrire précisément l'interaction entre la lumière et des particules de forme quelconque. Néanmoins, pour démontrer le principe et simplifier les calculs, nous ne traiterons dans cette thèse que la diffusion par un sphéroïde. Par ailleurs, quand on veut étudier la diffusion par des particules de grande taille et de forme relativement complexe (un sphéroïde, ici), aucune théorie ou modèle n'est disponible pour comparer [41]. Mais les modèles TRVC et MCTRO peuvent se valider l'un par l'autre.

Le travail présenté dans cette thèse est organisé en cinq chapitres.

Le chapitre 1 fait de brefs rappels sur les fondamentaux de diffusion de la lumière par des particules : les théories rigoureuses, le modèle d'optique géométrique (OG) et aussi le modèle de diffraction qui servent de base ou de référence pour la suite de ce manuscrit. Les expressions du champ diffusé lointain seront données dans le formalisme des théories rigoureuses (TLM et TLMG). Le modèle d'OG sera présenté pour deux cas : le cas d'une onde plane et le cas d'un faisceau gaussien circulaire. Une onde lumineuse est représentée par un ensemble de rayons lumineux. Ils sont caractérisés par leurs amplitudes complexes, leurs polarisations et leurs directions de propagation. Le champ diffusé total peut être calculé par une superposition des amplitudes complexes des rayons de tous les ordres émergeant de la particule et du champ diffracté. Ce chapitre se termine par le rappel du modèle de diffraction de Fraunhofer appliqué au modèle d'OG.

Le chapitre 2 est consacré à une évaluation des effets ondulatoires sur la diffusion et l'application du modèle OGE à un sphéroïde. Afin de bien comprendre les contributions des propriétés ondulatoires comme la diffraction, la divergence/convergence du faisceau, les interférences et le déphasage dû aux lignes focales, une étude sur l'évaluation de ces effets sera conduite. Des essais pour étendre le modèle OGE sont réalisés et montrent que le modèle classique de l'optique géométrique doit être repensé.

Afin de résoudre ce problème, le modèle TRVC est introduit. La description du modèle et son application à la diffusion d'une onde plane inclinée par un sphéroïde sont exposés dans le troisième chapitre. Il sera décrit en détail et appliqué à la diffusion non-axisymétrique par un sphéroïde. Les résultats obtenus pour une sphère éclairée par une onde plane et par un faisceau gaussien circulaire seront comparés avec ceux des théories rigoureuses. Puis, les diagrammes de diffusion d'un sphéroïde seront présentés.

L'amélioration du modèle MCTR en prenant en compte les effets ondulatoires (donc MCTRO) et l'application à la diffusion par un sphéroïde font l'objet du quatrième chapitre. Une description



générale du modèle est donnée et sa validation dans la version sans prise en compte des effets d'interférence, d'absorption et de polarisation pour le cas d'une sphère est réalisée. Ensuite des propriétés ondulatoires telles que la polarisation, la phase, la divergence ou la convergence d'onde sont ajoutées dans le but de prédire correctement les interférences et chacun de ces effets est validé en comparant avec le modèle d'OG. En tenant compte de tous les effets susmentionnés, le modèle MCTRO peut être comparé avec la théorie rigoureuse. Ce modèle est ensuite étendu à la diffusion par un sphéroïde.

Le cinquième chapitre traite la diffraction dans le cadre d'un modèle de tracé de rayons. On introduit un modèle basé sur le principe d'incertitude d'Heisenberg (IH) pour prendre en compte l'effet de la diffraction dans le modèle MCTRO. Une étude bibliographique est d'abord présentée, puis notre modèle sur la base d'IH est décrit en introduisant une phase au photon. Ce modèle sera validé pour des ouvertures de forme classique comme une fente, une ouverture carrée et circulaire en comparant avec les solutions analytiques. Nous appliquerons enfin le modèle à une ouverture de forme plus complexe et aussi à deux ouvertures de forme simple.

La thèse s'achève par une conclusion générale où sont rappelés les principaux résultats et les perspectives de ce travail.

# Chapitre 1 : Rappel des théories existantes

## 1.1 Introduction

Les théories de type Lorenz-Mie sont des théories rigoureuses de la diffusion de la lumière par des particules de forme simple pouvant être décrites dans un système de coordonnées adapté à la forme de la particule : sphérique pour une sphère, sphéroïdal pour un sphéroïde, cylindrique pour un cylindre circulaire et elliptique pour un cylindre elliptique. Sur la base de la résolution des équations de Maxwell, elles fournissent des solutions mathématiques rigoureuses de la diffusion d'une onde plane par une particule. Cependant, elles ne sont valides que lorsque la dimension du faisceau d'éclairage est très grande devant la taille du diffuseur. En effet, un éclairage non-uniforme n'est pas pris en compte.

Il est pourtant nécessaire de prendre en compte des faisceaux d'onde non-plane de différentes formes, en particulier pour modéliser les techniques de diagnostic optique basées sur la diffusion de la lumière, permettant de mesurer les propriétés de particules individuelles ou de nuage de particules [1]. Ainsi, pour pouvoir décrire l'interaction d'un faisceau laser avec des particules, la théorie de Lorenz-Mie généralisée (TLMG), qui tient compte de la forme du faisceau incident, a été développée [1-4].

Afin de valider les différents modèles développés (numériques ou approchés), les théories rigoureuses, telles que TLM et TLMG, sont souvent choisies comme références. C'est leur principal intérêt, car elles restent limitées aux particules de forme simple. Par ailleurs, les effets comme l'absorption, la diffraction, les interférences ne peuvent pas être étudiés séparément.

L'optique géométrique (OG) consiste à modéliser la propagation de la lumière à travers une particule par tracé de rayons. Elle est applicable aux grosses particules de forme complexe et permet d'isoler différents effets (ordre de diffusion, interférences, etc.) afin de comprendre leurs contributions à la diffusion. Elle est largement utilisée pour l'analyse et le calcul des problèmes optiques grâce à ses avantages : calcul rapide et compréhension directe. Elle n'est valable que pour des particules de taille beaucoup plus grande que la longueur d'onde du faisceau incident. Des effets comme l'absorption, la diffraction, la divergence/convergence du faisceau, la forme du faisceau incident et aussi tous les déphasages peuvent être pris en compte dans l'OG, en introduisant des modèles adéquats. L'OG peut alors prédire avec précision le diagramme de diffusion, même si elle n'atteint pas la précision des méthodes rigoureuses.

La diffraction est le comportement des ondes lorsqu'elles rencontrent un obstacle. Certaines approches ondulatoires sont à même de décrire le phénomène de diffraction comme le principe de Huygens-Fresnel. La diffraction par une sphère en champ lointain est simplifiée en considérant la diffraction de Fraunhofer et en remplaçant la sphère par un disque opaque circulaire.

Ce chapitre est un petit rappel des théories rigoureuses, du modèle d'OG et aussi des modèles simplifiés de la diffraction qui servent de base ou de référence dans les chapitres suivants.

## 1.2 Théories rigoureuses de diffusion de la lumière

Par la résolution des équations de Maxwell, le problème de diffusion de la lumière par une particule de forme simple (sphère, sphéroïde, cylindre circulaire ou elliptique...) peut être mathématiquement décrit par des fonctions spéciales. L'équation d'onde est résolue avec une méthode de séparation des variables. Les champs électromagnétiques sont écrits sous la forme de sommes infinies d'harmoniques sphériques (sphère), cylindriques (cylindre) ou sphéroïdales (sphéroïde). Les coefficients de ces dernières sont déduits par les conditions aux limites du problème. La taille de la particule doit rester limitée à cause de la difficulté que l'on peut avoir à évaluer numériquement ces fonctions spéciales, sauf dans les cas de la sphère et du cylindre circulaire.

### 1.2.1 Théorie de Lorenz-Mie

Considérons le cas de la diffusion d'une onde plane par une sphère. Dans la TLM, les composantes du champ diffusé lointain  $((E_r, E_\theta, E_\varphi))$  pour le champ électrique et  $((H_r, H_\theta, H_\varphi))$  pour le champ magnétique prennent les formes suivantes, dans un système de coordonnées sphériques  $(r, \theta, \varphi)$  centré sur le centre de la sphère [42]:

$$E_r = H_r = 0 \quad (1.1)$$

$$E_\theta = \frac{iE_0}{kr} \exp(-ikr) \cos \varphi S_2 \quad (1.2)$$

$$E_\varphi = \frac{-E_0}{kr} \exp(-ikr) \sin \varphi S_1 \quad (1.3)$$

$$H_\theta = -\frac{H_0}{E_0} E_\varphi \quad (1.4)$$

$$H_\varphi = \frac{H_0}{E_0} E_\theta \quad (1.5)$$

avec

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \tau_n(\cos \theta) + ib_n \pi_n(\cos \theta)] \quad (1.6)$$

$$S_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \theta) + ib_n \tau_n(\cos \theta)] \quad (1.7)$$

où  $\theta$  est l'angle de diffusion et  $\varphi$  est l'angle azimutal.  $a_n, b_n$  sont les coefficients de diffusion de Mie. Ces derniers ne dépendent que de la longueur d'onde  $\lambda$ , de l'indice complexe de réfraction relatif  $m$  de la particule et de sa taille.  $\pi_n, \tau_n$  sont les fonctions de Legendre généralisées,  $S_1, S_2$  sont les éléments de la matrice de diffusion pour la polarisation perpendiculaire et parallèle.  $k$  est le nombre d'onde :  $k = 2\pi/\lambda$ . L'amplitude de l'onde incidente est notée  $(E_0, H_0)$ .

Les intensités des deux polarisations s'obtiennent respectivement par les carrés des valeurs absolues de  $S_1$  et  $S_2$ .

### 1.2.2 Théorie de Lorenz-Mie généralisée

La TLM a été généralisée dans les années 1980 par G. Gouesbet et al. [2] afin de prendre en compte une onde incidente de forme quelconque. Le faisceau incident sur le diffuseur est décrit par les coefficients  $g_{n,TM}^m, g_{n,TE}^m$  qui dépendent de la forme du faisceau et de la position de la particule dans le faisceau. Ces coefficients sont déterminés par les composantes radiales électrique et magnétique du champ incident dans le repère du diffuseur [1].

Dans le cadre de la TLMG, les champs diffusés lointains sont donnés pour une sphère en remplaçant  $S_2, S_1$  donnés précédemment par [43]:

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ a_n g_{n,TM}^m \tau_n^{|m|}(\cos \theta) + i b_n g_{n,TE}^m \pi_n^{|m|}(\cos \theta) \right] \exp(im\varphi) \quad (1.8)$$

$$S_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ a_n g_{n,TM}^m \pi_n^{|m|}(\cos \theta) + i b_n g_{n,TE}^m \tau_n^{|m|}(\cos \theta) \right] \exp(im\varphi) \quad (1.9)$$

Puisqu'il n'existe plus de symétrie axiale, une seconde sommation  $\sum_{m=-n}^{m=+n}$  est nécessaire et les fonctions de Legendre  $\pi_n(\cos \theta), \tau_n(\cos \theta)$  sont remplacées par les fonctions de Legendre associées  $\pi_n^m(\cos \theta)$  et  $\tau_n^m(\cos \theta)$ .

## 1.3 Optique géométrique

Du point de vue de l'OG, un faisceau incident est considéré comme composé de nombreux rayons lumineux. De l'interaction d'un rayon avec la surface d'une particule résulte deux nouveaux rayons: un rayon réfracté et un rayon réfléchi. Les formules de Fresnel donnent les amplitudes de ces rayons. Les lois de Snell-Descartes déterminent leurs directions de propagation. On rappelle dans cette section les bases de l'OG pour la diffusion d'une onde plane ou d'un faisceau gaussien par une sphère.

### 1.3.1 Cas d'une onde incidente plane

Chaque rayon est décrit par sa direction et son amplitude complexe, qui permet de prendre en compte une amplitude et une phase.

### 1.3.1.1 Direction de propagation d'un rayon émergent

Supposons que l'indice de réfraction du milieu environnant est égal à 1 et considérons une sphère de rayon  $a$  et d'indice complexe de réfraction  $m = m_r - im_i$  ( $m_r$  et  $m_i$  positives) éclairée par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda$  (voir figure 1.1). Le facteur de temps est  $e^{i\omega t}$ .

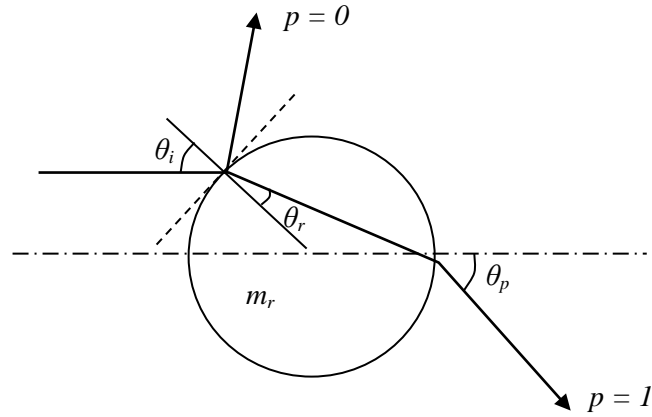


Figure 1.1 Trajet d'un rayon traversant une sphère selon l'optique géométrique.

La relation entre l'angle d'incidence  $\theta_i$  et l'angle de réfraction  $\theta_r$  est donnée par la loi de Snell-Descartes :

$$m_r \sin \theta_r = \sin \theta_i \quad (1.10)$$

L'angle de déviation total  $\theta'_p$  pour l'ordre  $p$  peut être calculé géométriquement par :

$$\theta'_p = (1 - p)\pi - 2\theta_i + 2p\theta_r \quad (1.11)$$

où  $(p - 1)$  représente le nombre de réflexions internes subies par le rayon. Donc,  $p = 0$  représente la réflexion,  $p = 1$  représente la réfraction sans réflexion interne et  $p = 2$  représente la réfraction avec une réflexion interne, ainsi de suite. L'angle de diffusion pris dans l'intervalle  $[0^\circ, 180^\circ]$  peut être déduit de :

$$\theta_p = 2\pi k_p + q_p \theta'_p \quad (1.12)$$

où  $k_p$  est un entier et  $q_p$  est égal à 1 ou -1.

### 1.3.1.2 Amplitude d'un rayon

Les amplitudes sont données par les coefficients de Fresnel :

$$r_1 = \frac{\cos \theta_i - m_r \cos \theta_r}{\cos \theta_i + m_r \cos \theta_r}, \quad r_2 = \frac{m_r \cos \theta_i - \cos \theta_r}{m_r \cos \theta_i + \cos \theta_r} \quad (1.13)$$

Après  $(p - 1)$  réflexions internes, le facteur d'amplitude du rayon peut être calculé par :

$$\varepsilon_j = \begin{cases} r_j & \text{pour } p = 0 \\ (1 - r_j^2)(-r_j)^{p-1} & \text{pour } p \geq 1 \end{cases} \quad (1.14)$$

où  $j = 1$  ou 2 désignent respectivement les composantes perpendiculaire et parallèle de polarisation par rapport au plan de diffusion.

Quand un ensemble de rayons arrive sur la surface de la particule, la convergence ou la divergence de l'onde dépend de la courbure locale de la surface (voir figure 1.2).

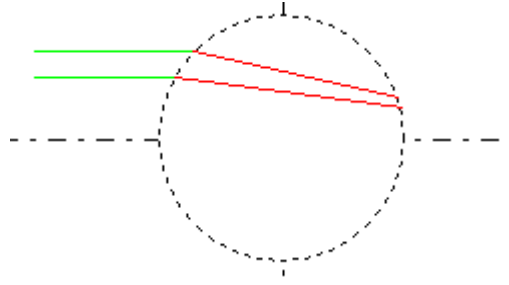


Figure 1.2 Définition de la divergence.

Van de Hulst donne l'expression du facteur de divergence  $D$  pour une sphère [44]:

$$D = \frac{\sin \theta_i \cos \theta_i}{\sin \theta_p \left| \frac{d\theta_p'}{d\theta_i} \right|} = \frac{\sin \theta_i \cos \theta_i}{\sin \theta_p \left| -2 + 2p \frac{\tan \theta_r}{\tan \theta_i} \right|} \quad (1.15)$$

Si la particule est absorbante, l'amplitude décroît durant la propagation du rayon. Le facteur d'atténuation  $\xi_p$  dû à l'absorption peut être calculé simplement par :

$$\xi_p = \exp(-km_i L_p) \quad (1.16)$$

avec  $L_p$  la longueur totale du trajet du rayon à l'intérieur de la particule.

Finalement, en prenant en compte tous les facteurs ci-dessus, l'amplitude du rayon d'ordre  $p$  est obtenue par :

$$A_{j,p} = x \varepsilon_j \sqrt{D} \xi_p \quad (1.17)$$

où  $x = ka$  est le paramètre de taille de la particule. L'amplitude de l'onde est fonction de son étalement, donc de sa divergence. Par ailleurs, cette amplitude est évidemment proportionnelle à la taille de la particule.

### 1.3.1.3 Phase d'un rayon

Tous les rayons lumineux émergents dans la même direction d'observation interfèrent dans le champ lointain. Afin de prendre en compte correctement les interférences entre les rayons, il faut évaluer la phase de ceux-ci. Toute mesure d'une phase dépend d'une référence. Dans notre cas, la référence est le rayon qui passe par le centre de la particule et qui possède les mêmes directions incidente et émergente que le rayon simulé. Dans le cadre de l'OG, il existe quatre types de déphasage par rapport à cette référence [44]:

i) le déphasage  $\phi_{p,PH}$  dû à la différence du chemin optique du rayon par rapport au rayon de référence. Pour une sphère éclairée par une onde plane, l'expression de déphasage  $\phi_{p,PH}$  est donnée analytiquement par Van de Hulst :

$$\phi_{p,PH} = 2ka(\cos \theta_i - pm_r \cos \theta_r) \quad (1.18)$$

ii) le déphasage  $\phi_{j,RR}$  dû à la réflexion et à la réfraction qui sont déjà pris en compte dans les coefficients de Fresnel,

iii) le déphasage  $\phi_{p,FL}$  dû aux lignes focales à l'intérieur et à l'extérieur de la particule. En effet, considérons une onde caractérisée par les deux rayons de courbures principaux (voir figure 1.3). Deux fronts d'onde se croisent à la distance  $\rho_1$  selon une ligne focale 34 dans un plan principal et les autres se croisent à la distance  $\rho_2$  selon une ligne focale 12 dans le plan principal perpendiculaire.

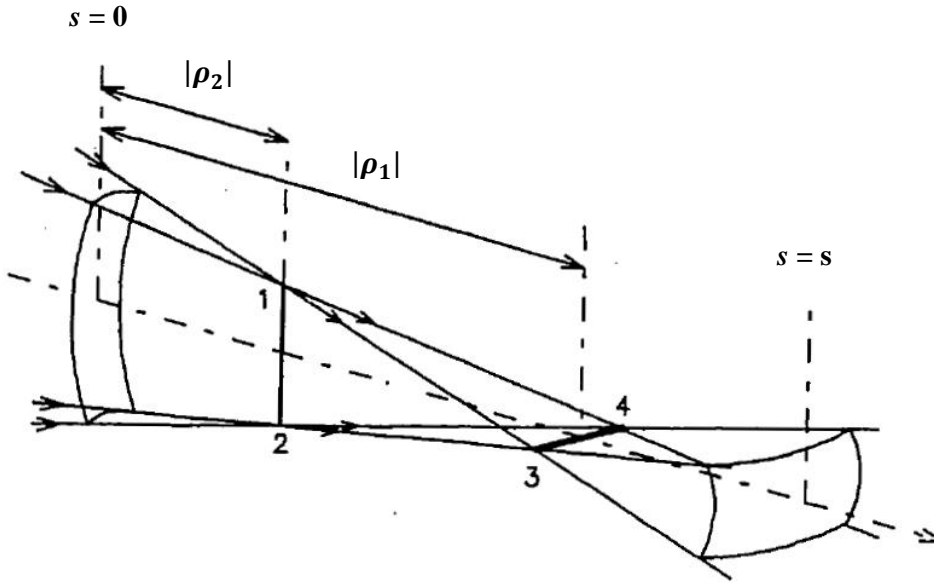


Figure 1.3 Schéma des lignes focales.

Selon Van de Hulst, quand le rayon passe une focale à l'intérieur ou à l'extérieur de la particule, la phase est avancée par  $\pi/2$ . Pour le cas d'une sphère éclairée par une onde plane, ce déphasage est calculé directement par :

$$\phi_{p,FL} = \frac{\pi}{2} \left( p - 2k_p + \frac{1}{2}s - \frac{1}{2}q_p \right) \quad (1.19)$$

avec  $s = -\text{sgn}(d\theta_p'/d\theta_i)$  où la fonction  $\text{sgn}(x)$  vaut +1 ou -1 selon le signe de  $x$ .

iv) le déphasage dû à la réflexion totale. Dans le cas d'une gouttelette sphérique, aucun rayon ne subit de réflexion totale. Cependant pour une bulle sphérique ou une gouttelette non sphérique (sphéroïde par exemple), il peut y avoir des réflexions totales. Le phénomène de réflexion totale se produit lorsqu'un rayon lumineux arrive d'un milieu plus réfringent vers un milieu moins réfringent et que l'angle d'incidence est supérieur à une valeur critique  $\theta_c$  :

$$\theta_c = \sin^{-1}(m) \quad (1.20)$$

où  $m = m_2/m_1 < 1$  est l'indice de réfraction relatif,  $m_1, m_2$  respectivement les indices de réfraction du milieu 1 et du milieu 2. Dans ce cas, la lumière incidente est totalement réfléchie et il n'y a pas de lumière transmise.

Par contre, un déphasage dû à la réflexion totale doit être pris en compte [45]:

$$\phi_{1,TOT} = 2 \tan^{-1} \left( \frac{\sqrt{\sin^2 \theta_i - m^2}}{\cos \theta_i} \right) \quad (1.21)$$

$$\phi_{2,TOT} = 2 \tan^{-1} \left( \frac{\sqrt{\sin^2 \theta_i - m^2}}{m^2 \cos \theta_i} \right) \quad (1.22)$$

En prenant en compte correctement la réflexion totale, le modèle d'OG a été appliqué avec succès à la diffusion de la lumière par une grosse bulle sphérique [45-47].

Finalement, la phase comprenant tous les déphasages subis par un rayon lumineux est calculée par :

$$\phi_{j,p} = \frac{\pi}{2} + \phi_{p,PH} + \phi_{p,FL} + \phi_{j,TOT} + (\phi_{j,RR}) \quad (1.23)$$

où  $(\phi_{j,RR})$  désigne le déphasage due à la réflexion et la réfraction déjà inclus dans les coefficients de Fresnel. La phase joue évidemment un rôle essentiel pour prendre en compte les interférences entre les rayons. Ici, le terme de  $\pi/2$  dans l'équation 1.23 est ajouté de façon arbitraire juste afin de pouvoir mieux correspondre à la théorie rigoureuse dans les directions vers l'avant [48].

#### 1.3.1.4 Champ de diffusion total

En considérant tous les effets susmentionnés, l'amplitude complexe du rayon  $j$  d'ordre  $p$  est donnée par :

$$S_{j,p} = A_{j,p} \exp(i\phi_{j,p}) \quad (1.24)$$

Le champ total de diffusion  $S_j$  peut alors être calculé par une superposition de la contribution de tous les ordres comprenant le champ de réflexion spéculaire  $S_{j,0}$ , les champs de réfraction  $S_{j,p}$ , qui subissent les  $(p - 1)$  réflexions internes et le champ diffracté  $S_d$  :

$$S_j = S_d + \sum_{p=0}^{\infty} S_{j,p} \quad (1.25)$$

L'intensité diffusée en champ lointain pour un point d'observation situé à une distance  $r$  du centre de la particule est donnée par :

$$I_j = \frac{I_0}{(kr)^2} |S_j(\theta)|^2 \quad (1.26)$$

avec  $I_0$  l'intensité de l'onde incidente.

Il convient de noter que, puisque l'onde incidente est discrétisée en rayons, les rayons émergents n'ont pas une distribution homogène en fonction de l'angle de diffusion. Si on veut additionner différents ordres, un sur-échantillonnage est réalisé entre les points calculés par interpolation linéaire.



### 1.3.2 Cas d'un faisceau gaussien circulaire

L'optique géométrique s'applique à la diffusion par des grosses particules devant la longueur d'onde du faisceau incident. On rappelle dans cette section les bases de l'OG pour la diffusion d'un faisceau gaussien circulaire par une sphère.

#### 1.3.2.1 Description du faisceau incident

On considère une sphère éclairée par un faisceau gaussien circulaire de rayon au col  $w_0$ . La particule se trouve sur l'axe du faisceau et le col du faisceau est à la distance  $d$  du centre de la sphère. Le faisceau se propage suivant l'axe  $z$  (voir figure 1.4).

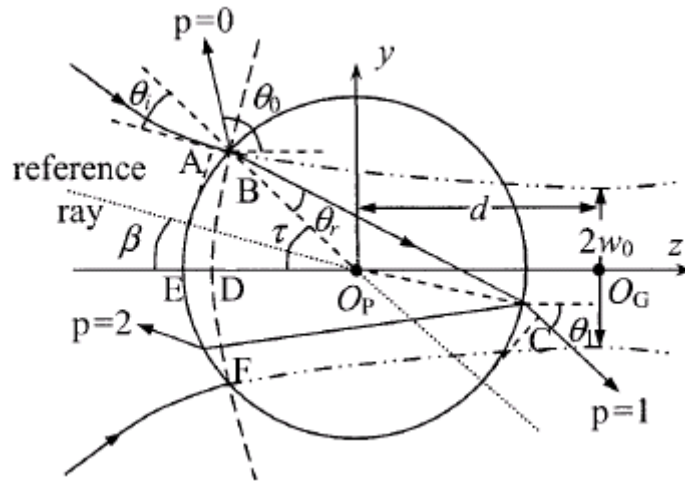


Figure 1.4 Optique géométrique pour une sphère éclairée par un faisceau gaussien circulaire [12].

L'amplitude complexe du faisceau incident est décrite par [12] :

$$\Psi_i = |\Psi_i| \exp(i\phi_i) \quad (1.27)$$

où  $|\Psi_i|$  et  $\phi_i$  représentent respectivement l'amplitude scalaire et la phase incidente du faisceau :

$$|\Psi_i| = \frac{w_0}{w} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{w^2}\right) \quad (1.28)$$

$$\phi_i = -k \left[ (z - d) + \frac{x^2 + y^2}{2R} \right] + \tan^{-1} \left( \frac{z - d}{z_R} \right) \quad (1.29)$$

avec  $z_R$  la distance de Rayleigh :  $z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda}$ ; (1.30)

$w$  le rayon local du faisceau :  $w = w_0 \sqrt{1 + \left[ \frac{z-d}{z_R} \right]^2}$ ; (1.31)

et  $R$  le rayon de courbure du faisceau :  $R = (z - d) \left[ 1 + \left( \frac{z_R}{z-d} \right)^2 \right]$ . (1.32)

### 1.3.2.2 Propagation des rayons du faisceau gaussien circulaire

Chaque rayon incident se propage dans la direction  $\vec{n}_G$  normale au front d'onde du faisceau. L'angle d'incidence est calculé à partir de la normale de la sphère et de la normale du front d'onde du faisceau comme :

$$\cos \theta_i = \frac{|yn_{G,y} + zn_{G,z}|}{\sqrt{(y^2 + z^2)(n_{G,y}^2 + n_{G,z}^2)}} \quad (1.33)$$

$$n_{G,y} = \frac{\partial \phi_i}{\partial y} = -\frac{2z_R y(z-d)}{w_0^2 [z_R^2 + (z-d)^2]} \quad (1.34)$$

$$n_{G,z} = \frac{\partial \phi_i}{\partial z} = \frac{z_R}{z_R^2 + (z-d)^2} - \frac{z_R y^2 [z_R^2 - (z-d)^2]}{w_0^2 \{z_R^2 + [z_R^2 - (z-d)^2]^2\}} - k \quad (1.35)$$

L'angle  $\beta$  du rayon de référence par rapport à l'axe  $z$  est déduit par :

$$\beta = \tan^{-1} \left( \frac{n_{G,y}}{n_{G,z}} \right) \quad (1.36)$$

Puis l'angle de déviation totale du rayon de l'ordre  $p$  s'obtient par :

$$\theta'_p = 2p\theta_r - 2\tau - (p-1)\pi + \beta \quad (1.37)$$

avec  $\tau = \tan^{-1}(y/z)$  position angulaire du point incident.

### 1.3.2.3 Amplitude complexe d'un rayon

Les calculs du facteur d'amplitude  $\varepsilon_j$  et du facteur d'atténuation  $\xi_p$  restent les mêmes que pour le cas d'une onde plane. Puisque l'angle de déviation  $\theta'_p$  ne dépend pas seulement du point incident défini par l'angle  $\tau$ , mais aussi de la focalisation du faisceau, il est difficile de déduire directement une expression analytique du facteur de divergence. Cependant, il peut être évalué numériquement par l'expression suivante :

$$D = \frac{\cos \theta_i \sin \tau}{\sin \theta_p \left| \frac{\theta'_{p,l+1} - \theta'_{p,l-1}}{\tau_{l+1} - \tau_{l-1}} \right|} \quad (1.38)$$

où l'indice  $l$  représente le numéro du rayon simulé, donc  $l+1$  et  $l-1$  les rayons voisins du rayon  $l$ . Un déphasage supplémentaire  $\phi_G$  dû à la courbure du front d'onde doit être pris en compte dans la phase du rayon [12] :

$$\phi_G = \phi_i - k(d + a \cos \theta_i) \quad (1.39)$$

Enfin le champ complexe d'un rayon pour le cas d'un faisceau gaussien circulaire est donné par :

$$S_{j,p} = |\Psi_i| A_{j,p} \exp \left\{ i \left[ \frac{\pi}{2} + \phi_{p,PH} + \phi_{p,FL} + \phi_{j,TOT} + (\phi_{j,RR}) + \phi_G \right] \right\} \quad (1.40)$$

Le champ total diffusé peut être calculé par la contribution de tous les rayons et du champ diffracté.

## 1.4 Diffraction

L'origine de la diffraction est liée à la nature ondulatoire du phénomène. Pour l'aborder, il faut donc en théorie remonter à l'équation d'onde et utiliser le principe de Huygens-Fresnel. Ce principe est fondé sur l'idée qu'on peut considérer chaque point d'un front d'onde comme une source secondaire et que l'onde observée un peu plus loin est le résultat des interférences entre ces sources secondaires.

La diffraction d'une onde plane par une sphère en champ lointain est simplifiée en considérant la diffraction de Fraunhofer et en remplaçant la sphère par un disque opaque de même rayon. Le champ de diffraction d'une onde plane par un disque circulaire est alors ajouté au modèle d'OG et s'écrit [49-51] :

$$S_d = x^2 \frac{J_1(x \sin \theta)}{x \sin \theta} \quad (1.41)$$

où  $J_1$  est la fonction de Bessel de premier ordre et  $\theta$  est l'angle de diffusion. La distribution d'intensité associée à l'expression (1.41) est connue sous le nom de tâche d'Airy. Elle se caractérise par une tâche centrale, entourée d'anneaux d'intensité plus faible.

Dans le cas d'un faisceau gaussien circulaire, le modèle de Chevaillier [52-53] est utilisé pour calculer la diffraction en champ lointain [12] d'un disque circulaire de rayon  $a$ :

$$S_d = \frac{x^2}{2\pi} \left(\frac{w_0}{w}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 \exp(-At^2) \exp[i(Bt + Ct^2)] t dt \quad (1.42)$$

avec  $A = (a/w)^2$ ,  $B = -x \tan \theta \cos(\varphi - \varphi')$  et  $C = x^2/2kR$ . Ce champ diffracté peut être évalué par intégration numérique.

## 1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit rapidement les théories rigoureuses de type Lorenz-Mie, l'optique géométrique (OG) et le modèle simplifié de la diffraction à ajouter à l'OG pour une sphère. Les théories rigoureuses servent de référence pour valider les modèles approchés. Ces théories étant limitées à des particules de forme très simple, on utilisera ces mêmes formes simples dans les modèles proposés dans la suite. Nous nous intéressons au modèle d'OG qui peut être appliqué aux particules non sphériques de grande taille. Elle permet d'isoler les effets comme l'absorption, la divergence ou la convergence de l'onde, les interférences et la diffraction afin de mieux comprendre leurs contributions à la diffusion. Pour le cas d'un faisceau sur l'axe d'une sphère, la diffraction en champ lointain peut être simplement calculée grâce au modèle de la diffraction de Fraunhofer.

Le chapitre suivant est dédié à une étude des effets susmentionnés afin de bien comprendre leurs contributions à la diffusion et à une description du modèle OGE pour un sphéroïde.

# Chapitre 2 : Modèle d'optique géométrique pour une particule non sphérique

## 2.1 Introduction

L'optique géométrique (OG) est une méthode approchée pour décrire la diffusion de la lumière par une grosse particule non sphérique. On va montrer qu'en prenant en compte correctement les interférences et la diffraction, elle peut permettre de prédire avec précision la diffusion par une particule de forme simple comme une sphère ou un cylindre circulaire. Dans ces deux cas simples, il est facile de valider les calculs puisque l'on dispose d'expressions analytiques pour le champ diffusé.

Pour d'autres particules, il est difficile, voire impossible, d'obtenir des expressions analytiques. Lock a montré qu'il est possible de trouver des équations analytiques pour un sphéroïde, mais le calcul est limité à la réflexion et la réfraction d'ordre 1 [54-55]. Sur le même principe, Xu et al [20] ont étendu l'optique géométrique à la diffusion d'un faisceau gaussien par un sphéroïde sur l'axe à l'aide d'une méthode de tracé de rayons. Les résultats numériques semblent corrects. Cependant, dans ces calculs, la divergence ou la convergence transversale du faisceau ont été prises en compte de la même manière que le cas d'une sphère, ce que est problématique.

Pour prendre en compte un éclairage dont la direction ne coïncide pas avec un des axes du sphéroïde, l'OG doit être perfectionnée. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la diffusion par un sphéroïde éclairée par une onde plane inclinée. Dans ce cas, la divergence ou la convergence transversale (perpendiculaire au plan défini par l'onde incidente et l'axe du sphéroïde) nécessite un traitement particulier.

Ce chapitre est divisé en trois sections. Afin de bien comprendre les contributions des effets ondulatoires comme la diffraction, la divergence ou la convergence du faisceau, les interférences à la diffusion, une évaluation de ces effets sera faite dans la première section par l'OG pour le cas d'une sphère éclairée par une onde plane. La diffusion d'une onde plane par un sphéroïde dont des deux axes ne correspondent pas à la direction d'éclairage est réalisée par l'OG dans la deuxième section. La dernière partie est consacrée à décrire le problème des calculs de divergence et de déphasage dû aux lignes focales en étendant l'OG au cas non axisymétrique.

## 2.2 Influence de différents effets ondulatoires en optique géométrique

La figure 2.1 montre la comparaison entre un diagramme de diffusion calculé par la TLM et un diagramme simulé par l'OG classique (sans tenir compte d'un quelconque effet dû à la nature ondulatoire de la lumière) pour une gouttelette d'eau sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  éclairée par une onde plane non polarisée. On constate que le résultat de l'OG classique ne correspond pas du tout au résultat de la TLM. A travers cet exemple, on voit que sans prise en compte des effets dus à la nature ondulatoire de la lumière, l'OG ne peut pas prédire correctement le diagramme de diffusion pour cette taille de particules.

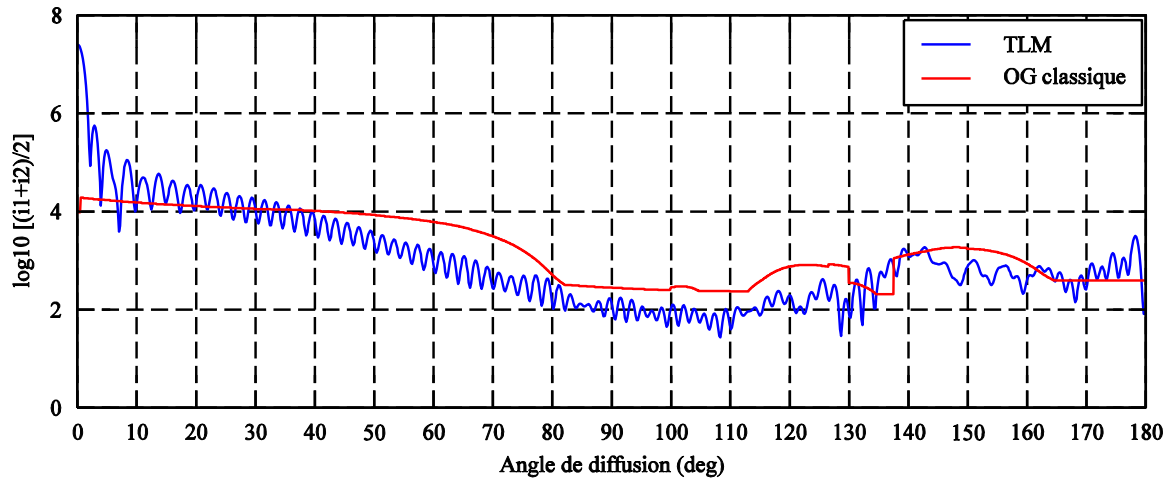


Figure 2.1 Comparaison des diagrammes de diffusion entre l'OG classique et la TLM pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ .

### 2.2.1 Divergence d'onde

Le facteur de divergence défini dans l'OG tient compte de la divergence ou la convergence d'onde selon la courbure locale de surface de la particule. La figure 2.2 présente la comparaison des diagrammes de diffusion prédits par l'OG avec et sans divergence et par la TLM. Ici, la divergence  $D$  est calculée par l'expression (1.15). En considérant la divergence de l'onde, on remarque que l'OG se rapproche de la TLM en moyenne. Cependant, il n'y a pas d'oscillations car les interférences entre les rayons lumineux ne sont pas tenues en compte.

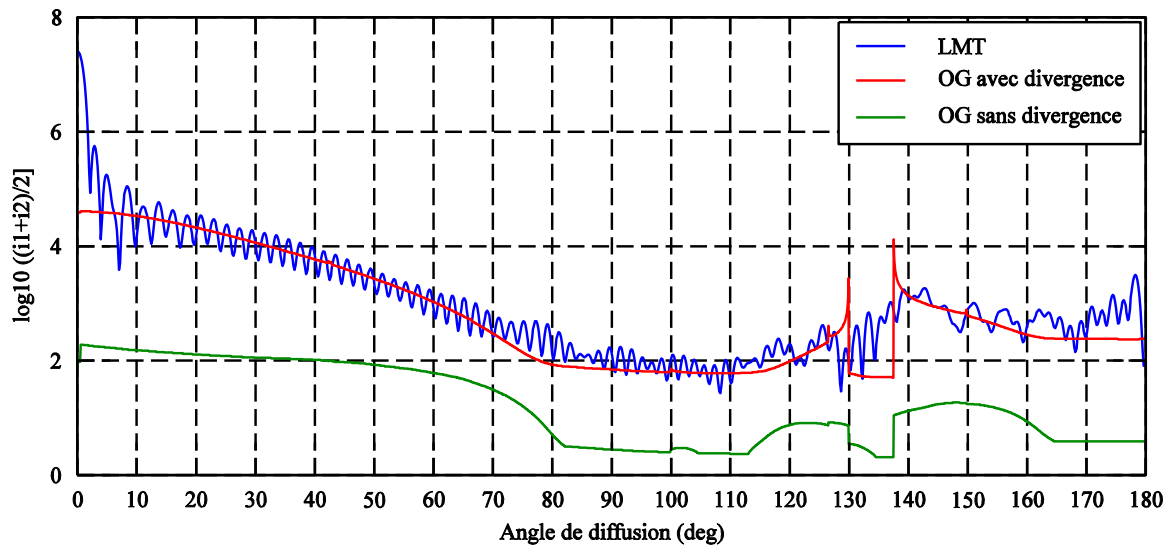


Figure 2.2 Comparaison des diagrammes de diffusion entre la TLM et l'OG avec et sans divergence, pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Les intensités pour l'OG sans divergence ont été décalées par un facteur de  $10^2$  pour pouvoir les placer sur le même graphe.

### 2.2.2 Déphasage dû au trajet optique

On illustre sur la figure 2.3 les distributions d'intensité de différent ordre  $p$  du rayon calculées par l'OG. On peut voir que les rayons de différents ordres ou de même ordre peuvent être diffusés dans la même direction d'observation. Ils vont donc interférer. Afin de prendre en compte ces interférences, une phase comprenant différents types de déphasages doit être calculée pour chaque rayon lumineux.

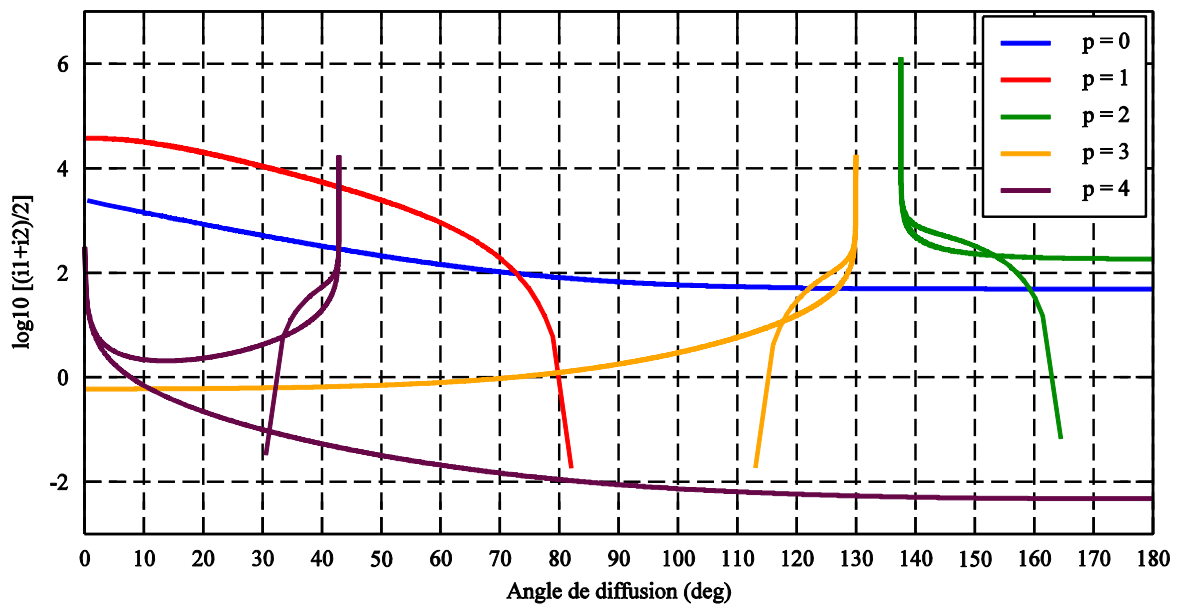


Figure 2.3 Distributions d'intensité de différent ordres  $p$ , calculées par l'OG pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ .

La figure 2.4 montre la comparaison des diagrammes de diffusion simulés par la TLM, et par l'OG sans déphasage et avec le déphasage lié au trajet optique  $\phi_{PH}$ . On voit que la prise en compte des interférences aboutit à l'apparition d'oscillations sur le diagramme de diffusion. Ces oscillations ne sont cependant pas en phase avec celles de la TLM : la prise en compte du déphasage  $\phi_{PH}$  n'est pas suffisante pour prédire correctement le diagramme de diffusion.

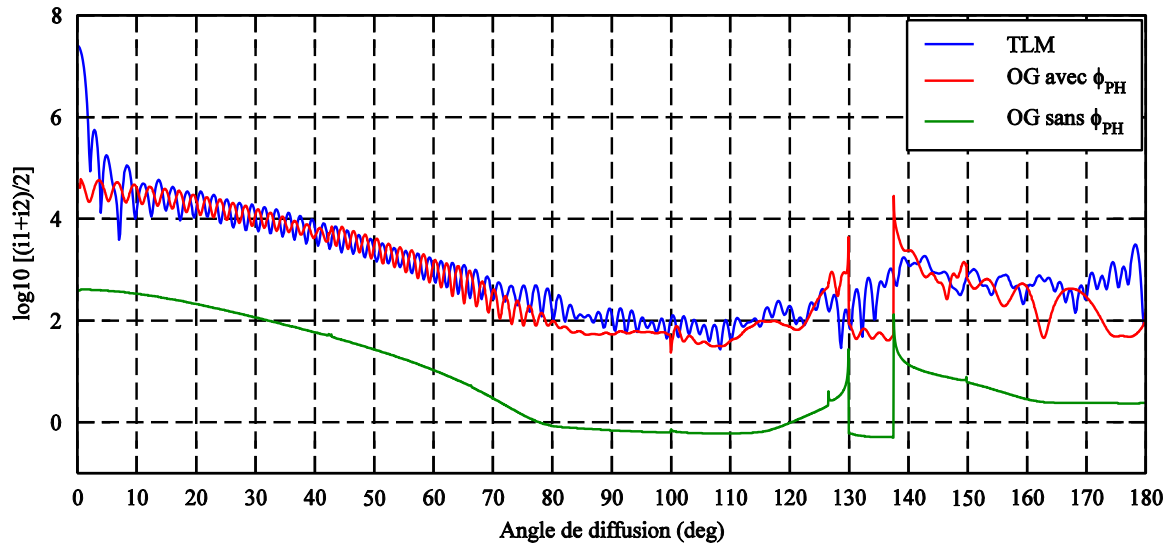


Figure 2.4 Comparaison des diagrammes de diffusion prédits par la TLM et par l'OG avec et sans prise en compte du déphasage dû au trajet optique  $\phi_{PH}$ , pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu m$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu m$ . Les intensités pour l'OG sans  $\phi_{PH}$  ont été divisées par un facteur de  $10^2$  pour pouvoir les placer sur le même graphe.

### 2.2.3 Déphasage dû aux lignes focales

La comparaison des diagrammes de diffusion calculés par l'OG avec et sans déphasage dû aux lignes focales  $\phi_{FL}$  avec ceux de la TLM, toujours pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu m$  éclairée par une onde plane non polarisée est montrée sur la figure 2.5. On voit que, en tenant compte de ce déphasage  $\phi_{FL}$ , l'OG peut prédire correctement les oscillations du diagramme de diffusion. En comparant les résultats de l'OG avec et sans  $\phi_{FL}$ , on voit que les phases des deux résultats sont opposées dans les directions plutôt vers l'arrière dans l'intervalle  $[138^\circ, 180^\circ]$  où les rayons d'ordre  $p = 2$  dominent et vers l'avant dans l'intervalle  $[0^\circ, 81^\circ]$  où les rayons d'ordre  $p = 1$  sont dominants (voir figure 2.3). A partir du tracé de rayons des différents ordres illustré sur la figure 2.6, on constate que les rayons d'ordre 1 traversent les points focaux à l'extérieur de la sphère et que les rayons d'ordre 2 passent par des points focaux à l'intérieur de la particule. Les phases des rayons de ces deux ordres sont donc en avance de  $\pi$ .

Le désaccord vers l'avant est dû au fait que la diffraction n'est pas prise en compte.

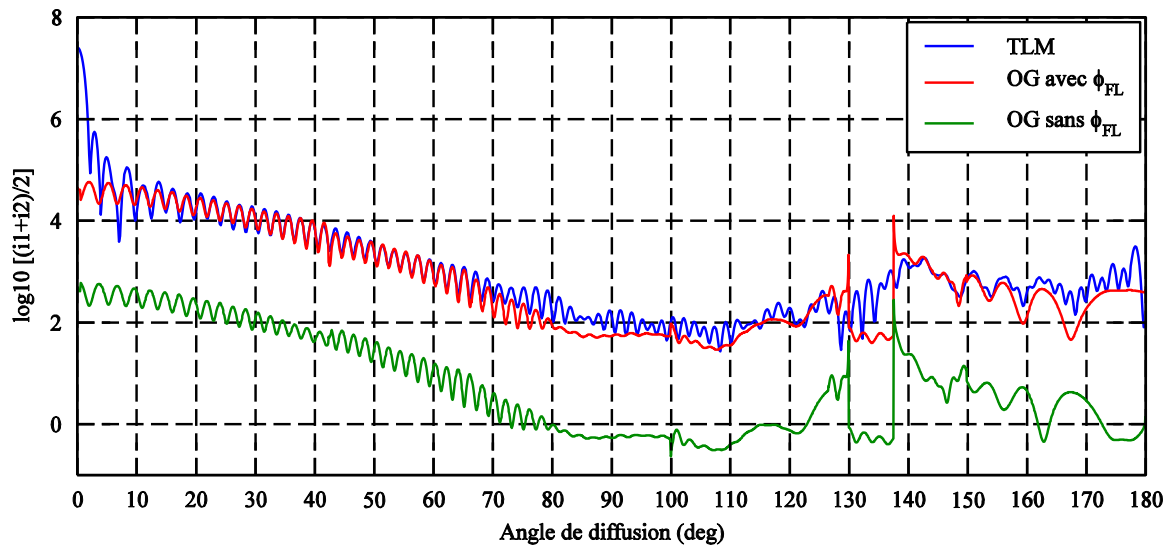


Figure 2.5 Comparaison des diagrammes de diffusion prédits par la TLM et l'OG avec et sans prise en compte le déphasage dû aux lignes focales  $\phi_{FL}$ , pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Les intensités pour l'OG sans  $\phi_{FL}$  ont été divisées par un facteur de  $10^2$  pour pouvoir les placer sur le même graphique.

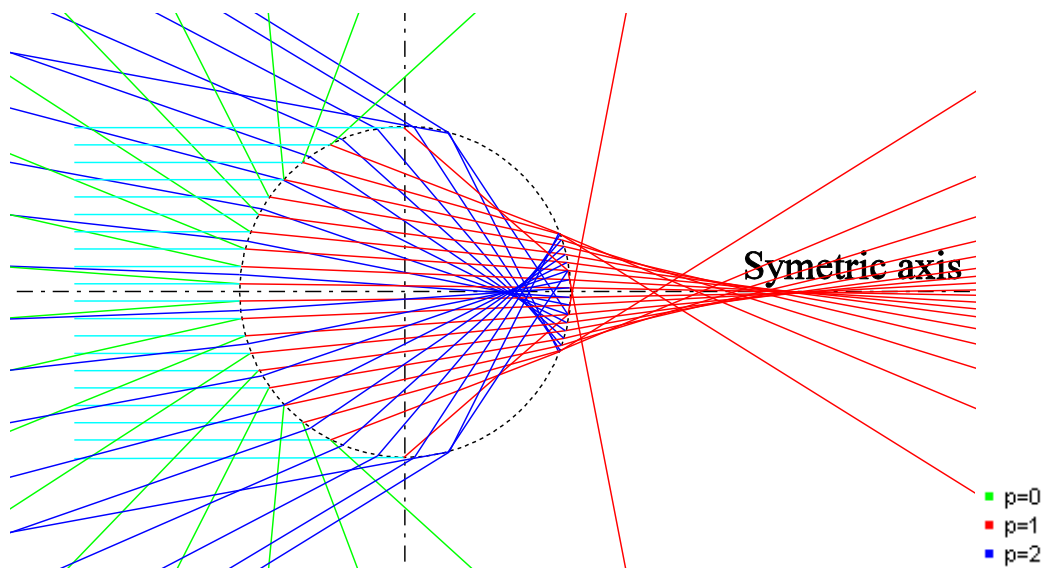


Figure 2.6 Tracé de rayons des premiers trois ordres pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ .

## 2.2.4 Diffraction

La solution la plus simple pour tenir compte de la diffraction consiste à utiliser la théorie de Fraunhofer. Dans ce cas, la diffraction par une sphère éclairée par une onde plane peut être assimilée à la diffraction par un disque opaque. La figure 2.7 compare les diagrammes de diffusion simulés par l'OG avec et sans diffraction, et par la TLM. On observe que, bien évidemment, la diffraction contribue principalement à la diffusion avant.



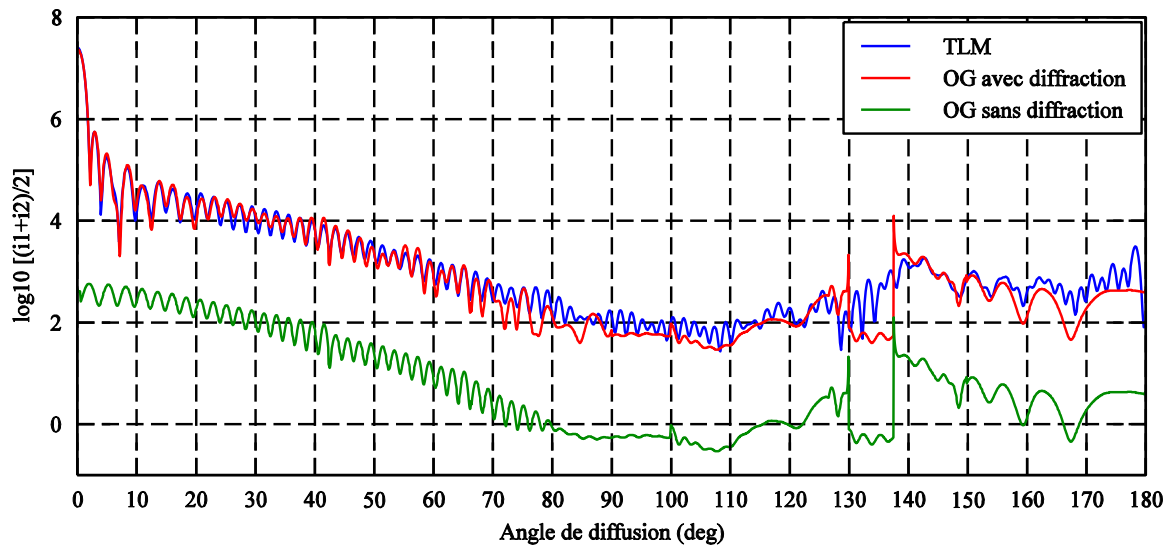


Figure 2.7 Comparaison des diagrammes de diffusion prédits par la TLM et l'OG avec et sans diffraction, pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 10 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$ , éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Les intensités pour l'OG sans diffraction ont été divisées par un facteur de  $10^2$  pour pouvoir les placer sur le même graphe.

Comme nous l'avons décrit dans le chapitre précédent, si les effets dus à la nature ondulatoire de la lumière sont pris en compte par l'OG, cette méthode peut alors prédire la diffusion avec une bonne précision. Dans le cas d'une particule de forme simple (sphère par exemple), les résultats de l'OG peuvent se comparer avec les théories rigoureuses (la TLM dans ce cas). Les figures 2.8 - 2.9 montrent ce type de comparaisons pour des diagrammes de diffusion de gouttelettes et de bulles sphériques de différentes tailles éclairées par une onde plane non polarisée. A partir de ces deux figures, on peut constater que, plus la particule est grande, plus l'OG est précise. L'OG peut prédire correctement la diffusion pour une gouttelette sphérique de rayon plus grand que  $10 \mu\text{m}$  et pour une bulle sphérique de rayon plus grand que  $5 \mu\text{m}$ .

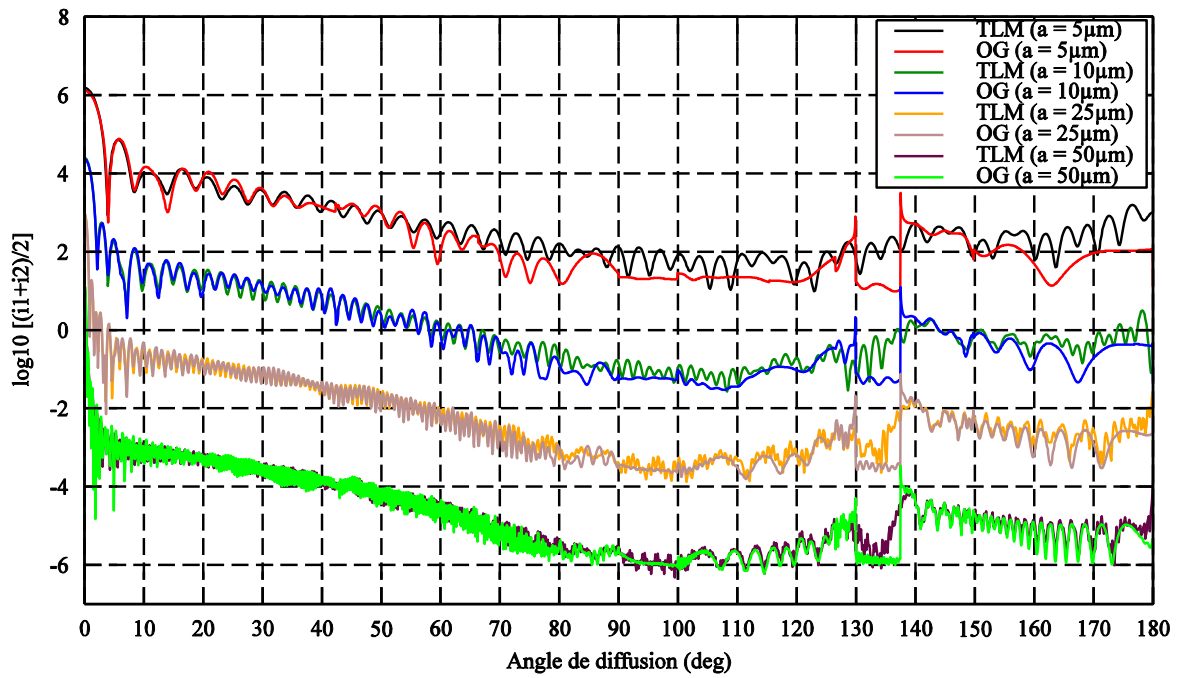


Figure 2.8 Comparaison des diagrammes de diffusion calculés par l'OG et la TLM, pour une gouttelette sphérique, de rayon  $a = 5 \mu\text{m}$ ,  $10 \mu\text{m}$ ,  $25 \mu\text{m}$ ,  $50 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$ , éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Les intensités pour  $a = 10 \mu\text{m}$ ,  $25 \mu\text{m}$  et  $50 \mu\text{m}$  ont été décalées des facteurs  $10^3$ ,  $10^6$ ,  $10^9$  pour pouvoir les voir sur le même graphe.

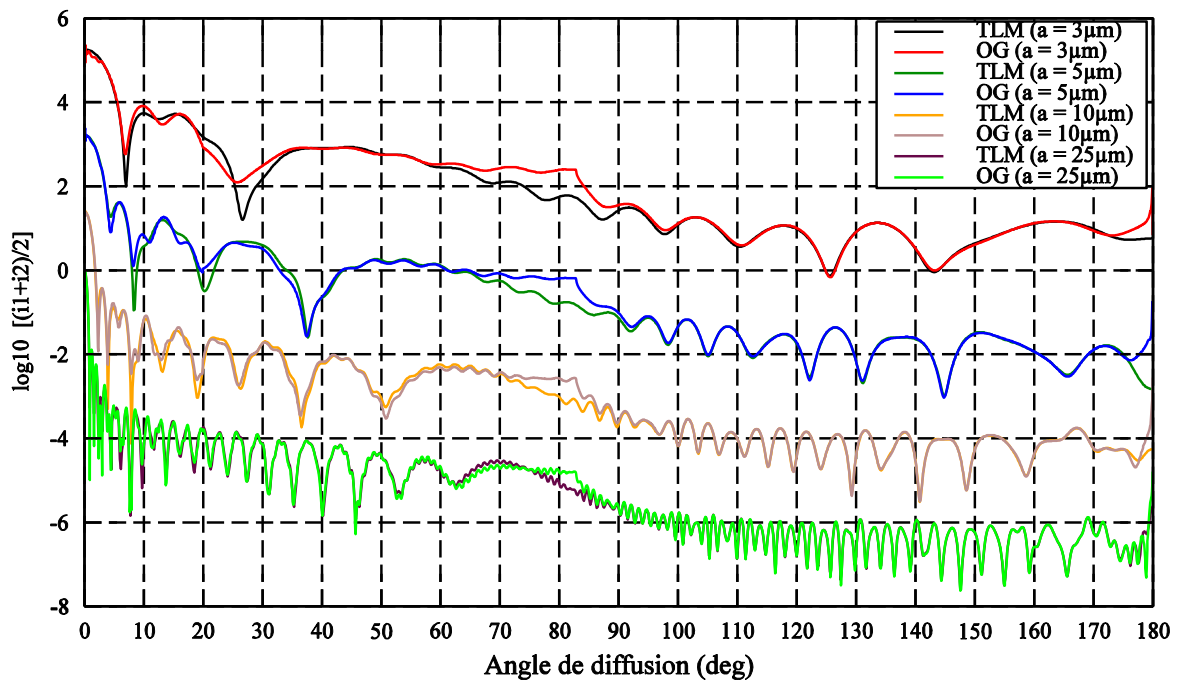


Figure 2.9 Comparaison des diagrammes de diffusion calculés par l'OG et la TLM, pour une bulle sphérique, de rayon  $a = 3 \mu\text{m}$ ,  $5 \mu\text{m}$ ,  $10 \mu\text{m}$ ,  $25 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 0.75$ , éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Les intensités pour  $a = 5 \mu\text{m}$ ,  $10 \mu\text{m}$  et  $25 \mu\text{m}$  ont été décalées des facteurs  $10^3$ ,  $10^6$ ,  $10^9$  pour pouvoir les voir sur le même graphe.

## 2.3 Optique géométrique étendue pour un sphéroïde : cas d'un éclairage incliné par rapport à l'axe

Nous nous intéressons maintenant au cas de la diffusion non axisymétrique : un sphéroïde éclairé une onde plane inclinée.

Pour une sphère, l'angle d'incidence du rayon à l'intérieur de la particule et la longueur du trajet entre les deux réflexions internes successives restent constants. Par conséquent, l'angle de déviation, la divergence et le trajet du rayon peuvent être calculés directement par des expressions analytiques. Pour une particule non sphérique, par exemple un sphéroïde, l'angle d'incidence à chaque réflexion interne et le trajet entre deux réflexions internes varient au cours de la propagation. On ne peut pas les déterminer analytiquement. La méthode numérique de tracé de rayons est employée pour suivre la propagation de chaque rayon et en déduire l'angle de diffusion, le facteur d'amplitude et le trajet.

### 2.3.1 Tracé de rayons d'un rayon pour déduire son angle de diffusion

L'extension de l'OG au cas d'une onde plane inclinée est basée sur la méthode de Xu [20] et Marcuse [56]. Les rayons lumineux seront traités comme des vecteurs.

On considère un sphéroïde de rayon de révolution  $a$  suivant l'axe  $z$  et de rayon transversal  $b$  éclairé par un rayon lumineux d'angle d'incidence  $\alpha_0$  par rapport à l'axe  $z$  (voir figure 2.10), compté positivement autour de l'axe  $-x$ . La symétrie d'un sphéroïde par rapport à l'axe optique permet de traiter le problème en 2D. En effet, si un rayon est envoyé sur le sphéroïde, son parcours restera dans le plan contenant la direction de l'onde incidente et l'axe  $z$ . Il suffit de travailler dans un seul plan, les autres étant déduits par rotation autour de l'axe  $z$ .

L'équation d'un sphéroïde s'écrit dans le plan  $yz$  comme:

$$\frac{z^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (2.1)$$

Pour calculer la normale à la surface, on définit la fonction  $f$ :

$$f(z, y) = \frac{z^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - 1 = 0 \quad (2.2)$$

Ainsi le vecteur unitaire de la normale  $\overline{BA}$  au point d'incidence  $(z_0, y_0)$  est calculé avec :

$$\vec{n} = \frac{\nabla f}{\|\nabla f\|} = \frac{\frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{e}_y}{\sqrt{\frac{\partial f^2}{\partial z} + \frac{\partial f^2}{\partial y}}} = \frac{z_0 b^2 \vec{e}_z + y_0 a^2 \vec{e}_y}{b \sqrt{a^4 - e^2 z_0^2}} \quad (2.3)$$

$$\text{avec } e^2 = a^2 - b^2 \quad (2.4)$$

L'angle d'incidence  $\beta_0$  du rayon incident par rapport à la normale  $\overline{BA}$  s'obtient par:

$$\sin \beta_0 = \left| \frac{z_0 b^2 \sin \alpha_0 - y_0 a^2 \cos \alpha_0}{b \sqrt{a^4 - e^2 z_0^2}} \right| \quad (2.5)$$

Pour le rayon d'ordre  $p = 0$ , l'angle de diffusion est déduit directement par:

$$\theta_0 = \pi - 2\beta_0 + \alpha_0 \quad (2.6)$$

Pour le rayon réfracté, l'angle de réfraction  $\beta_i$  peut être calculé par la loi de Descartes :

$$\beta_i = \sin^{-1} \left( \frac{\sin \beta_0}{m_r} \right) \quad (2.7)$$

L'angle  $\beta_n$  entre la normale  $\overline{BA}$  et la direction positive de l'axe  $z$  est :

$$\beta_n = \pi - \cos^{-1} \left( \frac{|z_0|b^2}{b\sqrt{a^4 - e^2 z_0^2}} \right) \quad (2.8)$$

On peut alors calculer l'angle  $\alpha_1$  du rayon réfracté  $\overline{BC}$  par rapport à direction positive de l'axe  $z$  :

$$\begin{cases} \alpha_1 = \beta_n + \beta_i & y > 0 \\ \alpha_1 = \pi - \beta_n + \beta_i & y < 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

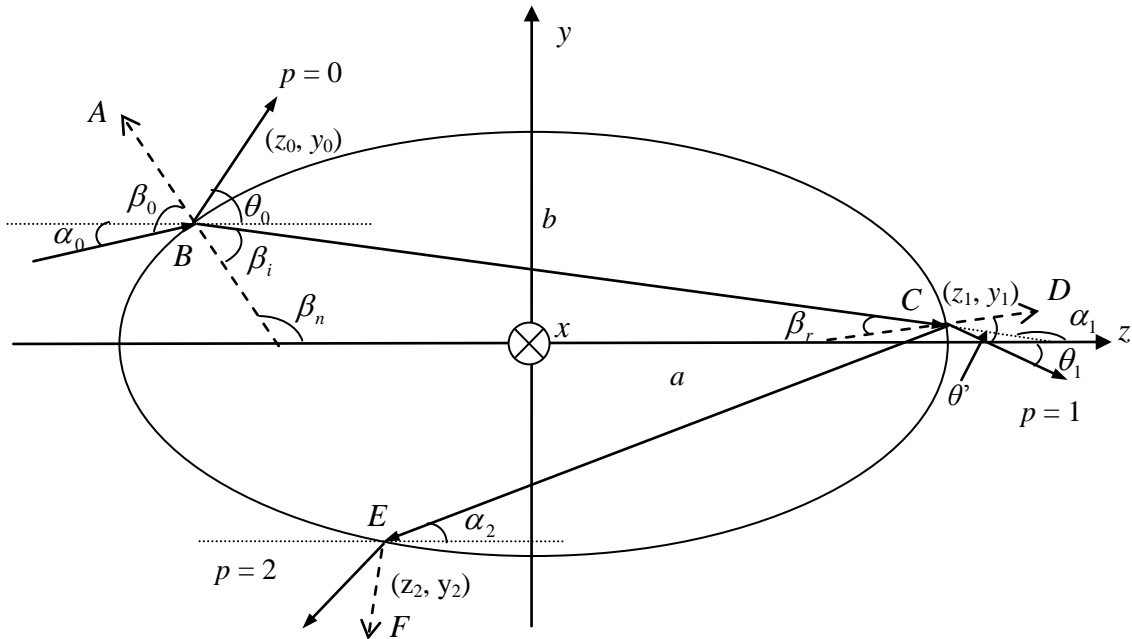


Figure 2.10 Propagation d'un rayon lumineux à l'intérieur d'un sphéroïde.

La relation entre l'angle  $\alpha_1$  et les coordonnées des points  $B(z_0, y_0)$  et  $C(z_1, y_1)$  s'écrit :

$$\tan \alpha_1 = \frac{y_1 - y_0}{z_1 - z_0} \quad (2.10)$$

Evidemment, les coordonnées du point  $C(z_1, y_1)$  doivent satisfaire l'équation de sphéroïde, c'est à dire :

$$\frac{z_1^2}{a^2} + \frac{y_1^2}{b^2} = 1 \quad (2.11)$$

A partir des deux équations précédentes, les coordonnées du point  $(z_1, y_1)$  sont obtenues :

$$z_1 = \frac{(a^2 \tan^2 \alpha_1 - b^2)z_0 - 2a^2 \tan \alpha_0 y_0}{a^2 \tan^2 \alpha_1 + b^2} \quad (2.12)$$

$$y_1 = y_0 + \tan \alpha_1 (z_1 - z_0) \quad (2.13)$$

Les mêmes expressions pour le point  $(z_p, y_p)$  s'obtiennent en fonction du point  $(z_{p-1}, y_{p-1})$  et de l'angle  $\alpha_{p-1}$ . L'angle d'incidence  $\beta_r$  du rayon réfracté  $BC$  par rapport à la normale au point d'interaction avec la surface suivant est calculé à partir du point  $(z_1, y_1)$  et de l'angle  $\alpha_1$  avec l'équation (2.5):

$$\sin \beta_r = \left| \frac{z_1 b^2 \sin \alpha_1 - y_1 a^2 \cos \alpha_1}{b \sqrt{a^4 - e^2 z_1^2}} \right| \quad (2.14)$$

L'angle de réfraction de l'ordre  $p = 1$  est déduit par la loi de Descartes :

$$\theta' = \sin^{-1}(m_r \sin \beta_r) \quad (2.15)$$

Le vecteur unitaire de la normale  $\overline{CD}$  au point  $(z_1, y_1)$  de la surface du sphéroïde s'écrit :

$$\vec{n} = \frac{z_1 b^2 \vec{e}_z + y_1 a^2 \vec{e}_y}{b \sqrt{a^4 - e^2 z_1^2}} \quad (2.16)$$

L'angle de réfraction  $\theta'$  peut être aussi calculé par la relation entre le vecteur directeur du rayon réfracté et la normale  $\overline{CD}$  :

$$\cos \theta' = n_z \cos \theta_1 + n_y \sin \theta_1 \quad (2.17)$$

avec  $\theta_1$  l'angle du rayon réfracté au point  $C$  et l'axe  $z$ . C'est aussi l'angle de diffusion pour le rayon d'ordre  $p = 0$ .

Une équation du second degré en  $\sin \theta_1$  peut être déduite à partir de l'équation (2.17) :

$$\sin^2 \theta_1 - 2n_y \cos \theta' \sin \theta_1 + \cos^2 \theta' - n_z^2 = 0 \quad (2.18)$$

Il existe deux solutions pour  $\sin \theta_1$ . Afin de choisir la solution correcte, le vecteur unitaire du rayon  $\overline{BC}$  est introduit :

$$\vec{r}_{BC} = \frac{1}{\sqrt{(z_1 - z_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}} [(z_1 - z_0) \vec{e}_z + (y_1 - y_0) \vec{e}_y] \quad (2.19)$$

Rappelons que le rayon réfracté et le rayon incident se situent de part et d'autre de la normale. La solution de  $\sin \theta_1$  sera celle qui satisfait l'expression suivante :

$$\sin \theta' \sin \beta_r = (n_z \sin \theta_1 - n_y \cos \theta_1)(n_z c_y - n_y c_z) > 0 \quad (2.20)$$

Enfin, on peut déterminer l'angle de diffusion pour le rayon d'ordre  $p = 0$ . L'angle  $\alpha_2$  entre le rayon  $\overline{CE}$  à l'intérieur du sphéroïde et l'axe  $z$  possède deux valeurs possibles :

$$\alpha_2 = \begin{cases} \alpha_1 + 2\beta_r \\ \alpha_1 - 2\beta_r \end{cases} \quad (2.21)$$

L'angle de réflexion est calculé par l'équation (2.14) en fonction du point  $(z_1, y_1)$  et  $\alpha_2$  et on prend la valeur  $\alpha_2$  qui satisfait la condition que l'angle de réflexion est égal à l'angle d'incidence. Le point d'interaction pour la deuxième interaction  $(z_2, y_2)$  est déterminé de la même façon que pour  $(z_1, y_1)$ . L'angle d'incidence de la deuxième réflexion interne est déduite de l'équation (2.14) en remplaçant  $\alpha_1$  par  $\alpha_2$  et  $(z_1, y_1)$  par  $(z_2, y_2)$ . Le processus est poursuivi de façon itérative pour les ordres supérieurs.

Quand l'onde plane incidente est inclinée comme illustré sur la figure 2.11, le problème n'est plus axisymétrique par rapport à l'axe  $z$ . Il faut donc déterminer les tracés des rayons pour  $y > 0$ , aussi bien que pour  $y < 0$ . Le diagramme de diffusion doit être calculé sur tout l'intervalle  $[0^\circ, 360^\circ]$ .

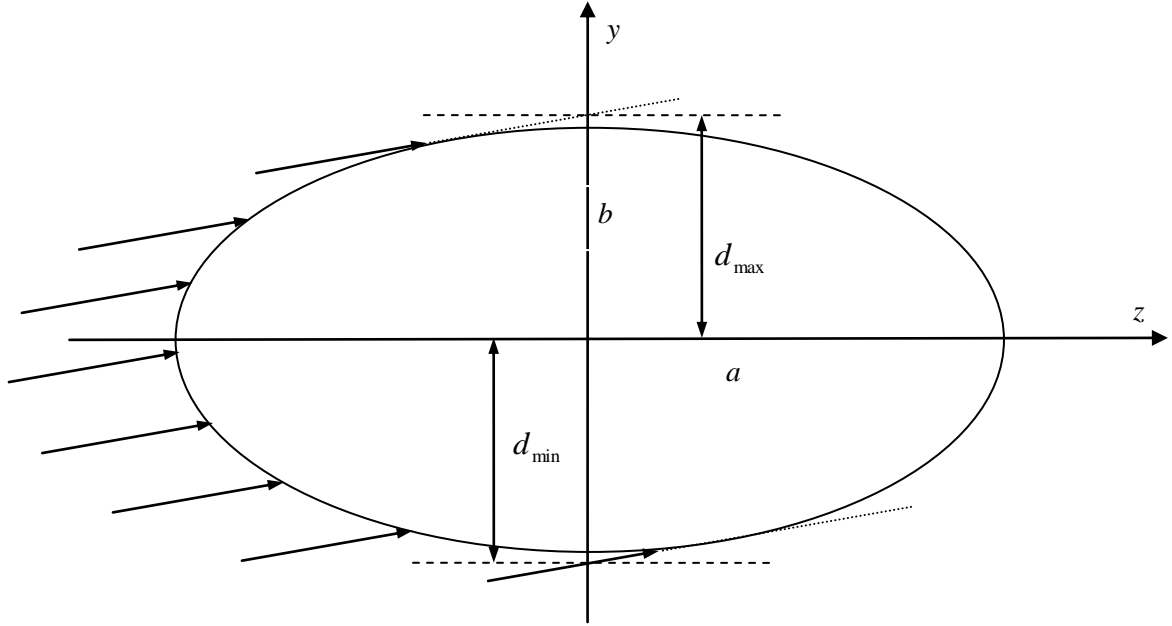


Figure 2.11 Diffusion d'une onde plane inclinée par un sphéroïde.

Chaque rayon incident peut être décrit par l'équation d'une droite :

$$y = z \tan \theta + d \quad (2.22)$$

avec  $\tan \theta$  le coefficient directeur et  $d$  l'ordonnée  $y$  à  $z = 0$ . On suppose que :

$$\theta = \alpha_0 \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \quad (2.23)$$

En insérant l'équation (2.22) dans l'équation du sphéroïde, on obtient une équation pour déterminer les points d'intersection:

$$(b^2 + a^2 \tan^2 \theta) z^2 + 2a^2 d \tan \theta z + a^2(d^2 - b^2) = 0 \quad (2.24)$$

Pour les deux extrémités, le déterminant de l'équation (2.24) est égal à zéro :

$$\Delta = (2a^2 d \tan \theta)^2 - 4a^2(b^2 + a^2 \tan^2 \theta)(d^2 - b^2) = 0 \quad (2.25)$$

Les deux extrémités du rayon incident sont données :

$$d_{\max} = \sqrt{b^2 + a^2 \tan^2 \theta}, \quad d_{\min} = -\sqrt{b^2 + a^2 \tan^2 \theta} \quad (2.26)$$

Une onde plane inclinée peut donc être décomposée en de nombreux rayons parallèles, décrits par l'équation (2.22) avec  $d \in [d_{\min}, d_{\max}]$ . Tous ces rayons incidents rencontrent la surface du sphéroïde aux points de coordonnées :

$$\begin{cases} z = \frac{-2a^2 d \tan \theta + \Delta}{2(b^2 + a^2 \tan^2 \theta)} & z > 0 \\ z = \frac{-2a^2 d \tan \theta - \Delta}{2(b^2 + a^2 \tan^2 \theta)} & z < 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

### 2.3.2 Amplitude du champ diffusé

Dans le cas d'une sphère, par symétrie et pour un rayon donné, l'angle d'incidence sur la surface interne et l'angle de réfraction en ce point restent toujours identiques au cours de sa propagation. Dans ce cas, le facteur d'amplitude du rayon peut être déduit directement à l'aide des coefficients de réflexion. En revanche, dans le cas d'une particule non sphérique, l'angle d'incidence et l'angle de réfraction changent selon l'orientation de la surface et donc la position du point d'impact. Il faut à chaque fois calculer ces deux angles, mais aussi calculer les coefficients de réflexion ou de réfraction :

$$r_{1,p} = \frac{\cos \theta_{i,p} - m_r \cos \theta_{r,p}}{\cos \theta_{i,p} + m_r \cos \theta_{r,p}}, \quad r_{2,p} = \frac{m_r \cos \theta_{i,p} - \cos \theta_{r,p}}{m_r \cos \theta_{i,p} + \cos \theta_{r,p}} \quad (2.28)$$

$$t_{1,p} = \frac{2 \cos \theta_{i,p}}{\cos \theta_{i,p} + m_r \cos \theta_{r,p}}, \quad t_{2,p} = \frac{2 \cos \theta_{i,p}}{\cos \theta_{r,p} + m_r \cos \theta_{i,p}} \quad (2.29)$$

Le facteur d'amplitude du rayon d'ordre  $p$  peut alors être calculé par :

$$\varepsilon_j = \begin{cases} r_{j,p} & \text{pour } p = 0 \\ t_{j,0} t_{j,p} \prod_{n=1}^{p-1} r_{j,p} & \text{pour } p \geq 1 \end{cases} \quad (2.30)$$

Par ailleurs, il n'y a pas d'expression analytique permettant de calculer directement la divergence  $D$  pour une particule non sphérique, car l'angle de déviation  $\theta_p'$  dépend de la forme et de l'orientation de la particule. Puisque l'angle d'incidence ainsi que la divergence ou la convergence d'onde changent à chaque fois que le rayon rencontre la surface, les calculs du facteur de divergence et le déphasage dû aux lignes focales sont délicats.

Afin de réexaminer la définition de la divergence, on considère un rayon lumineux d'intensité  $I_i$  arrivant sur une aire  $ds_j$  de la surface de la particule. Après une ou plusieurs interactions avec la surface de la particule, il émerge dans un angle solide  $d\Omega$ . Puisqu'il y a conservation de l'énergie, on obtient les relations suivantes :

$$I_i ds_j \cos \theta_i = I_j r^2 d\Omega = I_j r^2 \sin \theta_p d\theta_p d\varphi_j \quad (2.31)$$

où  $I_i, I_j$  représentent respectivement les intensités incidente et diffusée,  $\theta_i$  est l'angle d'incidence par rapport à la normale locale de la surface,  $ds_j$  est l'élément de la surface éclairée,  $r$  est la distance du point d'observation,  $d\Omega$  est l'angle solide du rayon émergeant et  $\theta_p$  est l'angle de diffusion.

L'élément de la surface éclairée  $ds_j$  est calculé par (voir la figure 2.12):

$$ds_j = y_j dl_j d\varphi_j \quad (2.32)$$

où  $dl_j$  est la longueur de l'arc de l'élément éclairé.

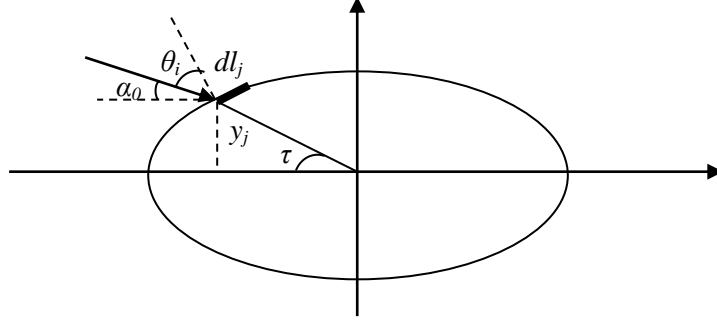


Figure 2.12 Géométrie pour la redéfinition de la divergence  $D$  d'un sphéroïde.

En insérant l'équation (2.32) dans l'équation (2.31), on obtient :

$$I_j = \frac{I_i y_j dl_j d\varphi_j \cos \theta_i}{r^2 \sin \theta_p d\theta_p d\varphi_j} = \frac{I_i}{(kr)^2} D_j \quad (2.33)$$

et pour l'expression analytique du facteur de divergence :

$$D_j = \frac{k^2 y_j \cos \theta_i}{\sin \theta_p \left| \frac{d\theta_p}{dl_j} \right|} \quad (2.34)$$

Dans le cas d'une sphère, on a  $y_j = a \sin \tau$ ,  $dl_j = a d\tau$ , et l'expression précédente peut être écrite comme :

$$D_j = \frac{(ka)^2 \sin \tau \cos \theta_i}{\sin \theta_p \left| \frac{d\theta_p}{d\tau} \right|} \quad (2.35)$$

avec  $\tau$  l'angle de position défini par le point d'interaction  $(z_0, y_0)$  comme :

$$\tau = \tan^{-1} \left( \frac{y_0}{z_0} \right) \quad (2.36)$$

On retrouve l'équation (1.15) définie par Van de Hulst, au paramètre de taille  $ka$  près, déjà inclus.

### 2.3.3 Phase d'un rayon

Comme dans le cas d'une sphère, trois types de déphasage doivent être pris en compte : le déphasage dû au chemin optique  $\phi_{p,PH}$ , le déphasage dû à la réflexion totale  $\phi_{j,TOT}$  et le déphasage dû aux lignes focales  $\phi_{p,FL}$ . Le déphasage  $\phi_{p,PH}$  peut être calculé directement par la longueur du trajet dans le sphéroïde.

Pour le rayon réfléchi, le déphasage dû au trajet est calculé par :

$$\phi_{0,PH} = k \sqrt{z_0^2 + y_0^2 - \frac{(y_0 - z_0 \tan \alpha_0)^2}{\tan^2 \alpha_0}} + k \sqrt{z_0^2 + y_0^2 - \frac{(y_0 - z_0 \tan \theta_0)^2}{\tan^2 \theta_0}} \quad (2.37)$$

Pour le rayon réfracté ( $p \geq 1$ ), le déphasage dû au trajet devient :



$$\phi_{p,PH} = k \sqrt{z_0^2 + y_0^2 - \frac{(y_0 - z_0 \tan \alpha_0)^2}{\tan^2 \alpha_0}} - km_r L_p + k \sqrt{z_p^2 + y_p^2 - \frac{(y_p - z_p \tan \theta_p)^2}{\tan^2 \theta_p}} \quad (2.38)$$

avec  $L_p$  la longueur totale du trajet du rayon à l'intérieur du sphéroïde.

Pour la diffusion par un sphéroïde éclairé sur l'axe de symétrie, par une onde plane, ou par un faisceau gaussien, le déphasage  $\phi_{p,FL}$  peut être déterminé par le nombre d'intersections à l'intérieur et à l'extérieur du sphéroïde, comme dans le cas d'une sphère.

Dans le cas du tracé de rayons à l'intérieur d'une gouttelette sphéroïdale, il peut y avoir des réflexions totales à l'intérieur de la particule. L'angle d'incidence sur la surface interne de la particule doit alors être comparé à chaque fois à l'angle critique pour vérifier si une réflexion totale se produit. Si une réflexion totale a lieu pour le rayon de l'ordre  $p$ , il n'y aura pas de rayon émergent. Un déphasage supplémentaire  $\phi_{j,TOT}$  doit cependant être ajouté à la phase du rayon réfléchi.

### 2.3.4 Diffraction

Pour le cas d'un sphéroïde éclairé par une onde plane inclinée, la diffraction peut être traitée en considérant le sphéroïde comme un disque elliptique perpendiculaire au faisceau incident. Dans ce cas, les deux rayons équivalents de l'ellipse sont :

$$A = (a^2 \sin^2 \alpha_0 + b^2 \cos^2 \alpha_0)^{1/2} \quad (2.39)$$

$$B = b \quad (2.40)$$

où  $a$  et  $b$  sont les rayons de révolution et transversal,  $\alpha_0$  est l'angle d'incidence. Pour un rapport d'aspect modéré, l'amplitude du champ diffracté vers l'avant en champ lointain est donnée par [25]:

$$S_d = k^2 AB \frac{J_1(kA\theta)}{kA\theta} \quad (2.41)$$

avec  $\theta = \theta_s - \alpha_0$  et  $\theta_s$  l'angle de diffusion.

### 2.3.5 Champ total diffusé par un sphéroïde

En tenant compte les rayons de tous les ordres et la diffraction, le champ total diffusé s'écrit :

$$S_j = S_d + \sum_{p=0}^{\infty} kR\epsilon_j \sqrt{D} \xi_p \exp[i\phi_{p,PH} + i\phi_{p,FL} + (i\phi_{j,TOT})] \quad (2.42)$$

où  $R$  représente le rayon de projection avec  $R = b$ .

## 2.4 Problèmes liés au calcul de la divergence et du déphasage dû aux lignes focales

Etudions la procédure de calcul numérique de la divergence pour une sphère éclairée par une onde plane inclinée. Le test de cohérence le plus simple consiste à changer l'angle d'inclinaison du

faisceau incident : le diagramme doit alors subir une translation le long de l'axe des abscisses sans changer de forme.

### 2.4.1 Première définition de la divergence

Dans un premier temps, on examine si la définition de la divergence donnée par l'équation (2.34) peut être appliquée au cas d'incidence inclinée.

Le diagramme de diffusion d'une sphère éclairée par une onde plane avec un angle d'incidence de  $0^\circ$  est montré sur la figure 2.13. Sans surprise, la courbe est totalement symétrique par rapport à  $180^\circ$ . Puis on incline l'onde plane incidente d'un angle  $\alpha_0 = 30^\circ$ , le diagramme de diffusion est illustré sur la figure 2.14. La courbe ne reste pas de la même forme que sur la figure 2.13 et elle n'est pas symétrique non plus. Ceci montre que cette définition de la divergence n'est pas correcte et qu'il faut la redéfinir.

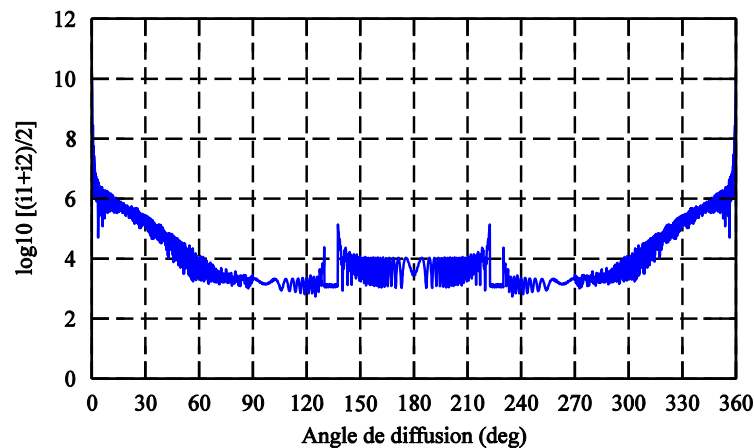


Figure 2.13 Diagramme de diffusion calculé avec la première définition de la divergence pour une sphère de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 632.8\mu\text{m}$ . La diffraction est prise en compte.

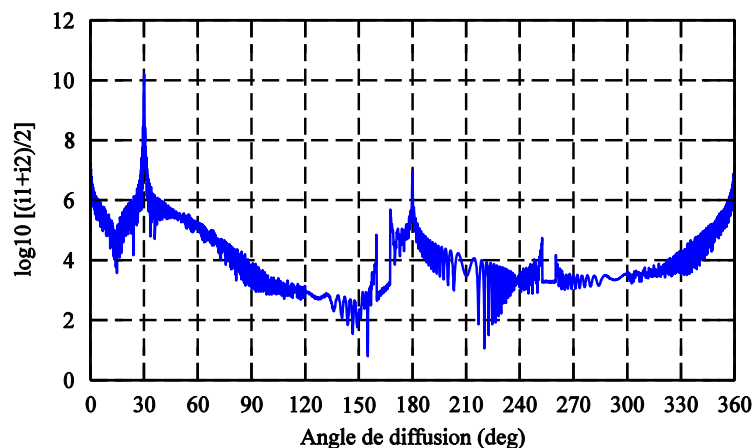


Figure 2.14 Même cas que pour la figure 2.13 mais pour une onde plane faisant un angle d'incidence de  $\alpha_0 = 30^\circ$ .

### 2.4.2 Deuxième définition de la divergence

En fait, la définition précédente ne prend pas du tout en compte l'angle d'incidence de l'onde qui éclaire la sphère. Pour en tenir compte, on doit ajouter l'angle d'incidence  $\alpha_0$  de l'onde incidente par rapport à l'axe  $z$  (voir figure 2.15) dans la formule de la divergence. Celle-ci devient :

$$D_j = \frac{a^2 \sin \theta_i \cos \theta_i}{\sin(\theta_p - \alpha_0) \left| \frac{d\theta_p}{d\theta_i} \right|} \quad (2.43)$$

La dérivée  $\frac{d\theta_p}{d\theta_i}$  peut être calculée numériquement en considérant le rayon voisin du rayon  $j$  :

$$D_j = \frac{a^2 \sin \theta_i \cos \theta_i}{\sin(\theta_p - \alpha_0) \left| \frac{\theta_{p,j} - \theta_{p,j-1}}{\theta_{i,j} - \theta_{i,j-1}} \right|} \quad (2.44)$$

Lorsqu'on étend cette définition de la divergence au cas d'un sphéroïde, le rayon  $a$  est remplacé par la distance entre le point d'interaction et le centre de la particule  $r_j$  et l'angle d'incidence  $\theta_i$  est remplacé par l'angle entre  $r_j$  et l'axe de propagation  $\tau$ . La divergence devient alors:

$$D_j = \frac{r_j^2 \cos \tau \sin \tau}{\sin(\theta_p - \alpha_0) \left| \frac{d\theta_p}{d\tau} \right|} = \frac{r_j^2 \cos \tau \sin \tau}{\sin(\theta_p - \alpha_0) \left| \frac{\theta_{p,j} - \theta_{p,j-1}}{\tau_j - \tau_{j-1}} \right|} \quad (2.45)$$

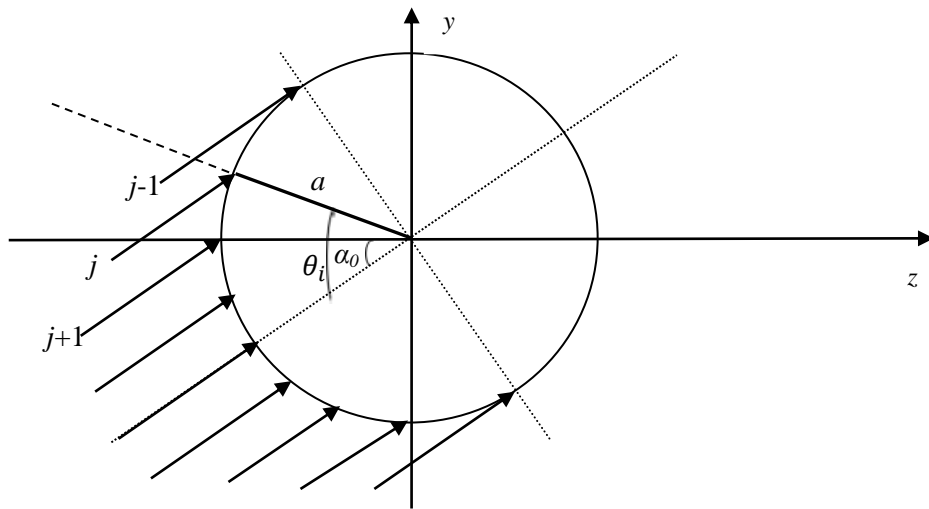


Figure 2.15 Géométrie de la deuxième définition de la divergence pour le cas d'une sphère.

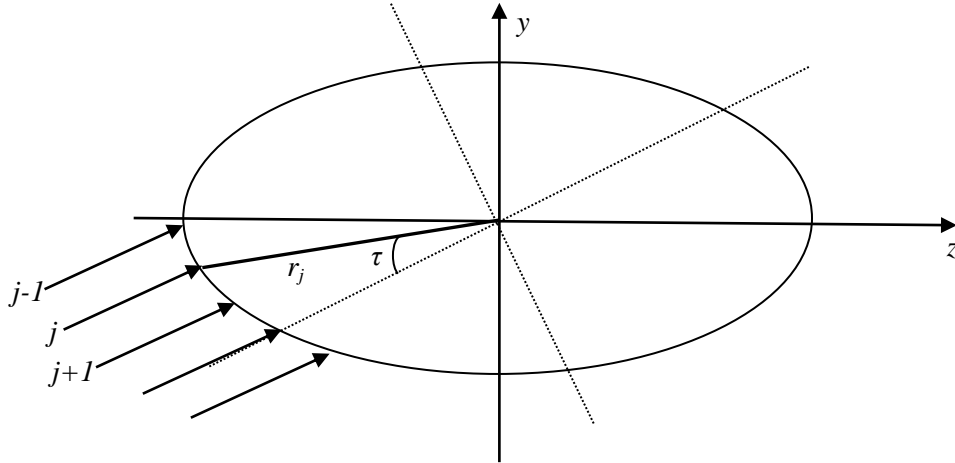


Figure 2.16 Géométrie de la deuxième définition de la divergence pour le cas d'un sphéroïde.

La figure 2.17 montre le diagramme de diffusion d'une sphère éclairée par une onde plane inclinée, on peut constater que la deuxième définition de la divergence fonctionne bien pour une sphère.

Appliquons maintenant cette définition au calcul de la diffusion par un sphéroïde. Les figures 2.18 et 2.19 montrent les diagrammes de diffusion d'un sphéroïde allongé de caractéristiques  $a = 50 \mu m$  et  $b = 100 \mu m$ , et d'un sphéroïde aplati de caractéristiques  $a = 200 \mu m$  et  $b = 100 \mu m$ , éclairé par une onde plane inclinée avec le même angle d'incidence de  $30^\circ$ . Théoriquement, les pics dans le diagramme de diffusion représentent les arcs-en-ciel de différents ordres. En comparant ces deux figures, on trouve qu'il existe aussi des pics qui ne peuvent pas être expliqués physiquement aux angles  $\alpha_0$  et  $\pi + \alpha_0$ .

La figure 2.20 représente le diagramme de diffusion d'un sphéroïde aplati éclairé par une onde plane inclinée avec un autre angle d'incidence ( $60^\circ$ ). De la même façon que pour les cas des figures 2.18 et 2.19, des pics absolument pas attendus aux mêmes positions angulaires apparaissent. La deuxième définition de la divergence ne fonctionne donc pas correctement pour une particule non sphérique.

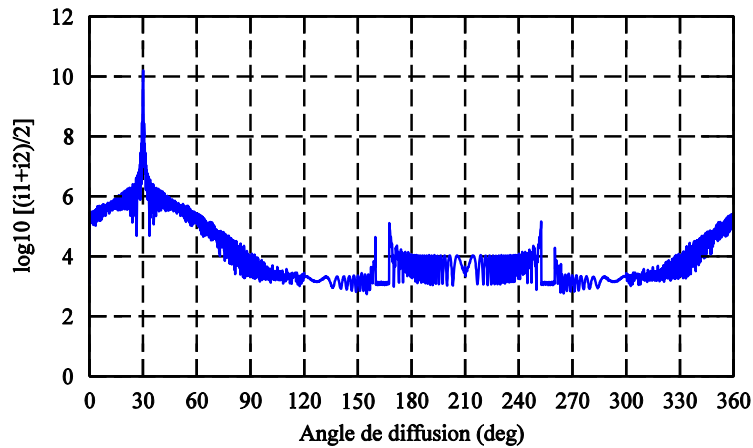
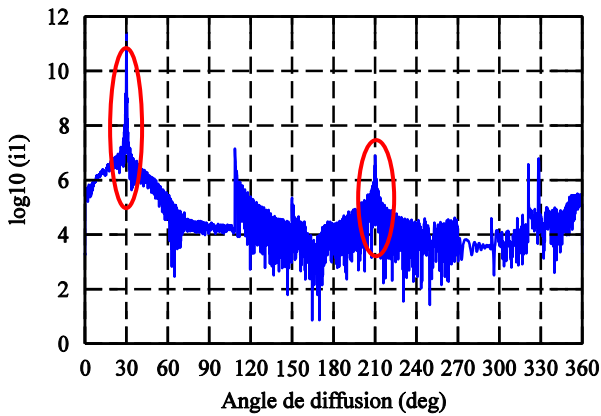
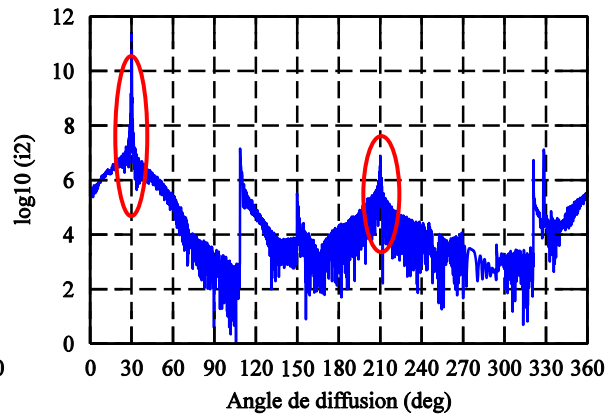


Figure 2.17 Diagramme de diffusion calculé avec la deuxième définition de la divergence pour une sphère de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane inclinée non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 632.8\mu\text{m}$  et d'angle d'incidence  $\alpha_0 = 30^\circ$ . La diffraction est déjà prise en compte.

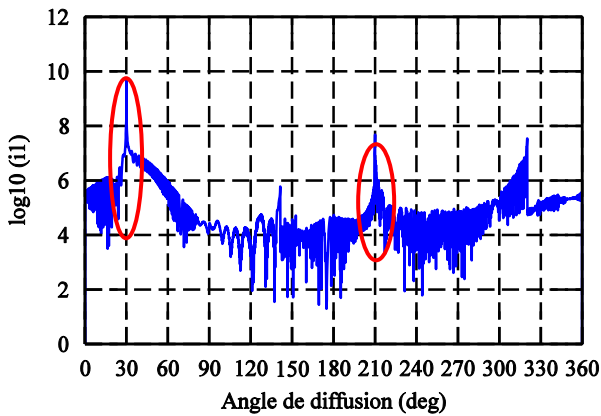


(a) Polarisation perpendiculaire

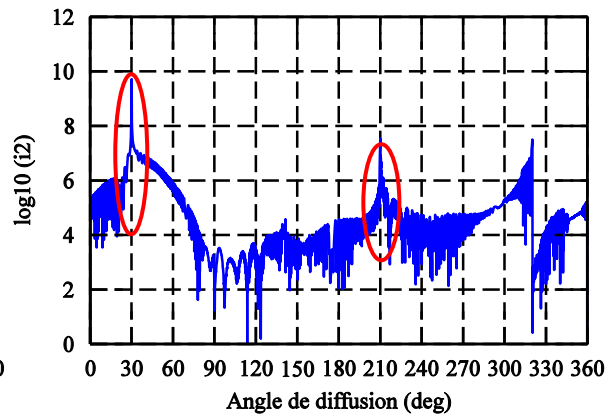


(b) Polarisation parallèle

Figure 2.18 Diagrammes de diffusion calculés avec la deuxième définition de la divergence pour un sphéroïde de rayon de révolution  $a = 50\mu\text{m}$ , rayon transversal  $b = 100\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairé par une onde plane inclinée de longueur d'onde  $\lambda = 632.8\mu\text{m}$  et d'angle d'incidence  $\alpha_0 = 30^\circ$ . La diffraction n'est pas prise en compte.



(a) Polarisation perpendiculaire



(b) Polarisation parallèle

Figure 2.19 Diagrammes de diffusion calculés avec la deuxième définition de la divergence pour un sphéroïde de rayon de révolution  $a = 200\mu\text{m}$ , rayon transversal  $b = 100\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairé par une onde plane inclinée de longueur d'onde  $\lambda = 632.8\mu\text{m}$  et d'angle d'incidence  $\alpha_0 = 30^\circ$ . La diffraction n'est pas prise en compte.

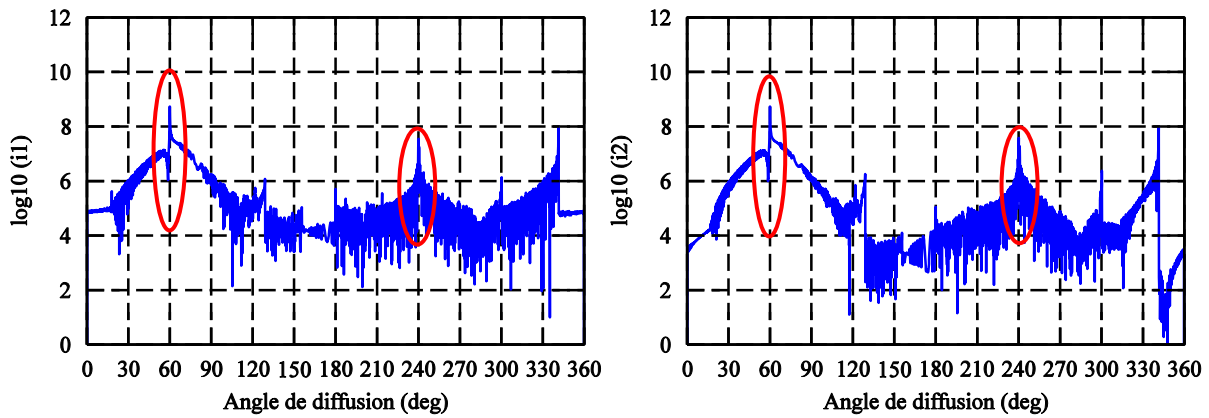


Figure 2.20 Même cas que pour la figure 2.19 mais pour un angle d'incidence de  $\alpha_0 = 60^\circ$ .

### 2.4.3 Troisième définition de la divergence

Le problème dans la deuxième définition est dû au fait que la normale à la surface au point considéré ne coïncide pas avec le vecteur de position  $\vec{r}_j$ . Pour y remédier, on redéfinit les deux paramètres  $r_j$  et  $\tau$  comme suit :  $r_j$  est le rayon de courbure locale de la surface au point considéré et  $\tau$  est l'angle entre la direction du rayon incident et le rayon de courbure locale (voir figure 2.21). On détermine la courbure en utilisant la procédure numérique suivante :

A chaque interaction d'un rayon lumineux avec la surface, on calcule les normales de deux points de la surface correspondant à deux rayons voisins et on cherche l'intersection de ces deux normales. En fonction de la position de cette intersection, on déduit la courbure de la surface et on calcule  $r_j$ . Puis on applique la formule suivante pour déterminer le facteur de divergence :

$$D_j = \frac{r_j \sin \tau \cos \tau}{\sin(\theta_p - \alpha_0) \left| \frac{d\theta_p}{dl_j} \right|} \quad (2.46)$$

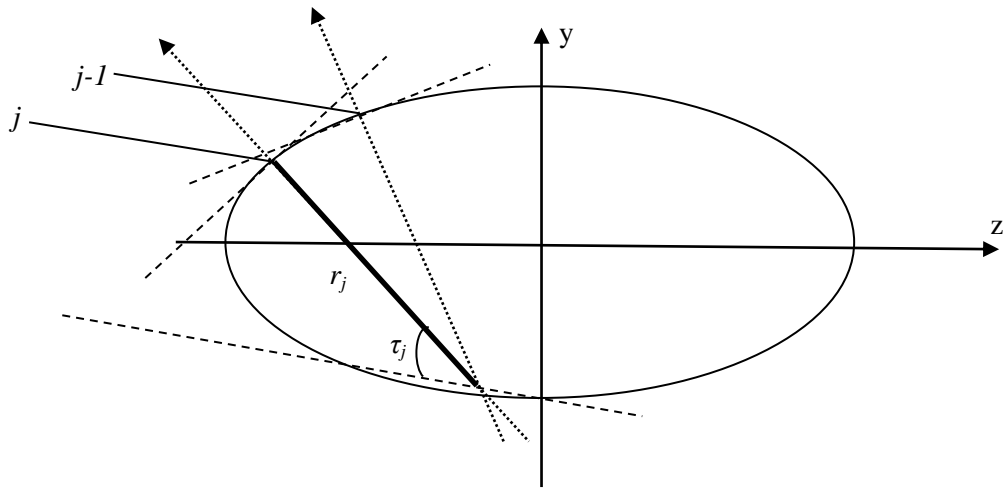


Figure 2.21 Géométrie de la troisième définition de la divergence.

Les calculs analytiques montrent que cette définition est valide pour une sphère. Par contre, lorsqu'on l'applique au cas d'un sphéroïde, des pics non physiques existent toujours comme montré sur les figures 2.18-2.20.

Malgré les efforts pour trouver des expressions correctes pour calculer la divergence, on s'aperçoit que la notion de divergence de l'onde doit être complètement repensée : le déphasage dû aux lignes focales  $\phi_{p,FL}$  ne peut pas être calculé avec la même méthode que pour une sphère. Pour étudier la diffusion par une particule de forme complexe, il faut développer une méthode plus générale pour les calculs du facteur de divergence  $D$  et du déphasage dû aux lignes focales  $\phi_{p,FL}$ . Ce sera l'objet du chapitre suivant.

## 2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons fait une étude sur l'évaluation des effets dus à la nature ondulatoire de la lumière sur le diagramme de diffusion comme la diffraction, la divergence ou la convergence de l'onde, les interférences et le déphasage dû aux lignes focales. Il est montré que tous les effets étudiés jouent des rôles importants sur la diffusion. Afin d'étendre le problème à la diffusion d'une onde plane inclinée par un sphéroïde, on a réexaminé la diffusion par un sphéroïde éclairé par une onde plane sur l'axe, puis sous un certain angle. On constate que les calculs de la divergence ou la convergence de l'onde et du déphasage dû aux lignes focales deviennent très difficiles ou impossibles pour une particule non sphérique. Différentes définitions du facteur  $D$  ont été introduites, mais il apparaît toujours des pics irraisonnables pour certains angles. Ceux-ci sont dus très probablement à la divergence ou la convergence transversale de l'onde perpendiculaire au plan de diffusion. Il faut donc trouver une méthode plus générale pour déterminer correctement la divergence et le déphasage dû aux lignes focales. Pour ce faire, nous introduirons dans le chapitre suivant le modèle de tracé de rayons

vectoriels complexes [24-25], qui peut prédire la diffusion de la lumière par un objet de forme quelconque et de surface lisse.





# Chapitre 3 : Tracé de rayons vectoriels complexes

## 3.1 Introduction

Nous avons montré dans le chapitre précédent qu'une simple extension de l'optique géométrique, basé sur le calcul numérique du facteur de divergence et du déphasage dû aux lignes focales, ne peut pas prédire correctement la diffusion de la lumière par une particule non sphérique de forme relativement simple : un sphéroïde éclairé par une onde plane inclinée. Il est évidemment impossible de penser à l'appliquer à des objets de forme plus complexe. Il faut donc envisager une méthode radicalement différente.

Ren et al [24-25] ont développé récemment un nouveau modèle appelé: Tracé de Rayons Vectoriels Complexes (TRVC). Dans ce modèle, un rayon lumineux est caractérisé non seulement par sa direction de propagation, son amplitude complexes et sa polarisation, mais aussi par les rayons de courbure du front d'onde. Le facteur de divergence et le déphasage dû aux lignes focales sont déduits naturellement par les rayons de courbure.

Le modèle de TRVC sera décrit en détail dans ce chapitre. Après sa validation pour une sphère par comparaison avec les théories rigoureuses, il sera utilisé pour prédire la diffusion par un sphéroïde éclairé par (1) une onde plane sur l'axe, (2) une onde plane inclinée et (3) un faisceau gaussien circulaire.

## 3.2 Présentation du modèle

Le modèle de TRVC traite la diffusion de la lumière par un objet de surface lisse et de forme quelconque. Dans ce modèle, une onde est décrite par un ensemble de rayons vectoriels complexes. Chaque rayon  $q$  est caractérisé par quatre paramètres : l'amplitude  $A_q$ , la phase  $\phi_q$ , la direction de propagation  $\vec{k}$  et la polarisation  $X$  (perpendiculaire ou parallèle) ainsi que deux rayons de courbure du front d'onde :

$$\vec{S}_{qX} = A_{qX} e^{i\phi_q} \vec{k} \quad (3.1)$$

Après chaque interaction du rayon lumineux avec la surface de l'objet, la direction et les rayons de courbure du front d'onde sont calculés par la loi de Snell vectorielle et par l'équation des fronts d'onde. Au final, le champ total diffusé peut être obtenu par une superposition des amplitudes complexes des rayons de tous les ordres émergents de l'objet.

### 3.2.1 Direction de propagation d'un rayon

La direction de propagation d'un rayon en optique géométrique est caractérisée par le vecteur d'onde et peut être calculée selon les lois de Snell-Descartes qui décrivent le comportement de la lumière à l'interface entre deux milieux. Pour éviter l'ambiguïté concernant le signe des angles et pour faciliter le tracé de rayons en 3D, les lois de Snell-Descartes sont écrites sous forme vectorielle, ce qui permet d'exprimer les vecteurs directeurs des rayons réfléchi et réfracté à partir du rayon incident :

$$(\vec{k}' - \vec{k}) \wedge \vec{n} = \vec{0} \quad (3.2)$$

où  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  sont respectivement les vecteurs du rayon incident et du rayon réfracté ou réfléchi,  $\vec{n}$  est la normale de la surface de l'objet.

Cette loi peut être écrite plus explicitement comme :

$$k'_\tau = k_\tau \quad (3.3)$$

L'indice  $\tau$  est rapporté à la composante tangentielle du vecteur d'onde. Pour la réflexion, la composante normale du vecteur d'onde vaut donc :

$$k'_n = -\sqrt{k^2 - k_\tau^2} \quad (3.4)$$

Pour la réfraction,  $k'_n$  devient :

$$k'_n = \sqrt{k'^2 - k_\tau^2} \quad (3.5)$$

Le vecteur  $\vec{k}'$  est déduit de la connaissance des composantes  $k'_n$  et  $k'_\tau$ .

### 3.2.2 Equation des fronts d'onde

On choisit deux vecteurs  $\vec{t}_1$  et  $\vec{t}_2$  non colinéaires dans le plan tangent à la surface du front d'onde et deux vecteurs  $\vec{s}_1$  et  $\vec{s}_2$  non colinéaires dans le plan tangent au dioptre. La courbure du front d'onde de l'onde incidente est décrite par une matrice (2×2) notée  $Q$  dans le repère  $(\vec{t}_1, \vec{t}_2)$  et celle du dioptre est décrite par une matrice (2×2) notée  $C$  dans le repère  $(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$  (voir figure 3.1). Dans le modèle de TRVC, la courbure du front d'onde de l'onde après l'interaction du rayon avec la surface de l'objet est déduite de la courbure du front d'onde de l'onde avant l'interaction et celle du dioptre, par l'équation des fronts d'onde suivante [57-58]:

$$(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{n} C = k' \theta'^T Q' \theta' - k \theta^T Q \theta \quad (3.6)$$

où  $\theta$  et  $\theta'$  sont respectivement les matrices de projection de  $(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$  sur  $(\vec{t}_1, \vec{t}_2)$  et sur  $(\vec{t}'_1, \vec{t}'_2)$ . L'indice  $T$  signifie la transposée de la matrice. Les lettres sans et avec prime représentent respectivement les paramètres avant et après l'interaction.

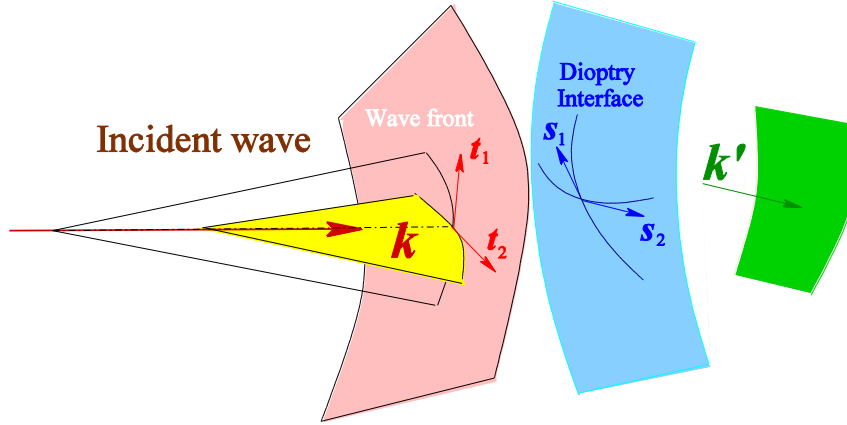


Figure 3.1 Géométrie des fronts d'onde de l'onde et du dioptre.

Dans le cas d'une particule présentant un plan de symétrie, éclairée par une onde ayant le même plan de symétrie, tous les rayons incidents passant par l'axe de symétrie de la particule dans ce plan restent dans le même plan. C'est le cas pour un sphéroïde éclairé par une onde plane par exemple. Les courbures de la surface dioptrique peuvent être décrites par la matrice de courbure :

$$C = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\rho_2} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

où  $\rho_1, \rho_2$  sont les rayons de courbure de la surface dans les deux directions principales.

Un rayon lumineux est représenté localement par une onde avec deux rayons de courbure le long de deux directions principales. Dans chacun des plans contenant une direction principale et la direction de propagation, le rayon se comporte comme une onde sphérique. Pour l'onde incidente, la matrice de courbure du front d'onde peut être écrite comme :

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{R_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{R_2} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

où  $R_1, R_2$  sont respectivement les rayons de courbure du front d'onde dans le plan symétrie et perpendiculaire à celui-ci avant l'interaction.

De façon similaire, la matrice de courbure du front d'onde après l'interaction s'écrit :

$$Q' = \begin{pmatrix} \frac{1}{R'_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{R'_2} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

avec  $R'_1, R'_2$  les rayons de courbure du front d'onde après l'interaction.

L'équation des fronts d'onde (3.6) peut être simplifiée en deux équations scalaires :

$$\frac{k' \cos^2 \theta_r}{R'_1} = \frac{k \cos^2 \theta_i}{R_1} + \frac{k' \cos \theta_r - k \cos \theta_i}{\rho_1} \quad (3.10)$$

$$\frac{k'}{R'_2} = \frac{k}{R_2} + \frac{k' \cos \theta_r - k \cos \theta_i}{\rho_2} \quad (3.11)$$

avec  $\theta_i, \theta_r$  les angles d'incidence et de réflexion.

Pour la réflexion, on a les relations  $k' = -k, \theta_r = \theta_i$  et les équations (3.10-3.11) deviennent :

$$-\frac{\cos \theta_i}{R'_1} = \frac{\cos \theta_i}{R_1} - \frac{2}{\rho_1} \quad (3.12)$$

$$\frac{1}{R'_2} = -\frac{1}{R_2} + \frac{2 \cos \theta_i}{\rho_1} \quad (3.13)$$

Les courbures du front d'onde de l'onde après l'interaction  $R'_1, R'_2$  peuvent être déterminées par les équations (3.10-3.11) pour la réfraction et par les équations (3.12-3.13) pour la réflexion.

### 3.2.3 Amplitude complexe d'un rayon

Pour déterminer l'amplitude complexe d'un rayon, il faut calculer les termes d'amplitude et de phase.

#### 3.2.3.1 Convention pour le signe de la courbure

Chaque fois que l'onde est réfractée ou réfléchiée par la surface, les rayons de courbure du front d'onde  $R'_{1j}, R'_{2j}$  sont déduits par les équations des fronts d'onde. Les positions des centres du front d'onde (points focaux) dans les deux directions par rapport au point d'interaction peuvent être déduites selon les signes des rayons de courbure. Il convient de choisir une convention commune pour la définition des signes du rayon de courbure du front d'onde de l'onde et du dioptre. Nous posons  $R > 0$  pour une onde divergente et  $R < 0$  pour une onde convergente. Le signe de rayon de courbure du dioptre est déterminé par le produit scalaire entre le vecteur d'onde  $\vec{k}$  et le vecteur de la normale à la surface  $\vec{n}$ .

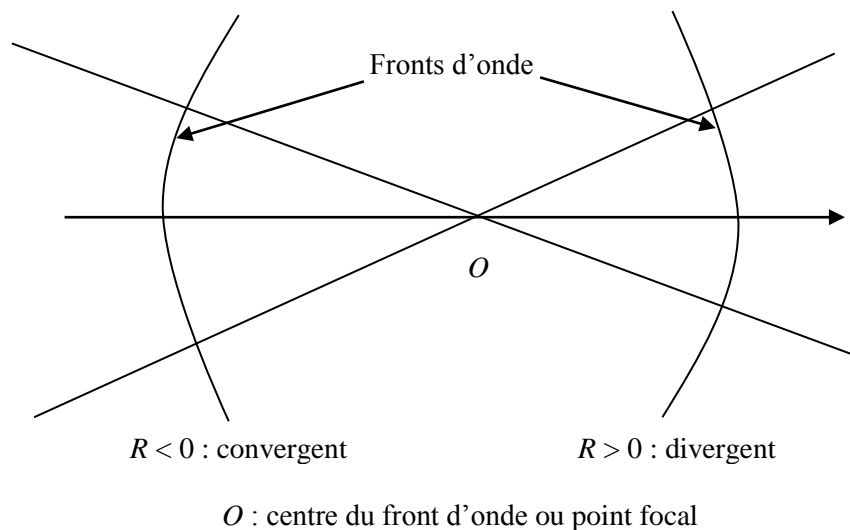


Figure 3.2 Convention de signe pour la courbure du front d'onde d'une onde.

### 3.2.3.2 Amplitude d'un rayon

L'amplitude d'un rayon  $q$  de polarisation  $X$  (perpendiculaire ou parallèle) est déterminé par le facteur de divergence  $D_q$  et le coefficient de Fresnel  $\varepsilon_X$  selon :

$$A_{qX} = \sqrt{D_q} |\varepsilon_X| \quad (3.14)$$

Le facteur de divergence d'un rayon qui subit  $q$  interactions avec la surface de l'objet est déterminé par les rayons de courbure du front d'onde comme :

$$D = \frac{R'_{11}R'_{21}}{R_{12}R_{22}} \cdot \frac{R'_{12}R'_{22}}{R_{13}R_{23}} \dots \frac{R'_{1q}R'_{2q}}{(r + R'_{1q})(r + R'_{2q})} \quad (3.15)$$

où  $r$  est la distance d'observation,  $R_{1j}, R_{2j}$  et  $R'_{1j}, R'_{2j}$  ( $j = 1 \dots q$ ) sont les deux rayons de courbure principaux du front d'onde avant et après la  $j^{\text{ème}}$  interaction avec la surface de la particule.

### 3.2.3.3 Phase d'un rayon

Afin de prendre en compte les interférences entre les rayons de différents ordres, la phase de chaque rayon doit être calculée. Quatre types de déphasage doivent être pris en compte : i) le déphasage du faisceau incident de forme convergent ou divergent  $\phi_{inc}$  ; ii) le déphasage dû au trajet optique  $\phi_{PH}$  qui peut être calculé directement par le chemin optique; iii) le déphasage dû aux lignes focales  $\phi_{FL}$  et iv) le déphasage due à la réflexion et à la réfraction  $\phi_{RR}$ . La phase totale d'un rayon est alors calculée par :

$$\phi_q = \frac{\pi}{2} + \phi_{inc} + \phi_{PH} + \phi_{FL} + (\phi_{RR}) \quad (3.16)$$

Selon Van de Hulst, quand le rayon passe une ligne focale, un déphasage de  $\pi/2$  doit être ajouté.

## 3.3 Validation du modèle pour une sphère

Le facteur de divergence et le déphasage dû aux lignes focales ont été comparés numériquement avec les résultats de l'OG pour une sphère et ils sont en bon accord. Afin de valider nos codes de calcul, les diagrammes de diffusion par une sphère seront comparés avec ceux obtenus par les théories rigoureuses de type Lorenz-Mie (TLM). Il faut noter que la diffraction vers l'avant est ajoutée comme pour l'optique géométrique. Les figures 3.3-3.4 illustrent les comparaisons entre les deux méthodes pour une gouttelette d'eau dans l'air et une bulle d'air dans l'eau éclairées par une onde plane.

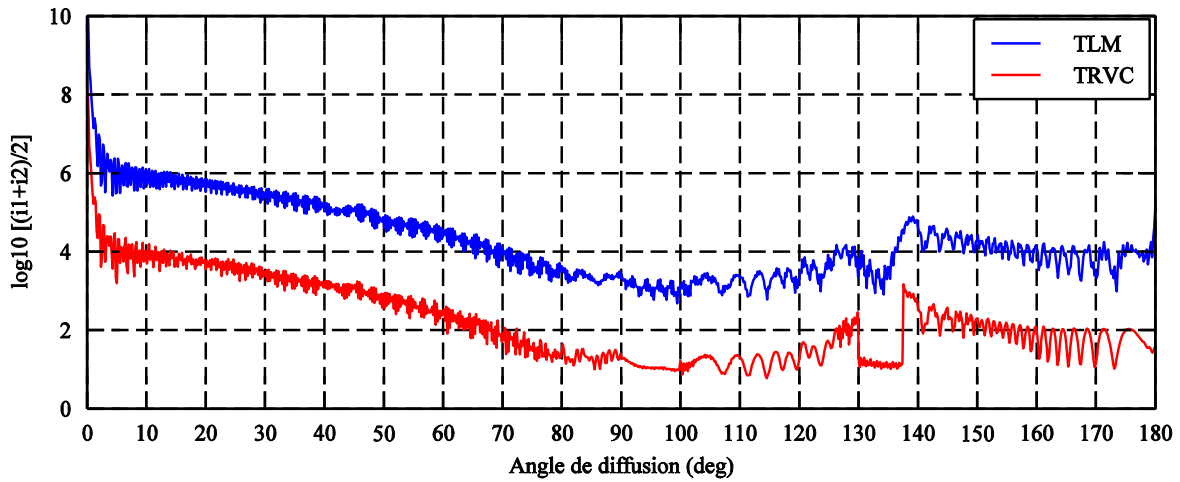


Figure 3.3 Comparaison des distributions d'intensité calculées par TRVC et par TLM pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 50 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Pour la comparaison, le résultat de TRVC a été décalé par un facteur  $10^2$ .

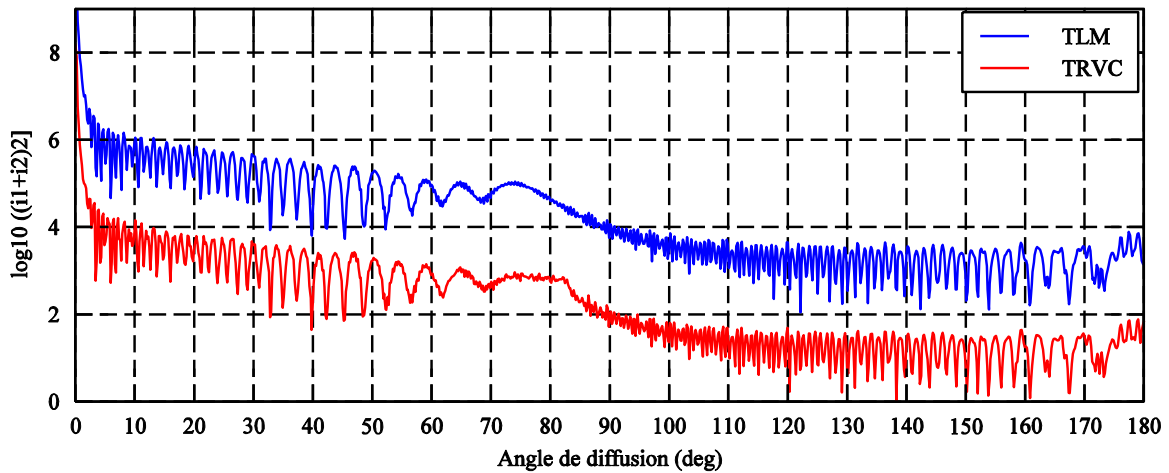


Figure 3.4 Même cas que pour la figure 3.3 mais pour une bulle sphérique d'indice de réfraction  $m = 0.75$ .

Selon les deux figures ci-dessus, on peut constater que le modèle TRVC peut prédire précisément le diagramme de diffusion, sauf aux alentours de l'angle d'arc-en-ciel  $138^\circ$  pour une gouttelette et près de l'angle critique de diffusion  $82^\circ$  pour une bulle. Pour ces angles, la diffraction et peut être les ondes de surface, dont on ne tient pas compte ici, jouent certainement un rôle important [59].

Les comparaisons des diagrammes de diffusion pour les mêmes particules mais éclairées par un faisceau gaussien circulaire, calculés par le modèle TRVC et par la théorie de Lorenz-Mie généralisée (TLMG), sont montrées sur les figures 3.5-3.6.

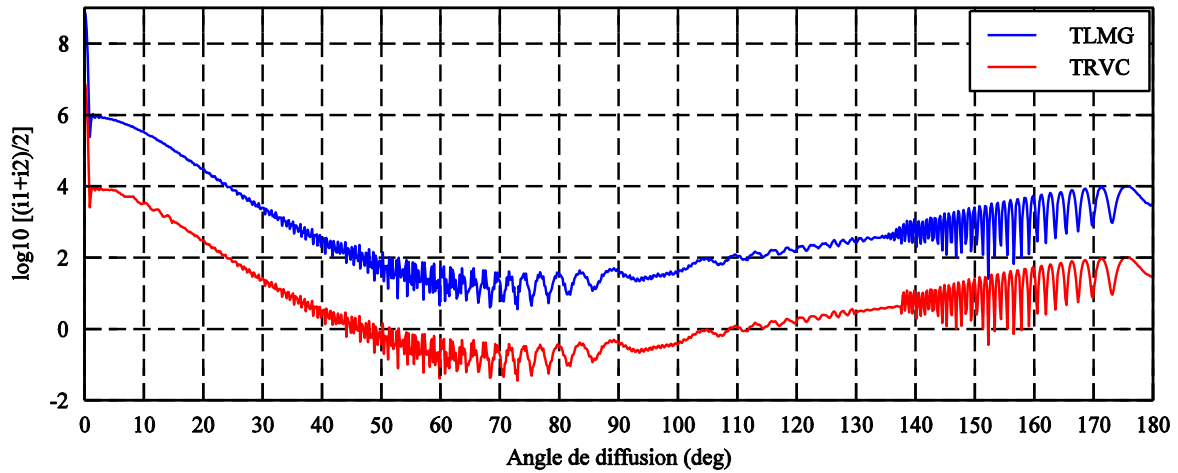


Figure 3.5 Comparaison des distributions d'intensité calculées par TRVC et par TLMG pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 50 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par un faisceau gaussien circulaire non polarisée de col  $w_0 = 25 \mu\text{m}$  et de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . La particule est située sur le centre du faisceau. Pour la comparaison, le résultat de TRVC a été décalé par un facteur  $10^2$ .

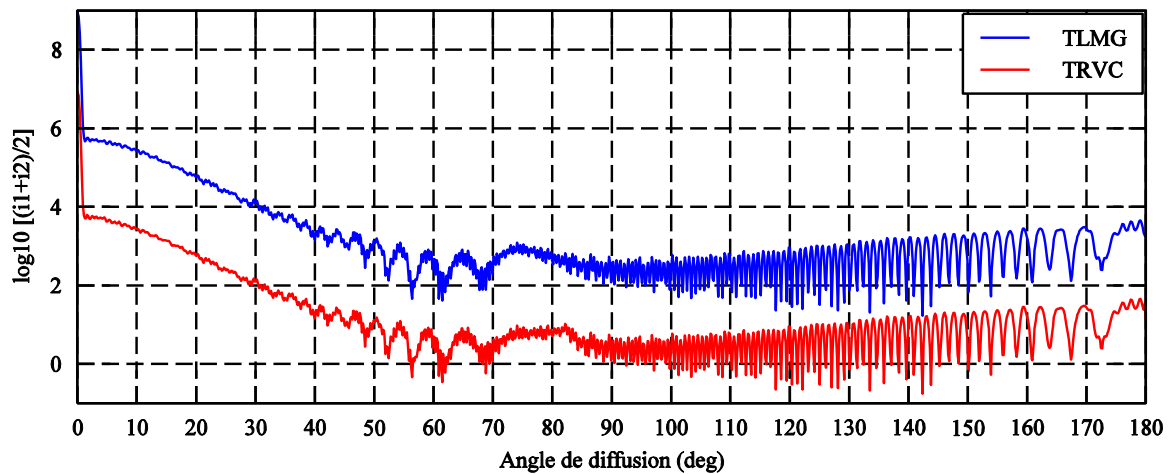


Figure 3.6 Même cas que pour la figure 3.5 mais pour une bulle sphérique d'indice de réfraction  $m = 0.75$ .

On constate ici aussi que l'accord entre les deux méthodes est quasi parfait. En comparant avec les figures 3.3-3.4, on trouve que les diagrammes de diffusion sont différents quand la particule est éclairée par un faisceau gaussien de rayon plus petit que celui de la sphère. Plus précisément, l'intensité diffusée est plus faible et l'amplitude des oscillations est moins forte. Par ailleurs, les pics d'arc-en-ciel sont quasiment invisibles. Ceci est dû au fait que le faisceau incident est centré sur l'axe de la particule et le rayon local du faisceau incident est plus petit que celui de la sphère.



### 3.4 Application du modèle à la diffusion par un sphéroïde

On considère un sphéroïde de rayon de révolution  $a$  suivant l'axe  $z$  et de rayon transversal  $b$  est éclairé par une onde plane inclinée qui se propage dans le plan  $yz$  avec un angle d'incidence  $\alpha_0$  par rapport à l'axe  $z$  (voir figure 3.7).

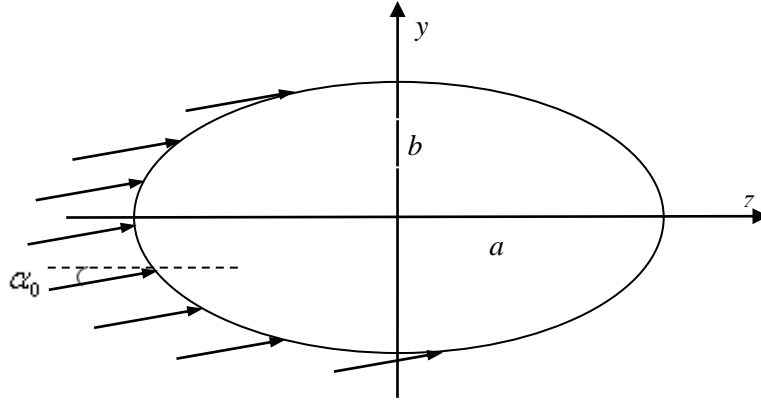


Figure 3.7 Diffusion par un sphéroïde éclairé par une onde plane inclinée.

Deux rayons de courbure principaux du sphéroïde sont [25]:

$$\rho_1 = a^2 b^2 \left( \frac{z^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4} \right)^{3/2} \quad (3.17)$$

$$\rho_2 = b^2 \left( \frac{z^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4} \right)^{1/2} \quad (3.18)$$

Pour le cas d'une sphère ( $a = b$ ), les deux équations ci-dessus deviennent  $\rho_1 = \rho_2 = a$ .

#### 3.4.1 Cas d'une onde plane sur l'axe

Maintenant, on s'intéresse à la diffusion par un sphéroïde, car c'est le cas le plus simple d'une particule non sphérique.

Les diagrammes de diffusion d'une gouttelette sphéroïdale de même rayon transversal  $b = 50 \mu m$  et de différents rayons de révolution, pour les deux états de polarisation, sont illustrés sur les figures 3.8-3.9. On peut voir que les distributions d'intensité diffusée dépendent beaucoup du rapport d'aspect du sphéroïde. Plus précisément, les positions des arcs-en-ciel sont très sensibles à la forme de la particule. Pour la sphère de rayon  $a = 50 \mu m$ , les positions des arcs-en-ciel de premier et de second ordre se situent près de  $138^\circ$  et  $130^\circ$  respectivement. Pour le sphéroïde de rayon de révolution  $a = 55 \mu m$ , les positions des arcs-en-ciel des deux premiers ordres se trouvent près de  $148^\circ$  et  $128^\circ$ . Pour le sphéroïde de rayon de révolution  $a = 100 \mu m$ , ils sont près de  $120^\circ$  et  $171^\circ$  respectivement. Pour la gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 45 \mu m$ , les positions des arcs-en-ciel de premier et de second ordre se trouvent quasiment au même endroit, près de  $129^\circ$ , alors que l'arc-en-ciel de quatrième ordre est observé près de  $176^\circ$ . Pour la gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25$

$\mu\text{m}$ , les deux premiers d'arc-en-ciel sont visibles près de  $99^\circ$  et  $160^\circ$  et on peut aussi observer l'arc-en-ciel de troisième ordre près de  $70^\circ$ .

On sait que les angles d'arc-en-ciel sont des caractéristiques de goutte. En comparant les diagrammes de diffusion des sphéroïdes de différentes formes, on voit que les positions d'arc-en-ciel dépendent non seulement de l'indice de réfraction, mais aussi de la forme de la particule.

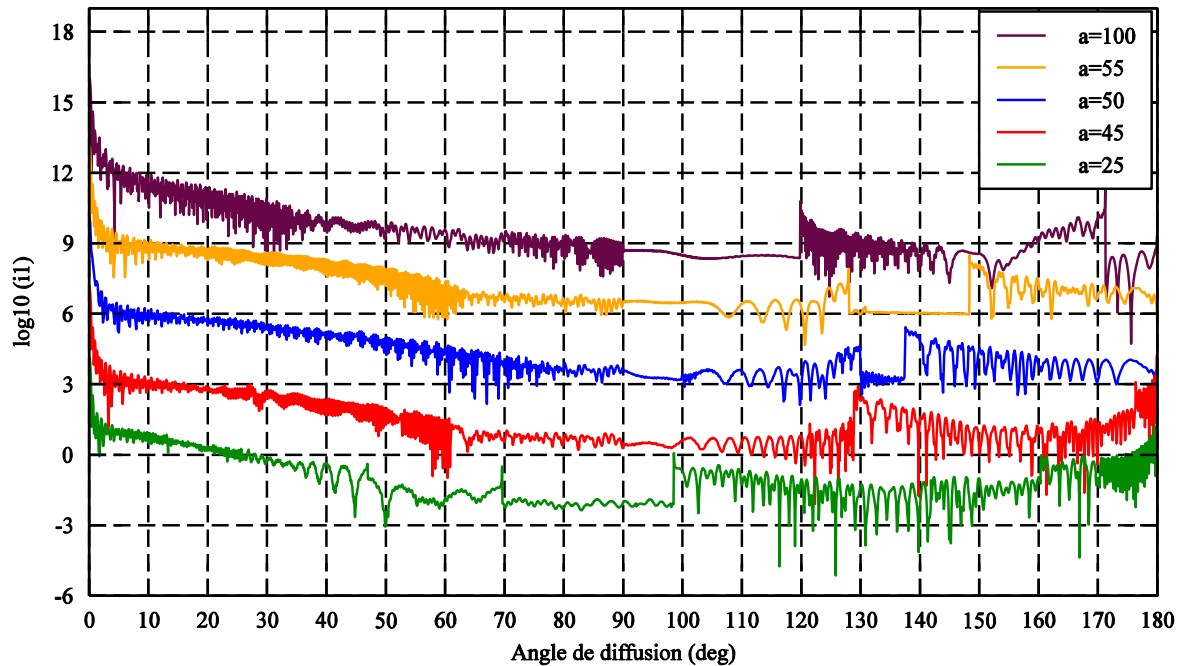


Figure 3.8 Diagrammes de diffusion pour la polarisation perpendiculaire calculés par TRVC pour des gouttelettes sphéroïdales de même rayon transversal  $b = 50 \mu\text{m}$ , de différent rayon de révolution  $a = 100 \mu\text{m}$ ,  $55 \mu\text{m}$ ,  $50 \mu\text{m}$ ,  $45 \mu\text{m}$  et  $25 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ . Les résultats pour  $a = 100 \mu\text{m}$ ,  $55 \mu\text{m}$ ,  $45 \mu\text{m}$  et  $25 \mu\text{m}$  ont été décalés de facteurs  $10^6$ ,  $10^3$ ,  $10^{-3}$  et  $10^{-6}$  pour pouvoir les comparer.

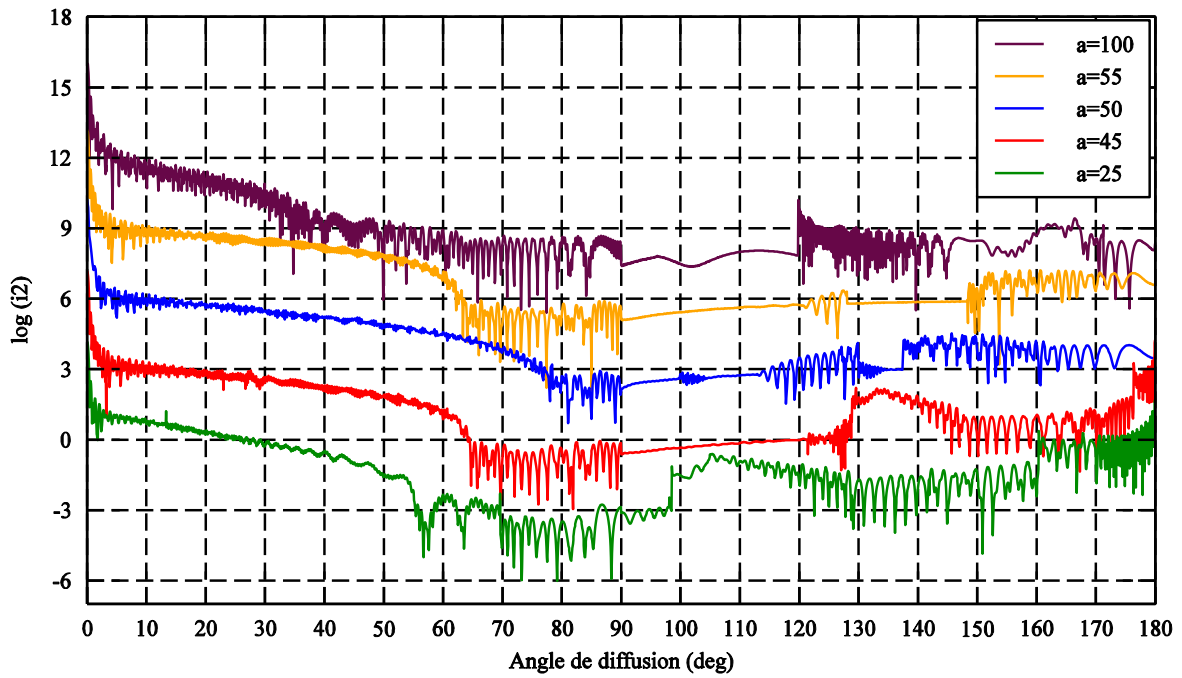


Figure 3.9 Même cas que pour la figure 3.8 mais pour la polarisation parallèle.

Les figures 3.10-3.11 présentent les diagrammes de diffusion des bulles sphéroïdales de différents rapports d'aspect. Pour des bulles, les angles critiques de diffusion correspondent aux rayons lumineux réfléchis par la surface de particule quand ses angles d'incidence sont proches de l'angle de réflexion totale. A partir des deux figures ci-dessous, on trouve que l'angle critique de diffusion  $\varphi_c = \pi - 2 \sin^{-1}(m) = 82.82^\circ$  ne dépend pas de la forme de bulle, mais dépend uniquement de son indice de réfraction.

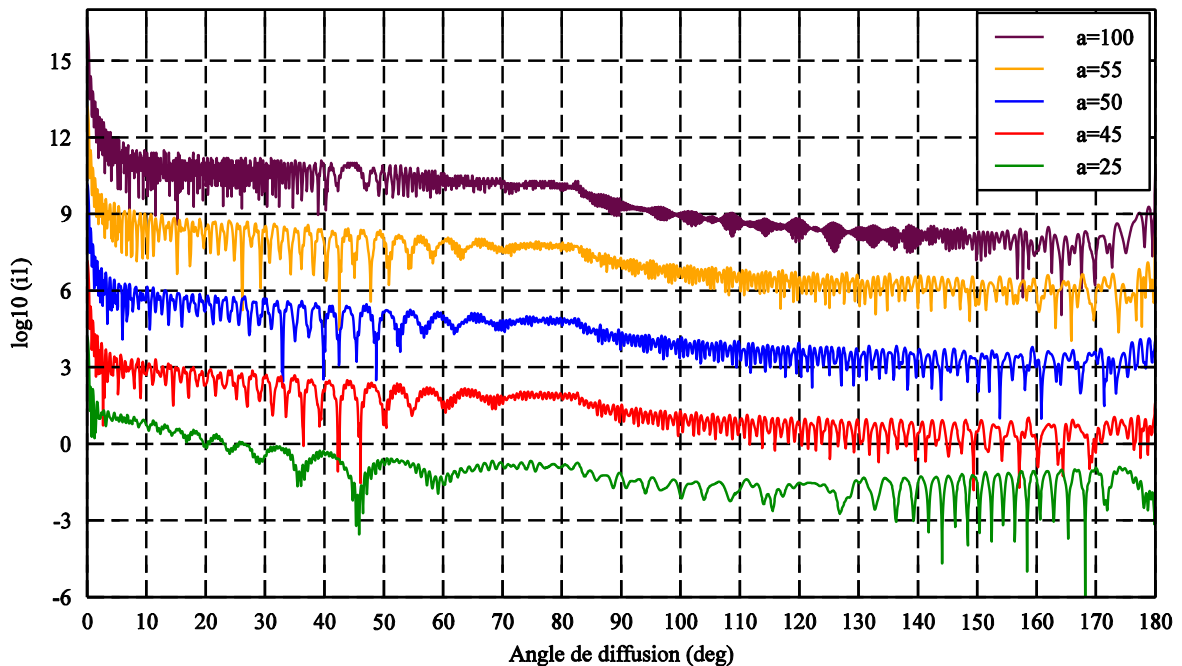


Figure 3.10 Diagrammes de diffusion pour la polarisation perpendiculaire calculés par TRVC pour des bulles sphéroïdales de même rayon transversal  $b = 50\mu\text{m}$ , de différent rayon de révolution  $a = 100\mu\text{m}$ ,

$55\mu\text{m}$ ,  $50\mu\text{m}$ ,  $45\mu\text{m}$  et  $25\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 0.75$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Les résultats pour  $a = 100\mu\text{m}$ ,  $55\mu\text{m}$ ,  $45\mu\text{m}$  et  $25\mu\text{m}$  ont été décalés de facteurs  $10^6$ ,  $10^3$ ,  $10^{-3}$  et  $10^{-6}$  pour pouvoir les comparer.

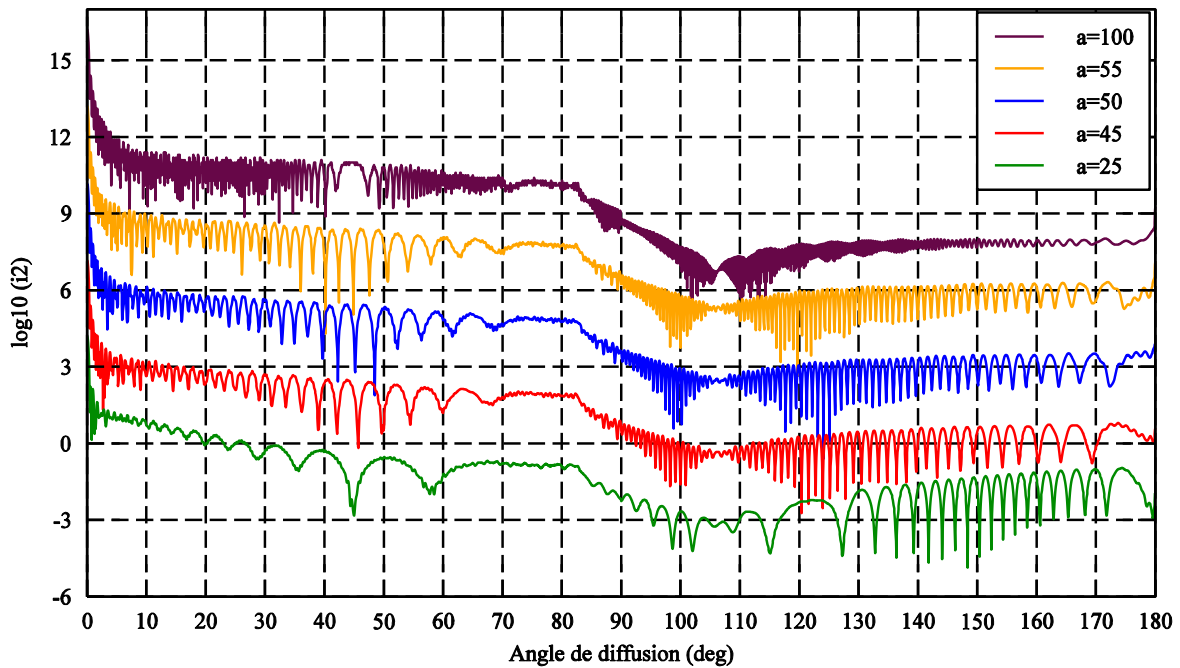


Figure 3.11 Même cas que pour la figure 3.10 mais pour la polarisation parallèle.

### 3.4.2 Cas d'une onde plane inclinée

Le modèle a été étendu au cas plus général : celui d'une onde incidente oblique. Dans ce cas, le diagramme de diffusion n'est plus symétrique. La distribution d'intensité diffusée sera calculée de  $0^\circ$  à  $360^\circ$ . Les figures 3.12-3.13 montrent les diagrammes de diffusion d'une gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25 \mu\text{m}$  et de rayon transversal  $b = 50 \mu\text{m}$  éclairée par une onde plane inclinée sous différents angles d'incidence pour les deux composantes de polarisation. La distribution d'intensité diffusée varie avec l'angle d'incidence. Lorsque l'angle d'incidence augmente, on voit que les arcs-en-ciel se déplacent vers l'arrière.

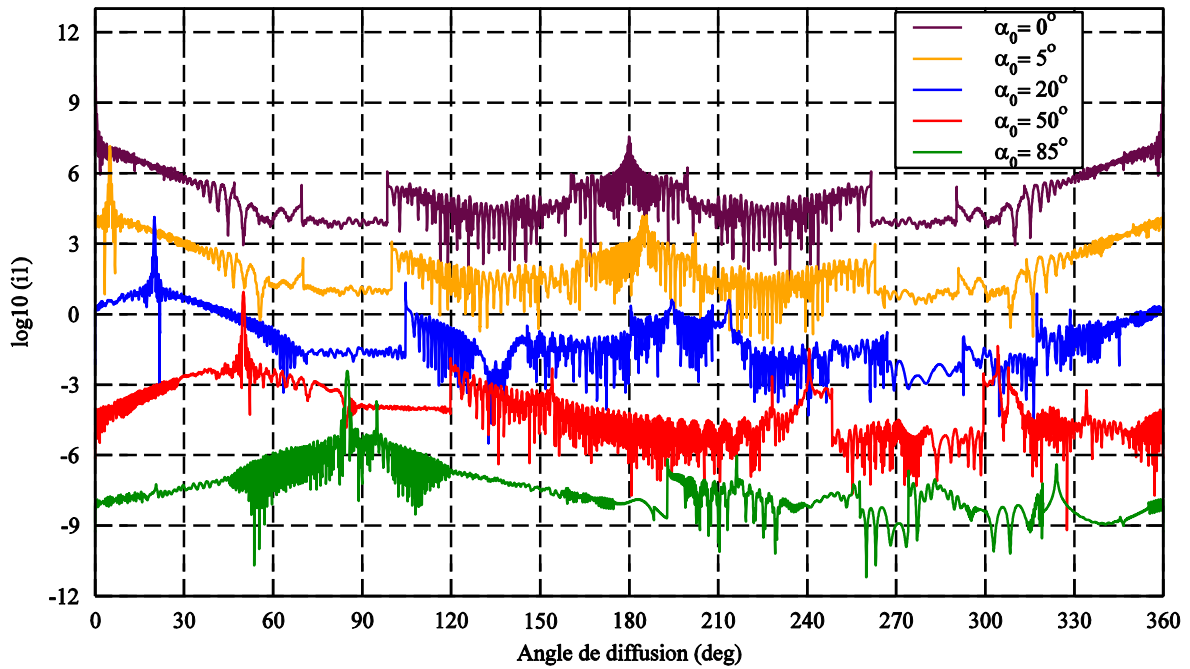


Figure 3.12 Diagrammes de diffusion pour la polarisation perpendiculaire calculés par TRVC pour une gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25\mu m$ , de rayon transversal  $b = 50\mu m$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane inclinée de différents angles d'incidence  $\alpha_0 = 0^\circ, 5^\circ, 20^\circ, 50^\circ, 85^\circ$  et de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu m$ . Les résultats pour  $\alpha_0 = 5^\circ, 20^\circ, 50^\circ$  et  $85^\circ$  ont été décalés de facteurs  $10^{-3}, 10^{-6}, 10^{-9}$  et  $10^{-12}$  pour pouvoir les comparer.

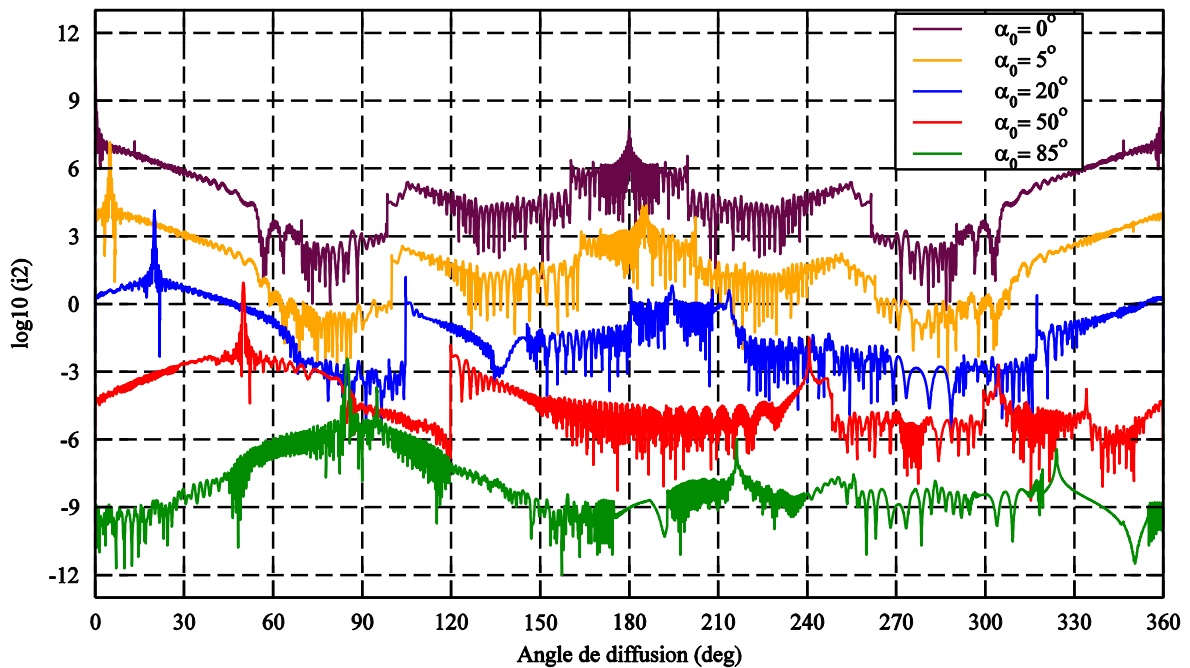


Figure 3.13 Même cas que pour la figure 3.12 mais pour la polarisation parallèle.

Le cas d'une bulle sphéroïdale éclairée par une onde plane sous différents angles d'incidence a été aussi étudié (voir les figures 3.14-3.15).

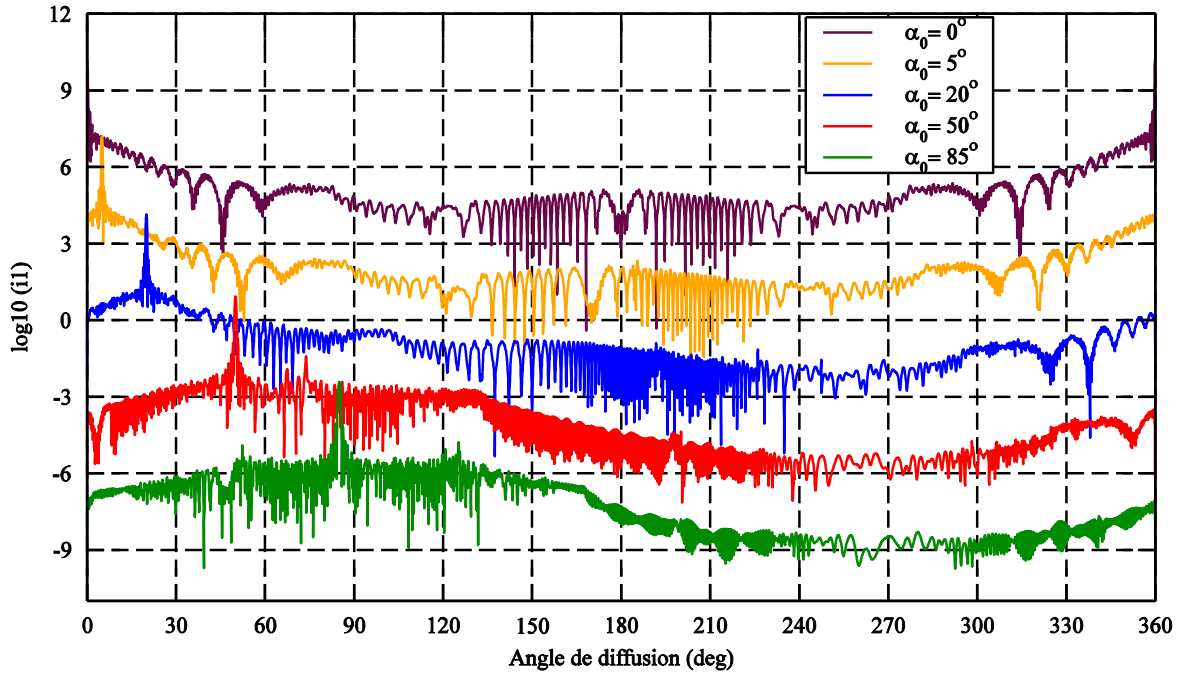


Figure 3.14 Diagrammes de diffusion pour la polarisation perpendiculaire calculés par TRVC pour une bulle sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25\mu\text{m}$ , de rayon transversal  $b = 50\mu\text{m}$  et d'indice réfraction  $m = 0.75$  éclairée par une onde plane inclinée de différents angles d'incidence  $\alpha_0 = 0^\circ, 5^\circ, 20^\circ, 50^\circ, 85^\circ$  et de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Les résultats pour  $\alpha_0 = 5^\circ, 20^\circ, 50^\circ$  et  $85^\circ$  ont été décalés de facteurs  $10^{-3}, 10^{-6}, 10^{-9}$  et  $10^{-12}$  pour faciliter la lecture.

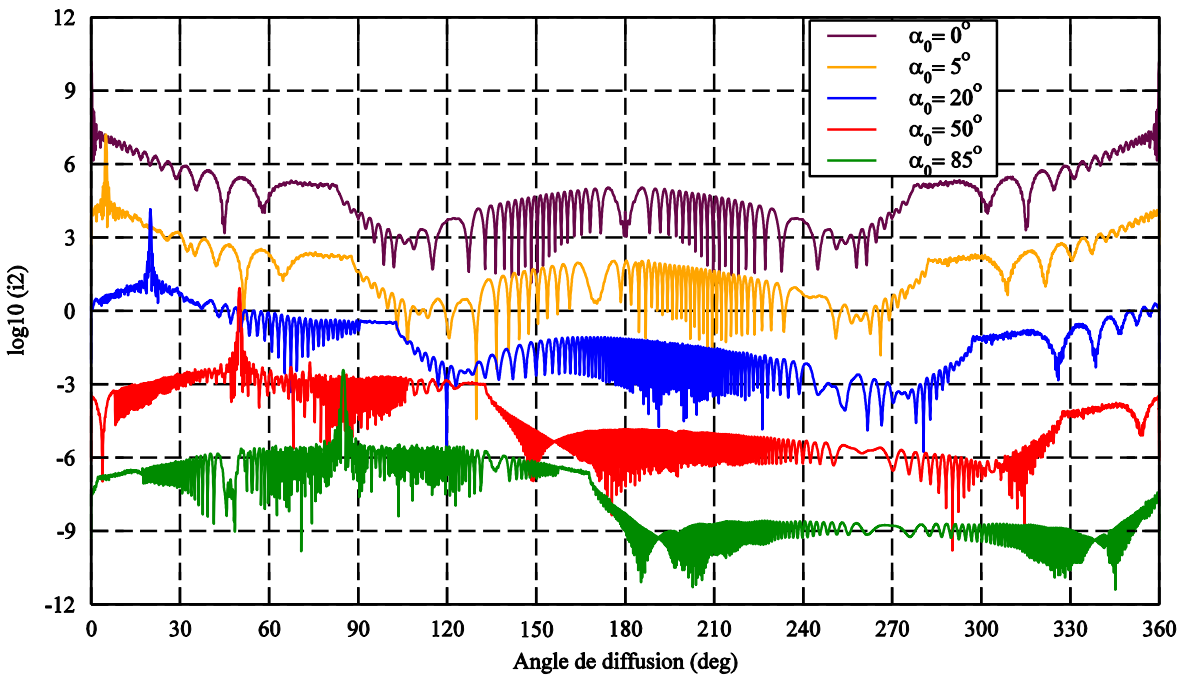


Figure 3.15 Même cas que pour la figure 3.14 mais pour la polarisation parallèle.

### 3.4.3 Cas d'un éclairage sur l'axe par un faisceau gaussien circulaire

Dans le cas d'un sphéroïde, la phase incidente du faisceau incident  $\phi_G$  devient :

$$\phi_G = \phi_i - k \left[ d + \sqrt{z_0^2 + y_0^2 - \frac{(y_0 - z_0 \tan \alpha_0)^2}{\tan^2 \alpha_0 + 1}} \right] \quad (3.19)$$

Les figures 3.16-3.17 montrent les diagramme de diffusion des gouttelettes sphéroïdales de différents rapports d'aspect éclairées par un faisceau gaussien circulaire pour les deux états de polarisation. En comparant avec les figures 3.8-3.9 obtenues dans le cas d'une onde plane, le phénomène de l'arc-en-ciel est moins visible car l'intensité du faisceau incident est concentrée sur l'axe de la particule. Plus précisément, seul l'arc-en-ciel de premier ordre est visible pour les sphéroïdes de rayon de révolution  $a = 100 \mu m$ ,  $55 \mu m$ ,  $50 \mu m$  et  $45 \mu m$ . Pour le sphéroïde de rayon de révolution  $a = 25 \mu m$ , l'arc-en-ciel de deuxième ordre ne peut pas être observé vers l'arrière, mais l'arc-en-ciel de troisième ordre se retrouve près de  $70^\circ$ .

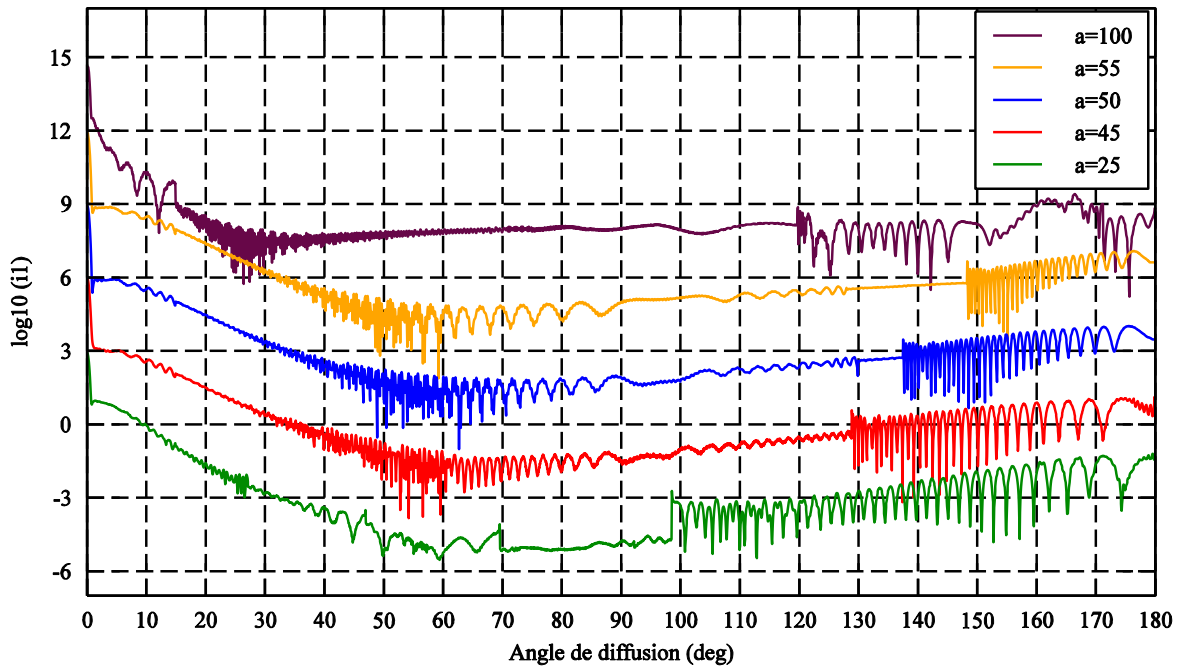


Figure 3.16 Diagrammes de diffusion pour la polarisation perpendiculaire calculés par TRVC pour des gouttelettes sphéroïdales de même rayon transversal  $b = 50 \mu m$ , de différent rayon de révolution  $a = 100 \mu m$ ,  $55 \mu m$ ,  $50 \mu m$ ,  $45 \mu m$  et  $25 \mu m$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par un faisceau gaussien circulaire de col  $w_0 = 25 \mu m$  et de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu m$ . Les résultats pour  $a = 100 \mu m$ ,  $55 \mu m$ ,  $45 \mu m$  et  $25 \mu m$  ont été décalés par les facteurs de  $10^6$ ,  $10^3$ ,  $10^{-3}$  et  $10^{-6}$  pour faciliter la lecture.

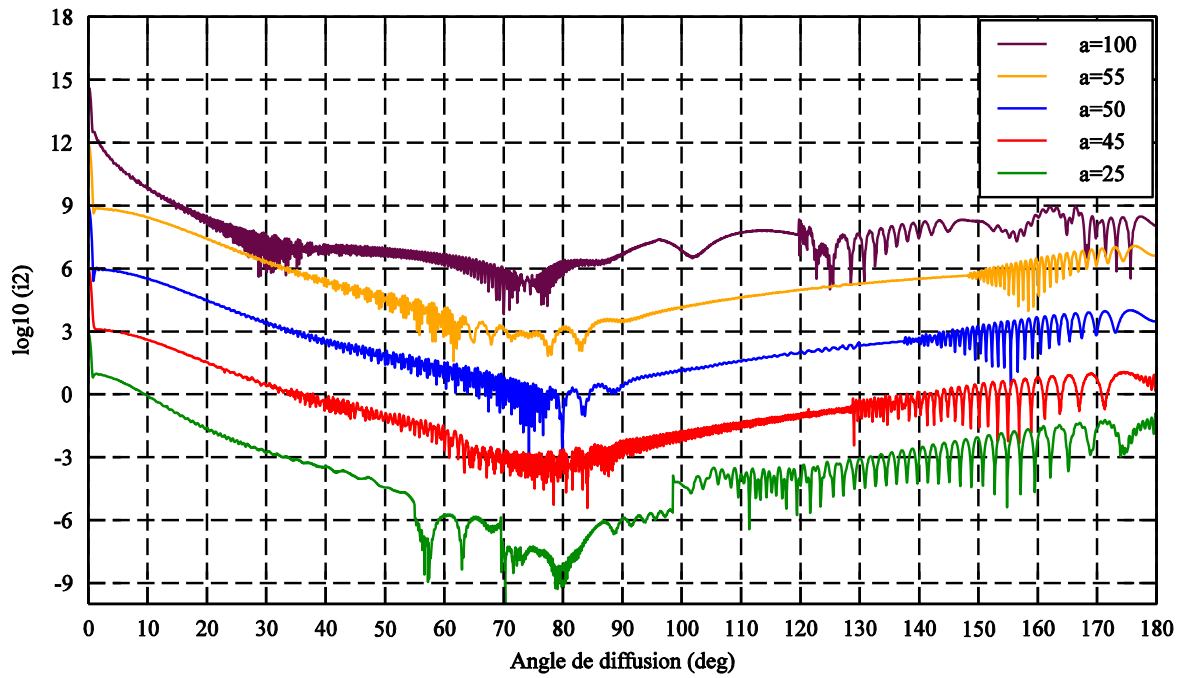


Figure 3.17 Même cas que pour la figure 3.16 mais pour la polarisation parallèle.

Les figures 3.18-3.19 montrent les diagrammes de diffusion d'une bulle sphéroïdale de même rayon transversal  $b = 50\mu\text{m}$  et de différents rayons de révolution  $a = 100\mu\text{m}$ ,  $55\mu\text{m}$ ,  $50\mu\text{m}$ ,  $45\mu\text{m}$  et  $25\mu\text{m}$  éclairée par un faisceau gaussien circulaire de col  $w_0 = 25\mu\text{m}$ . On voit que ce rayon de révolution a une énorme influence sur les diagrammes de diffusion qui n'ont plus aucune similitude l'un avec les autres.

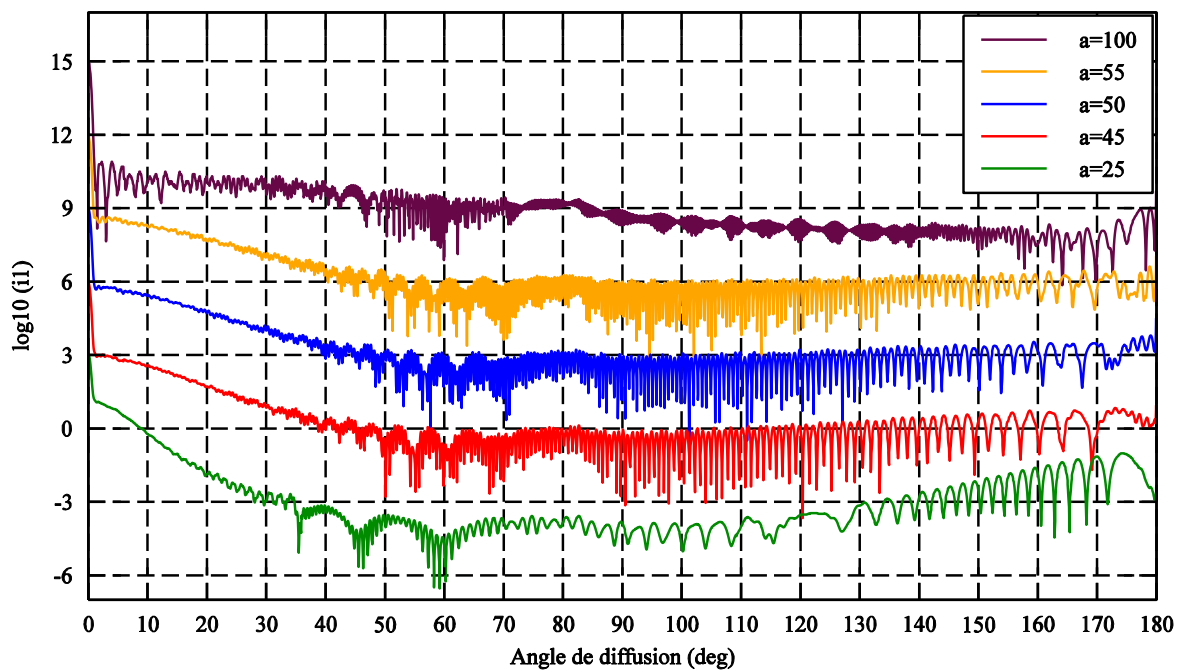


Figure 3.18 Diagrammes de diffusion pour la polarisation perpendiculaire calculés par TRVC pour des bulles sphéroïdales de même rayon transversal  $b = 50\mu\text{m}$ , de différent rayon de révolution  $a = 100\mu\text{m}$ ,



$55\mu\text{m}$ ,  $50\mu\text{m}$ ,  $45\mu\text{m}$  et  $25\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 0.75$  éclairée par un faisceau gaussien circulaire de col  $w_0 = 25\mu\text{m}$  et de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Les résultats pour  $a = 100\mu\text{m}$ ,  $55\mu\text{m}$ ,  $45\mu\text{m}$  et  $25\mu\text{m}$  ont été décalés par les facteurs de  $10^6$ ,  $10^3$ ,  $10^{-3}$  et  $10^{-6}$  pour faciliter la lecture.

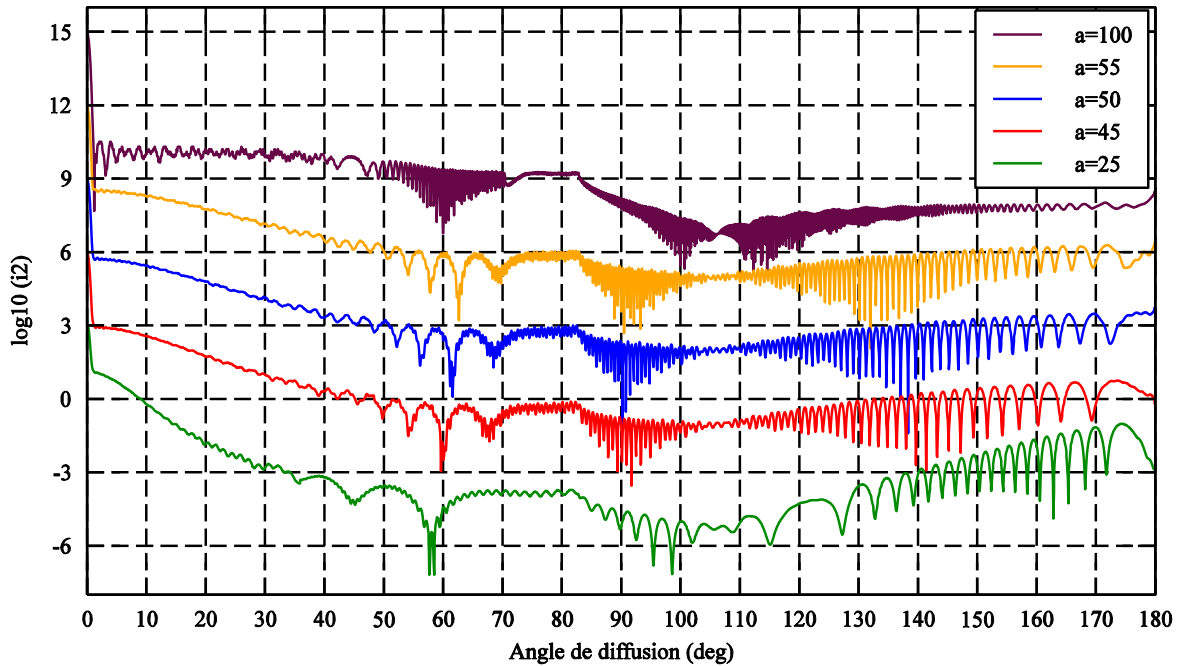


Figure 3.19 Même cas que pour la figure 3.18 mais pour la polarisation parallèle.

### 3.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle de TRVC pour la modélisation de la diffusion de la lumière par un objet de forme quelconque et de surface lisse. En comparant avec les théories rigoureuses pour une sphère éclairée par une onde plane et par un faisceau gaussien circulaire, nous avons montré que le modèle peut prédire avec une grande précision le diagramme de diffusion sauf autour de l'angle d'arc-en-ciel pour les gouttes, et de l'angle critique de diffusion pour les bulles.

Après sa validation pour une sphère, ce modèle a été appliqué à une particule de forme un peu plus complexe : un sphéroïde. On trouve que le diagramme de diffusion dépend beaucoup du rapport d'aspect du sphéroïde. La position des arcs-en-ciel de différents ordres est très sensible à la forme de la particule. Le modèle a également été étendu au cas d'un éclairage dont la direction ne correspond pas à un des axes principaux du sphéroïde. On constate alors que le diagramme de diffusion varie beaucoup avec l'angle d'incidence de l'onde incidente. Le modèle présenté dans ce chapitre permet de simuler la diffusion par un sphéroïde de grande taille. Il est important de noter que les outils mis en place ici ne sont pas spécifiques à une forme donnée de particule. À terme, il doit pouvoir traiter n'importe quelle forme en trois dimensions (3D). Pour ce faire, le modèle de Monte Carlo par Tracé de Rayons d'Onde (MCTRO) a donc été développé dans le cadre de cette thèse. Il est basé sur le modèle

de Monte Carlo par Tracé de Rayons (MCTR) et peut traiter la diffusion par un objet de forme quelconque en 3D. C'est l'objet du chapitre suivant.



# Chapitre 4 : Tracé de rayons par technique de Monte Carlo

## 4.1 Introduction

Le modèle Monte Carlo par tracé de rayons (MCTR) consiste à envoyer des photons sur un objet 3D quelconque et à suivre leur trajectoire jusqu'à ce qu'il ressorte, en utilisant les lois de Snell-Descartes et les coefficients de Fresnel à chaque interaction entre le rayon et une interface. C'est un outil flexible, qui a été utilisé pour simuler des images de spray issues de résultats de simulation numérique d'écoulements diphasiques [60].

Cependant, dans sa version de base, les propriétés ondulatoires telles que la polarisation, les interférences, la diffraction et l'absorption ne sont pas pris en compte. Pour simuler précisément les images du spray et pouvoir comparer avec des résultats expérimentaux, le modèle doit prendre en compte les propriétés ondulatoires de la lumière. Un code, appelé "Monte Carlo par tracé de rayons d'onde" (MCTRO) a donc été écrit. Afin de valider rapidement tous les effets pris en compte, nous avons travaillé sur une version 2D du code, mais les méthodes utilisées sont suffisamment générales pour être intégrées à la version 3D.

Le modèle original de MCTR est présenté dans le début de ce chapitre et il sera validé pour une sphère en 2D sans prise en compte d'effets dû à la nature ondulatoire de la lumière. Ensuite, le modèle amélioré MCTRO prenant en compte les propriétés ondulatoires et l'absorption sera présenté. A chaque fois, la validation d'un effet ondulatoire tel que la polarisation, les interférences, l'absorption et la forme du faisceau incident se fait en comparant avec l'OG. Après la validation des effets susmentionnés, le modèle MCTRO peut être comparé avec la théorie rigoureuse. Enfin, il sera utilisé pour étudier la diffusion par un sphéroïde et comparé avec les résultats du modèle TRVC.

## 4.2 Description générale du modèle original de MCTR

Le modèle MCTR est une méthode numérique basée sur le tracé de rayons. Il consiste à envoyer des rayons (appelés également *photons*), soit sur un maillage, soit aléatoirement répartis, sur un objet défini par une surface 3D et à suivre le parcours de ces rayons à l'intérieur de l'objet jusqu'à leur sortie. A chaque interaction avec une surface, le rayon peut être soit réfléchi, soit réfracté. Le choix

entre ces deux possibilités est déterminé par tirage d'un nombre aléatoire. Contrairement au modèle TRVC, qui suit tous les rayons, le modèle MCTR est donc parfaitement adapté à des objets pouvant être composés de différents éléments séparés.

Bien évidemment, la réflexion totale est prise en compte en fonction de l'angle d'incidence et des indices optiques avant et après la surface.

Ce modèle a été développé pour modéliser la diffusion de la lumière par un objet irrégulier en 3D et il restitue la distribution d'intensité dans l'espace  $(x, y, z)$  définie par deux angles : l'angle de diffusion  $\theta$  et l'angle azimutal  $\varphi$  (voir figure 4.1). On décrira dans cette section les étapes principales de ce modèle.

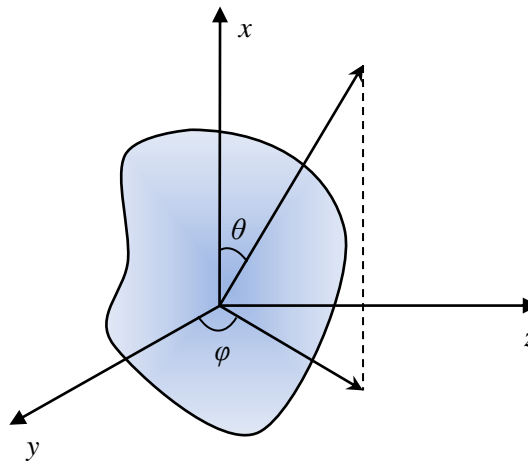


Figure 4.1 Géométrie du système de coordonnées et des angles définis dans le modèle MCTR.

#### 4.2.1 La définition de l'objet

Une particule de forme simple telle qu'une sphère, un sphéroïde ou un cylindre peut être définie par une équation mathématique. Ce n'est plus le cas pour des particules de forme complexe, comme les objets rencontrés en mécanique des fluides : ligaments de liquide, jets liquides, fragments liquides, etc. Il existe alors deux possibilités pour décrire la surface d'un objet :

- 1) Donner l'ensemble ou un sous-ensemble de points appartenant à la surface de l'objet,
- 2) Utiliser une fonction distance ou fonction LevelSet.

C'est cette seconde possibilité que nous avons utilisée car elle permet de relier directement les résultats issus de la simulation numérique de type DNS [61] (Direct Numerical Simulation) avec le code de propagation de la lumière MCTR. Celle-ci consiste à définir, en tout point du domaine dans lequel est plongé l'objet à étudier, une fonction  $f(\vec{x}), \vec{x} \in \mathbb{R}^3$ , dont la valeur absolue représente la distance du point  $\vec{x}$  au point de la surface de l'objet le plus proche de  $\vec{x}$ . L'objet est donc défini par la surface implicite :

$$f(\vec{x}) = 0 \quad (4.1)$$

et par convention, si le point  $\vec{x}$  est à l'intérieur de l'objet  $f(\vec{x}) > 0$  et on admet que  $f(\vec{x}) < 0$  si  $\vec{x}$  est à l'extérieur.

De façon pratique, le domaine dans lequel est plongé l'objet est maillé et on ne connaît la fonction LevelSet que sur les points discrets de ce maillage  $(x_i, y_j, z_k)$ ,  $i = 1 \dots i_{max}$ ,  $j = 1 \dots j_{max}$ ,  $k = 1, \dots, k_{max}$ .

#### 4.2.2 Intersection d'un rayon avec la surface

Le modèle MCTR consiste à envoyer des photons à partir d'un côté du maillage et suivre la trajectoire de chaque photon jusqu'à sa sortie. Pendant la propagation du photon, les points d'intersection du photon avec la surface de l'objet doivent être déterminés précisément. Afin de déterminer la fonction  $f$  à l'intérieur même d'une maille, nous avons choisi d'utiliser une interpolation tricubique [62]. Cela consiste à interpoler la fonction  $f$  par un polynôme tricubique :

$$f(x, y, z) = \sum_{i,j,k=0}^3 a_{ijk} x^i y^j z^k \quad (4.2)$$

Les coefficients  $a_{ijk}$  sont calculés à partir des valeurs de la fonction  $f$  sur chacun des nœuds du maillage, de ses dérivées premières  $\partial f/\partial x$ ,  $\partial f/\partial y$ ,  $\partial f/\partial z$ , des dérivées croisées  $\partial^2 f/\partial x\partial y$ ,  $\partial^2 f/\partial y\partial z$ ,  $\partial^2 f/\partial x\partial z$  et de la dérivée  $\partial^3 f/\partial x\partial y\partial z$ . Ainsi, la surface de l'objet peut passer à l'intérieur de la maille  $i, j, k$ . Rappelons que cette surface est définie par l'équation  $f(x, y, z) = 0$ , où  $f$  est donnée par l'équation (4.1).

Il existe une autre méthode pour déterminer la position de la surface à l'intérieur d'une maille : il s'agit de l'algorithme « Marching Cubes ». La surface est alors approximée par un ensemble de triangles jointifs. L'avantage est sa rapidité. Son défaut, rédhibitoire pour l'application qui nous concerne, est que l'objet est simulé par un ensemble de facettes planes et se comporte donc comme le fait un diamant vis-à-vis de la lumière incidente, avec de très fortes réflexions spéculaires.

La méthode d'interpolation tricubique a l'avantage de créer une surface parfaitement lisse à l'intérieur de la maille, en continuité avec les surfaces des mailles voisines. Elle est donc plus réaliste du point de vue de la mécanique des fluides et des mécanismes de diffusion de la lumière.

#### 4.2.3 La détection

Afin d'obtenir la distribution angulaire des photons, l'espace est discrétisé en angles solides définis par un angle  $\theta$  à  $\delta\theta$  près et un angle  $\varphi$  à  $\delta\varphi$  près. Chaque fois qu'un photon émergent sort dans un de ces angles solides, un compteur est incrémenté. Cela permet de calculer la distribution d'énergie diffusée dans l'espace. Si l'un des angles solides définis par  $(\theta, \varphi)$  a reçu un flux  $\delta\phi$ , l'intensité correspondante est [63]:

$$I = \frac{\delta\phi}{\delta\Omega} = \frac{\delta\phi}{\sin\theta \delta\theta\delta\varphi} \quad (4.3)$$

#### 4.2.4 Algorithme

De manière synthétique, le processus du tracé de rayons est décrit par l'algorithme suivant :

- 1) Lecture des valeurs de la fonction LevelSet  $f$  sur un domaine maillé.
- 2) Pour chaque photon :
  - a. Initialisation du photon et de ses propriétés (direction, poids statistique, positions etc.).  
Positionnement du photon sur une face du domaine.
  - b. Calcul de l'intersection du photon avec la maille suivante.
  - c. Calcul de la valeur de la fonction  $f$  le long de ce trajet.
  - d. Si la fonction  $f$  passe par zéro : le photon traverse une interface. Sinon, le photon avance jusqu'à la maille suivante et on retourne à l'étape b.
  - e. On traite l'interaction entre le photon et la surface de l'objet. Ce peut être une réflexion totale, une réflexion normale ou une réfraction (le choix entre ces deux derniers types d'interaction se fait à l'aide d'un tirage aléatoire).
  - f. Les propriétés du photon sont mises à jour en fonction du type d'interaction et on retourne à l'étape b.
- 3) La boucle précédente se poursuit jusqu'à ce que le photon sorte du domaine de calcul : on le comptabilise alors dans un tableau adéquat.

### 4.3 Validation du modèle de MCTR pour une sphère en 2D sans effets ondulatoires

Rappelons que le modèle d'OG permet d'isoler chaque effet ondulatoire et d'étudier leurs contributions à la diffusion, il est choisi comme référence pour valider le modèle MCTR.

Pour simplifier la modélisation du modèle MCTR, les codes en 3D seront simplifiés en 2D et le problème de diffusion le plus simple est étudié dans un premier temps : les photons sont envoyés sur une seule direction et dans un seul plan sur une sphère (voir figure 4.2). C'est donc la diffusion d'une onde plane non polarisée par une gouttelette sphérique transparente sans interférence et sans diffraction qui est étudiée.

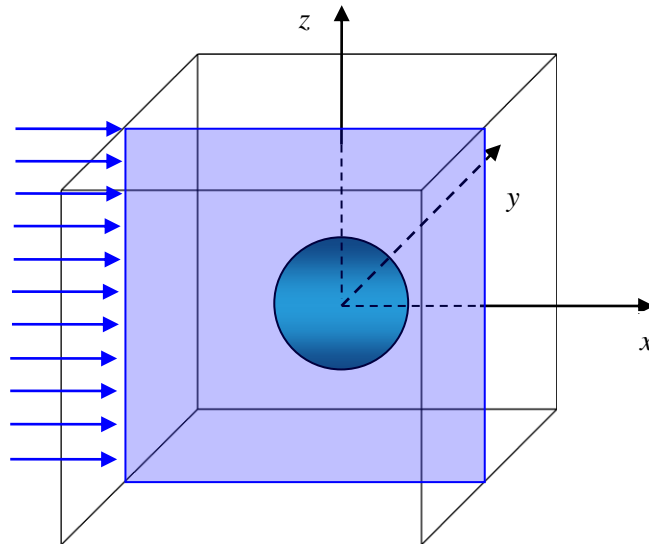


Figure 4.2 Modèle simplifié de MCTR en 2D pour la diffusion par une sphère éclairée par une onde plane.

La comparaison des distributions d'intensité pour différents ordres sans effet ondulatoire entre le modèle d'OG et le modèle MCTR est illustrée sur la figure 4.3. On obtient un bon accord entre les deux modèles. Evidemment, la précision du MCRT dépend du nombre total de photons simulés. Sur un PC standard, quand on envoie des photons de nombre  $10^8$ , le temps de calcul est de l'ordre de l'heure. La précision est toujours meilleure pour les ordres les plus bas car le nombre de photon diffusé pour ces ordres est plus important. En faisant la somme de tous les ordres, la précision est satisfaisante.

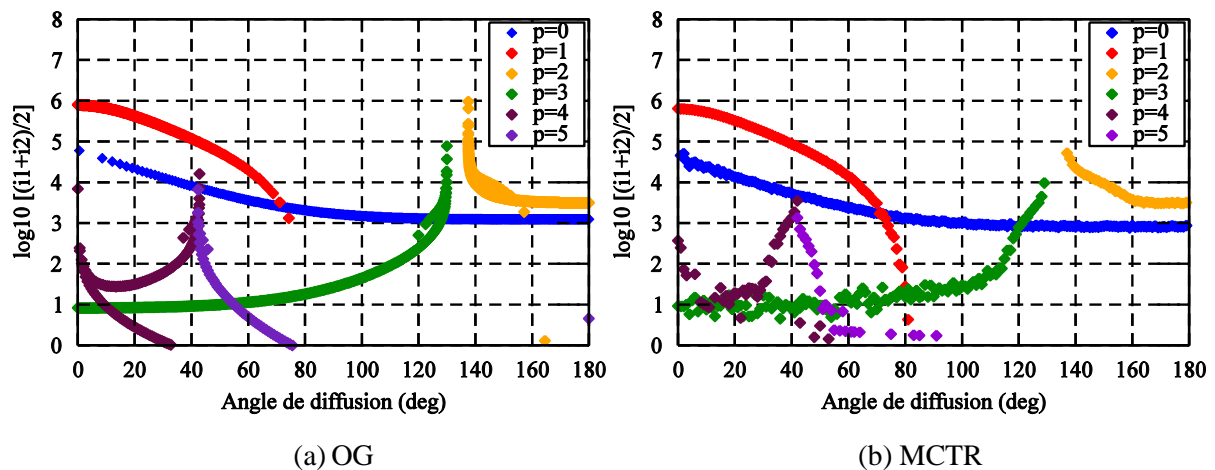


Figure 4.3 Comparaisons des distributions d'intensité de différents ordres calculées par OG et par MCTR pour une sphère de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ .



## 4.4 Modèle de MCTRO et ajout d'effets ondulatoires pour une sphère en 2D

Sur la base du modèle MCTR existant, nous avons amélioré ses performances en tenant compte des propriétés ondulatoires telles que la polarisation, les interférences, la divergence ou la convergence de l'onde et l'effet d'absorption. Chaque effet sera ajouté et validé séparément en comparant avec le modèle d'OG qui permet d'isoler les contributions de ces effets.

### 4.4.1 Absorption

Dans le cadre du modèle classique, une onde lumineuse est assimilée à un faisceau de photons. L'absorption peut être prise en compte au moyen d'une procédure stochastique [26, 64] : la transmission  $T$  associée à une longueur du trajet est comparée avec un nombre aléatoire, puis l'absorption ou la transmission du photon sera déterminée. La transmission  $T$  est définie par :

$$T = \exp(-k_i l) \quad (4.4)$$

avec  $l$  la distance entre les deux points d'interaction successifs d'un photon avec la surface de l'objet,  $k_i = 4\pi m_i/\lambda$  est le coefficient d'absorption,  $m_i$  est la partie imaginaire de l'indice de réfraction de l'objet.

Si la transmission est inférieure au nombre aléatoire, le photon sera absorbé. Dans le cas contraire, il sera transmis. Cette procédure est répétée jusqu'au moment où le photon est absorbé ou il sort de l'objet.

L'autre possibilité est de définir un poids  $w$  qui sera porté par chaque photon et diminuera avec l'absorption. Il décroît le long du chemin du photon dans l'objet étudié :

$$w = \exp(-k_i l_{tot}) \quad (4.5)$$

où  $l_{tot}$  est la longueur totale traversée par le photon à l'intérieur de l'objet.

Ce traitement est plus simple et pratique que la méthode stochastique, car il n'est pas nécessaire de faire la comparaison chaque fois que le photon rencontre la surface de l'objet et donc le temps de calcul peut être économisé : c'est la méthode que nous avons choisie. La figure 4.4 représente les comparaisons des distributions d'intensité normalisée calculées par les deux modèles pour une sphère absorbante pour deux valeurs différentes de la partie imaginaire de l'indice de réfraction. Les deux résultats correspondent bien, l'ajout de l'absorption dans le modèle MCTRO est donc validé.

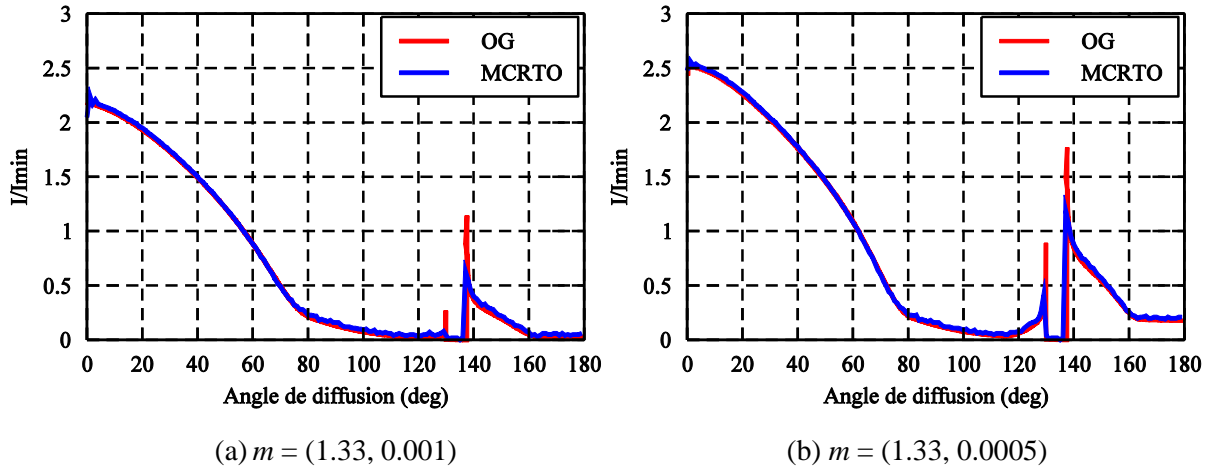


Figure 4.4 Comparaisons des distributions d'intensité normalisée calculées par OG et par MCRTO pour une sphère absorbante de rayon  $a = 50\mu m$ , de différents indices de réfraction  $m = (1.33, 0.001)$  et  $m = (1.33, 0.0005)$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu m$ .

#### 4.4.2 Forme du faisceau incident (gaussien circulaire)

En optique, un faisceau gaussien est un modèle pour décrire la forme usuelle des faisceaux lasers utilisés par les techniques de diagnostic optique. L'évolution du profil transversal d'amplitude de ce type de faisceau est fonction de la propagation spatiale et proportionnelle à une fonction gaussienne.

Une onde plane est considérée comme un faisceau incident dans lequel la trajectoire du photon se propage rectilignement. Le front d'onde d'un faisceau gaussien est courbé et la trajectoire d'un photon appartenant à ce faisceau devient courbe. La direction de propagation du photon varie en fonction de sa position dans le faisceau. On considère un faisceau gaussien de rayon au col  $w_0$  se propageant dans la direction  $x$  (voir figure 4.5). Son centre se trouve en  $O'(0, 0, d)$  par rapport au centre de la particule  $O$ . Pour simplifier le calcul, on suppose que la trajectoire du photon à l'intérieur de l'objet est rectiligne. Lorsque le photon rencontre l'objet pour la première fois, la direction de propagation est calculée par la normale du front d'onde du faisceau au point d'interaction et l'angle d'incidence est noté par  $\theta_i$ . Le photon portera une amplitude complexe  $\psi$  égale à celle du faisceau à cet endroit [12].

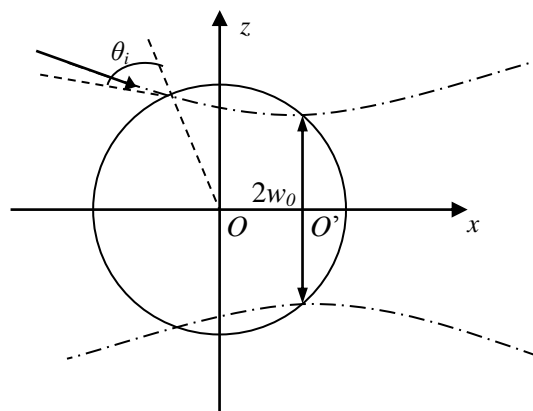


Figure 4.5 Géométrie d'une sphère éclairée par un faisceau gaussien circulaire.

L'angle d'incidence  $\theta_i$  est déduit à partir de la normale du front d'onde local du faisceau incident et la normale de la surface. Pour la suite, la procédure du tracé de rayons reste la même que dans le cas d'une onde plane. Les distributions d'intensité de différents ordres pour une sphère éclairée par un faisceau gaussien circulaire sont simulées par le modèle MCTRO et comparées avec l'OG (voir figure 4.6). Un bon accord entre les deux modèles est trouvé. Il faut cependant noter que cette technique un peu trop simplifiée ne permet pas de modéliser la diffusion d'un faisceau gaussien très focalisé.

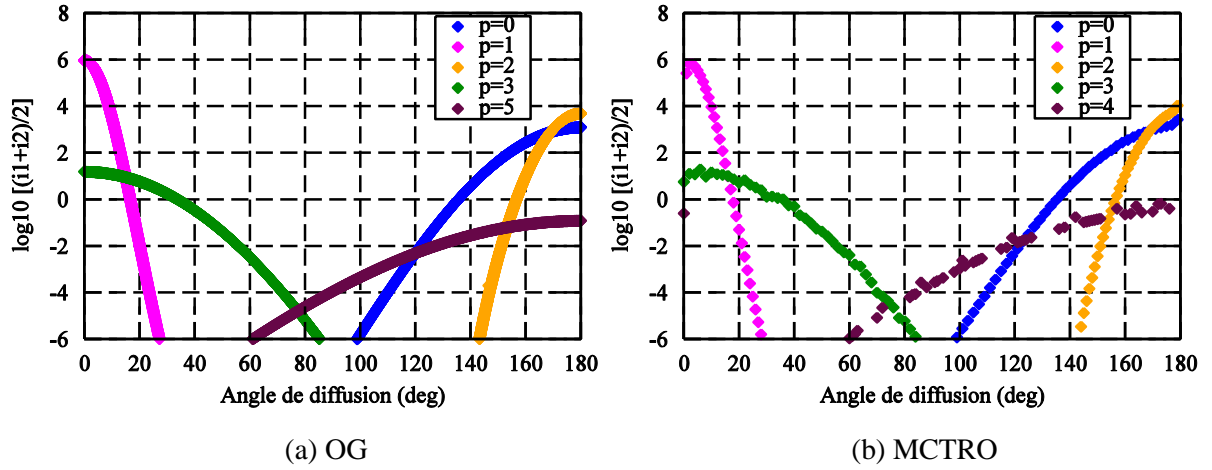


Figure 4.6 Comparaison des distributions d'intensité pour différents ordres calculées par OG et par MCTRO pour une sphère de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par un faisceau gaussien circulaire de col  $w_0 = 10\mu\text{m}$  non polarisé et de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ .

#### 4.4.3 Polarisation

Jusqu'à maintenant, on a supposé que le faisceau incident est un faisceau non polarisé. Cependant, en métrologie optique, le laser utilisé est souvent polarisé. La polarisation du champ électromagnétique doit être prise en compte, ainsi que son évolution en cours de sa propagation.

Afin de tenir compte de la polarisation, le photon est décrit par sa direction de propagation  $\vec{x}_k$  et deux nombres complexes  $(E_1, E_2)$  qui représentent les deux composantes de la polarisation dans les deux directions  $(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$  orthogonales à  $\vec{x}_k$ .  $(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_k)$  est le référentiel direct lié au photon et change à chaque interaction avec la surface en suivant les lois de Snell-Descartes. L'intensité du photon  $E_1 E_1^* + E_2 E_2^*$  garde une valeur égale à 1 pendant la propagation.

Pour chaque interaction du photon avec la surface de l'objet, les fractions des deux polarisations seront calculées par les coefficients de Fresnel selon le type de l'interaction : réflexion totale, réfraction et réflexion. Ainsi, pour la réflexion, ces deux fractions sont obtenues par les coefficients de réflexion :

$$E_{\parallel s} = r_{\parallel} E_{\parallel} \quad (4.6)$$

$$E_{\perp s} = r_{\perp} E_{\perp} \quad (4.7)$$

avec  $E_{\parallel s}, E_{\perp s}$  les amplitudes des deux polarisations après l'interaction du photon avec l'objet et  $E_{\parallel}, E_{\perp}$  les amplitudes avant l'interaction. Les indices  $\parallel$  et  $\perp$  symbolisent les composantes parallèle et

perpendiculaire du champ électrique par rapport au plan de diffusion local. Les lettres sans et avec l'indice  $s$  présentent respectivement les quantités avant et après l'interaction. On rappelle que le plan de diffusion est défini par le vecteur de propagation de l'onde incidente  $\vec{x}_k$  et la normale à la surface  $\vec{n}$  orientée du milieu incident (indice de réfraction  $n_i$ ) vers le milieu où s'effectue la réfraction (indice de réfraction  $n_t$ ).

Pour la réfraction, les deux fractions des deux composantes de polarisation sont données par les coefficients de transmission :

$$E_{\parallel s} = t_{\parallel} E_{\parallel} \quad (4.8)$$

$$E_{\perp s} = t_{\perp} E_{\perp} \quad (4.9)$$

Selon l'optique géométrique, les amplitudes scalaires après la réflexion totale restent les mêmes que celles avant l'interaction et les déphasages supplémentaires dus à la réflexion totale doivent être ajoutés dans la phase. Ici, la réflexion totale sera traitée comme la réflexion en multipliant les coefficients complexes de réflexion  $r$  y comprenant les déphasages, qui deviennent :

$$r_{\parallel} = \frac{n_t^2 \cos \theta_i - i n_i (n_i^2 \sin^2 \theta_i - n_t^2)^{1/2}}{n_t^2 \cos \theta_i + i n_i (n_i^2 \sin^2 \theta_i - n_t^2)^{1/2}} \quad (4.10)$$

$$r_{\perp} = \frac{n_i \cos \theta_i - i (n_i^2 \sin^2 \theta_i - n_t^2)^{1/2}}{n_i \cos \theta_i + i (n_i^2 \sin^2 \theta_i - n_t^2)^{1/2}} \quad (4.11)$$

Les comparaisons des distributions d'intensité de différents ordres individuels calculées par l'OG et par le modèle MCTRO sont illustrées pour les deux polarisations sur la figure 4.7-4.8. Les résultats des deux modèles sont en accord. La figure 4.9 montre la comparaison entre les diagrammes de diffusion totaux sans interférences et on vérifie qu'ils correspondent bien.

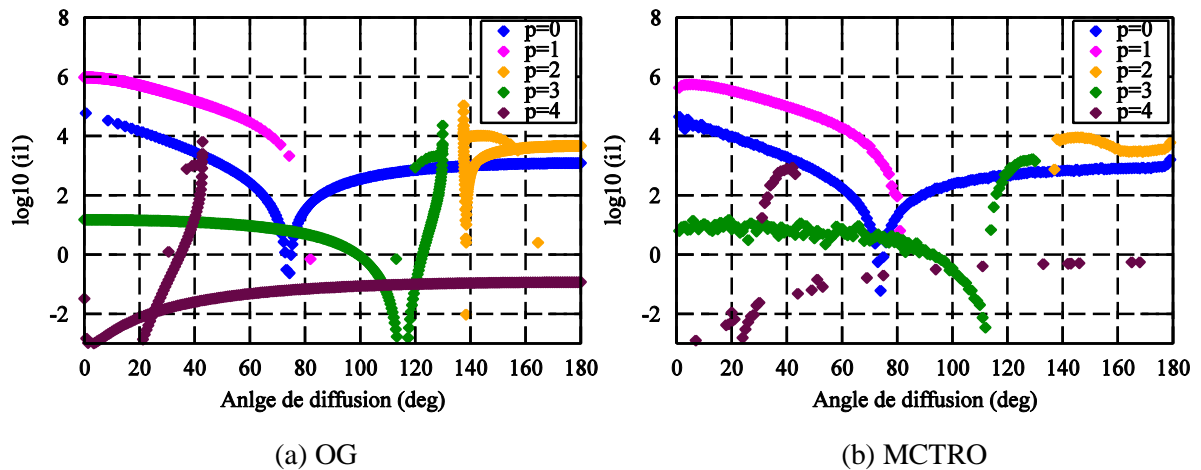


Figure 4.7 Comparaison des distributions d'intensité de différents ordres pour la composante parallèle de polarisation calculées par OG et par MCTRO pour une sphère de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ .

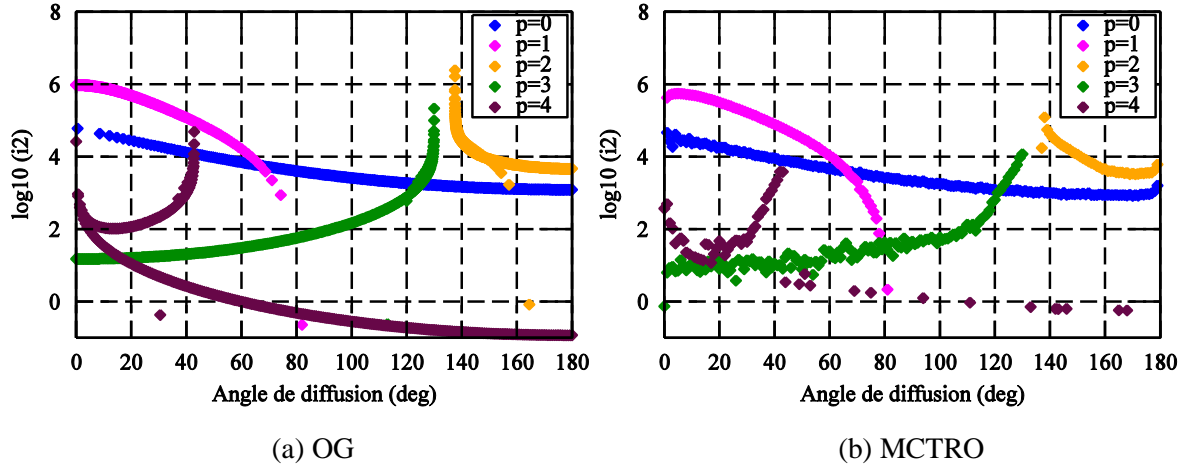


Figure 4.8 Même cas que pour la figure 4.7 mais pour la composante perpendiculaire de polarisation.

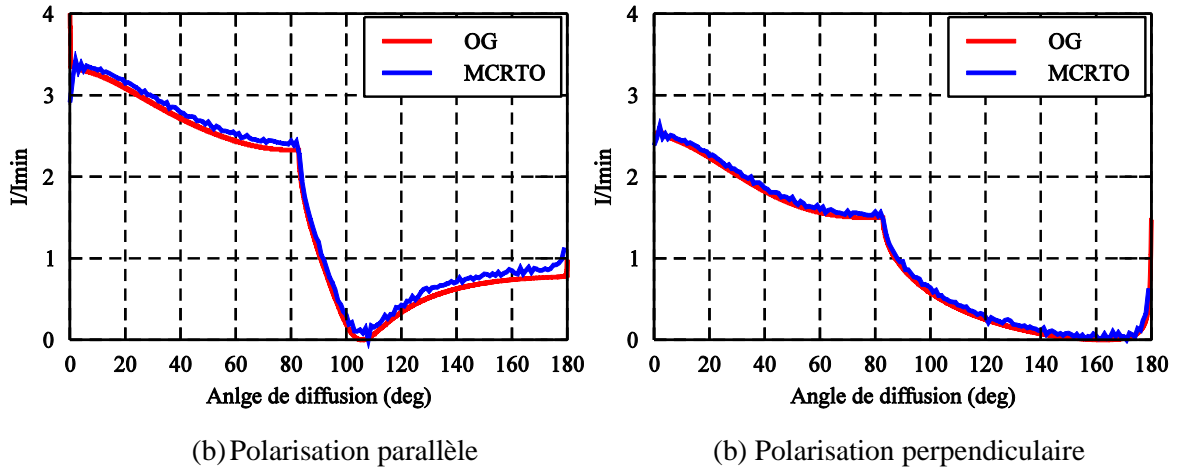


Figure 4.9 Même cas que pour la figure 4.7 mais pour le diagramme de diffusion total sans interférences.

#### 4.4.4 Interférences entre les photons

Pour obtenir l'intensité  $I_j$  avec interférences pour l'angle de diffusion  $\theta_j$  correspondant à la contribution d'un nombre  $N_j$  de photons, on doit d'abord déterminer l'amplitude complexe  $\tilde{E}_i$  de chaque photon, puis calculer l'amplitude complexe moyenne des photons et multiplier par  $N_j$  à la fin. Conformément à la référence [65], ceci s'écrit comme suit :

$$I_j = \left| \frac{1}{N_j} \sum_{i=1}^{N_j} \tilde{E}_i \right|^2 N_j = \frac{|\sum_{i=1}^{N_j} \tilde{E}_i|^2}{N_j} \quad (4.12)$$

Afin de prendre en compte les interférences entre les photons, la phase sera introduite dans les caractéristiques du photon. Trois types de déphasage doivent être calculés :

(i) Le déphasage dû au chemin optique  $\delta_{PH}$  par rapport à une référence qui est un photon passant par le centre de l'objet et avec les mêmes directions incidente et émergente que le photon simulé. La différence de trajet par rapport à la référence est composée de trois parties : la partie quand le photon arrive sur la surface de l'objet par rapport au photon de même direction incidente  $\delta_1$ , la partie quand le photon se propage à l'intérieur de l'objet  $\delta_2 = k\overline{S_0AS_1}$  et la partie quand le photon sort

de l'objet par rapport au photon de même direction émergente  $\delta_3$ . Le chemin est illustré sur la figure 4.10. Le déphasage  $\delta_{pH}$  du photon peut être calculé par [20] :

$$\delta_{pH} = \delta_1 + \delta_2 + \delta_3 = k(R_0O_p - H_0S_0) - kn_t l_{tot} + k(O_pR_p - S_pH_p) \quad (4.13)$$

avec  $m_r$  la partie réelle de l'indice de réfraction de l'objet et  $l_{tot}$  la distance totale traversée par le photon à l'intérieur de l'objet. On suppose que  $S_0(x_0, y_0, z_0)$  est le point d'interaction du photon avec la surface de la sphère à la première interaction et que le vecteur de direction  $R_0O_p$  est  $\vec{s} = \{\alpha, \beta, \gamma\}$ . La distance entre  $S_0$  et  $R_0O_p$  peut alors être obtenue par l'expression :

$$d_0 = \frac{\sqrt{(z_0\beta - y_0\gamma)^2 + (x_0\gamma - z_0\alpha)^2 + (y_0\alpha - x_0\beta)^2}}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2}} \quad (4.14)$$

Donc, le terme  $\delta_1$  est donné par :

$$\delta_1 = k(R_0O_p - H_0S_0) = k\sqrt{x_0^2 + y_0^2 + z_0^2 - d_0^2} \quad (4.15)$$

Le terme  $\delta_3$  peut être calculé de la même manière.

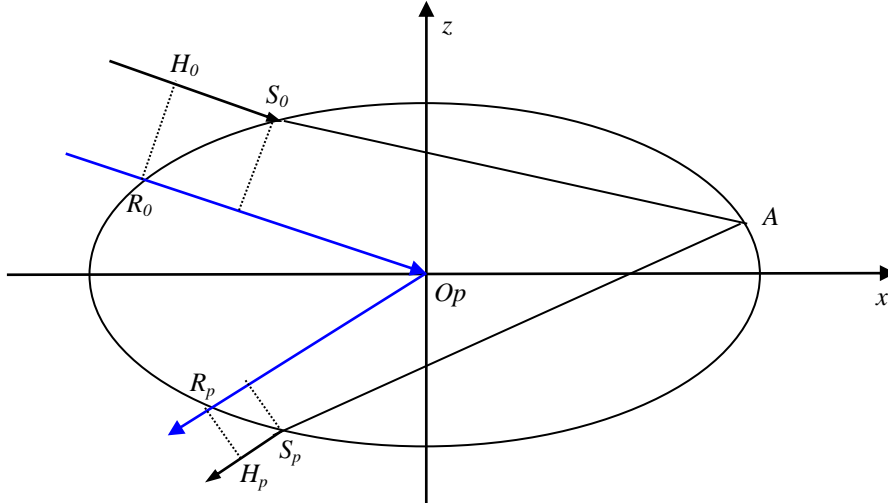


Figure 4.10 Schéma pour le calcul du déphasage dû au chemin optique.

(ii) Le déphasage dû à la réflexion et la réfraction sur la surface de l'objet qui est déjà pris en compte dans les coefficients de Fresnel.

(iii) Le déphasage dû aux lignes focales  $\delta_{FL}$ . Van de Hulst indique que à chaque fois que le photon passe une ligne focale, la phase avance de  $\pi/2$ . Ren et al. [24-25] proposent que le déphasage  $\delta_{FL}$  soit déterminé par la variation de la courbure du front d'onde entre deux interactions successives du photon avec la surface de l'objet. Par conséquent, une propriété nouvelle sera ajoutée aux caractéristiques du photon : la courbure du front d'onde définie par deux rayons de courbures le long des deux directions principales. Les rayons de courbure d'onde sont infinis pour une onde plane. Quand le photon interagit avec la surface de l'objet, les courbures du front d'onde  $\kappa_1^t, \kappa_2^t$  du photon émergent sont fonction des courbures du photon incident  $\kappa_1^i, \kappa_2^i$  et des courbures de la surface au point d'intersection. La relation entre les courbures du front d'onde incident, réfléchi/réfracté et celles du

dioptrique est donnée dans la présentation du modèle TRVC pour une particule sphéroïdale. Donc, le calcul de la courbure d'une surface de forme quelconque décrite par une fonction implicite est essentiel dans le modèle MCTRO.

#### 4.4.4.1 Calcul des courbures d'une surface implicite

On suppose que la surface est décrite par une fonction implicite  $f(x, y, z) = 0$ . Dans notre modèle, les courbures de la surface sont calculées en utilisant la méthode proposée dans la référence [66]. En utilisant l'interpolation tricubique de la fonction  $f$ , on détermine avec précision le point d'interaction du photon avec la surface de l'objet. Le gradient de la fonction  $f$  au point considéré est évalué par :

$$\vec{\nabla}f = \left[ \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right]^T \quad (4.16)$$

et la normale à la surface est déduite de :

$$\vec{n} = \vec{\nabla}f / |\vec{\nabla}f| \quad (4.17)$$

Afin de déterminer les courbures du front d'onde, on calcule d'abord la matrice des dérivées secondaires ou la matrice hessienne définie par :

$$\vec{H} = \begin{bmatrix} \partial^2 f / \partial x^2 & \partial^2 f / \partial x \partial y & \partial^2 f / \partial x \partial z \\ \partial^2 f / \partial x \partial y & \partial^2 f / \partial y^2 & \partial^2 f / \partial y \partial z \\ \partial^2 f / \partial x \partial z & \partial^2 f / \partial y \partial z & \partial^2 f / \partial z^2 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

$\vec{n}\vec{n}^T$  est l'opérateur linéaire correspondant à la projection sur la direction de la normale  $\vec{n}$ ,  $\vec{P} = \vec{I} - \vec{n}\vec{n}^T$  est la projection sur le sous-espace  $\varepsilon$  orthogonal à la direction définie par le vecteur  $\vec{n}$  où  $\vec{I}$  est la matrice unitaire. Avec l'aide de l'opérateur  $\vec{P}$ , on peut calculer la projection de la matrice hessienne dans le sous-espace  $\varepsilon$  par :

$$G = -\frac{P\vec{H}P}{|\vec{\nabla}f|} \quad (4.19)$$

Les valeurs propres  $(\kappa_1^s, \kappa_2^s, 0)$  et les directions correspondantes  $(\vec{x}_1^s, \vec{x}_2^s, \vec{n})$  peuvent être déduites à partir de la matrice  $G$  et les courbures de la surface  $\kappa_1^s$  et  $\kappa_2^s$  dans les directions  $\vec{x}_1^s$  et  $\vec{x}_2^s$ .

#### 4.4.4.2 Calcul des courbures du front d'onde de l'onde transmise

Après la réflexion ou la réfraction d'une onde avec un dioptrique, les courbures du front d'onde de l'onde sont déterminées par une équation des fronts d'onde. Expliquons comment appliquer cette équation dans le modèle MCTRO.

On appelle plan de diffusion le plan défini par le vecteur de propagation de l'onde incidente  $\vec{x}_k^i$  et la normale à la surface. Soit  $\theta_i$  l'angle d'incidence,  $\theta_r$  l'angle de réflexion et  $\theta_t$  l'angle de réfraction (voir figure 4.11). Cinq repères sont définis : le repère lié à la surface  $(\vec{x}_i^s, \vec{x}_j^s, \vec{n})$ , le repère lié à l'onde incidente  $(\vec{x}_i^i, \vec{x}_j^i, \vec{x}_k^i)$ , le repère lié à l'onde réfléchie  $(\vec{x}_i^r, \vec{x}_j^r, \vec{x}_k^r)$ , le repère lié à l'onde réfractée  $(\vec{x}_i^t, \vec{x}_j^t, \vec{x}_k^t)$  et le repère de référence construit dans le plan  $(\vec{u}_i, \vec{u}_j, \vec{n})$ .  $\vec{x}_i, \vec{x}_j$  sont à chaque fois les

vecteurs unitaires dans les directions des composantes parallèle et perpendiculaire par rapport au plan de diffusion et  $\vec{x}_k$  est la direction de propagation du photon.

On définit un vecteur orthogonal au plan de diffusion :

$$\vec{u}_j = \vec{n} \wedge \vec{x}_k^i \quad (4.20)$$

Alors  $\vec{u}_i$  s'obtient par :

$$\vec{u}_i = \vec{u}_j \wedge \vec{n} \quad (4.21)$$

On utilise le même vecteur unitaire orthogonal au plan pour les quatre autres repères :

$$\vec{u}_j = \vec{x}_j^s = \vec{x}_j^i = \vec{x}_j^r = \vec{x}_j^t \quad (4.22)$$

Et les composantes parallèles sont déduites de façon suivante:

$$\vec{x}_i^{s,i,r,t} = \vec{x}_j^{s,i,r,t} \wedge \vec{x}_k^{s,i,r,t} \quad (4.23)$$

Les directions de propagation après la réflexion ou la réfraction sont respectivement calculées par :

$$\vec{x}_k^r = \vec{x}_k^i - 2 \cos \theta_i \vec{n} \quad (4.24)$$

$$\vec{x}_k^t = \frac{n_i}{n_t} \vec{x}_k^i + \left( \cos \theta_t - \frac{n_i}{n_t} \cos \theta_i \right) \vec{n} \quad (4.25)$$

Le calcul de ces vecteurs nécessite des rotations de tous les repères de façon à se retrouver dans le repère de référence [67-72].

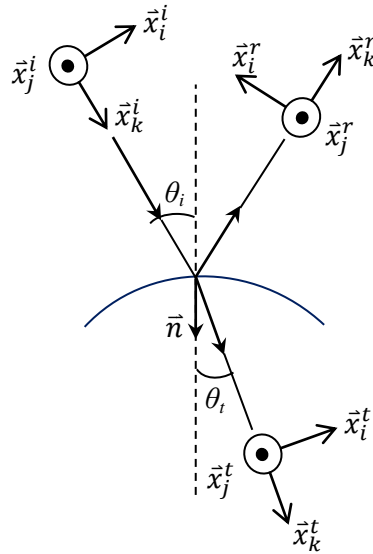


Figure 4.11 Repères liés aux ondes incidente, réfléchie et réfractée.

Choisissons le repère lié au plan de diffusion comme repère de référence. Les matrices de courbure de l'onde incidente, réfléchie ou réfractée qui sont diagonales dans les directions principales, doivent être transformées par les rotations suivantes :

$$Q^i = P^{(i)-1} \begin{bmatrix} \kappa_1^i & 0 \\ 0 & \kappa_2^i \end{bmatrix} P^i \quad \text{et} \quad Q^t = P^{(t)-1} \begin{bmatrix} \kappa_1^t & 0 \\ 0 & \kappa_2^t \end{bmatrix} P^t \quad (4.26)$$



où  $P^i$  est la matrice de rotation générée par l'angle de rotation  $(\vec{x}_i^i, \vec{u}_i)$  et  $P^t$  est la matrice de rotation générée par l'angle de rotation  $(\vec{x}_i^t, \vec{u}_i)$ . La matrice de courbure de la surface au point d'interaction peut être aussi calculée de la même manière :

$$C = P^{(s)-1} \begin{bmatrix} \kappa_1^s & 0 \\ 0 & \kappa_2^s \end{bmatrix} P^s \quad (4.27)$$

où  $P^s$  est la matrice de rotation générée par l'angle  $(\vec{x}_i^s, \vec{u}_i)$

Si le photon est réfracté par la surface, les courbures du front d'onde de l'onde réfractée peuvent être calculées en fonction des courbures du front d'onde de l'onde incidente et celle de la surface :

$$k^t \Theta^{(t)T} Q^t \Theta^t = k^i \Theta^{(i)T} Q^i \Theta^i + (k^t \cos \theta_t - k^i \cos \theta_i) C \quad (4.28)$$

avec  $\Theta^i, \Theta^t$  les matrices de projection définies par:

$$\Theta^t = \begin{bmatrix} \cos \theta_t & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

$$\Theta^i = \begin{bmatrix} \cos \theta_i & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

Si le photon est réfléchi, l'équation (4.28) peut être simplifiée :

$$\Theta^{(t)T} Q^t \Theta^t = \Theta^{(i)T} Q^i \Theta^i - 2 \cos \theta_i C \quad (4.31)$$

Les rayons de courbures dans les deux directions peuvent être calculés avec les équations (4.28) et (4.31) selon le type d'interaction entre le photon et la surface.

#### 4.4.4.3 Calcul des courbures du front d'onde de l'onde pendant la propagation

Lorsque le photon se propage sur une distance  $d$ , les courbures des fronts d'onde associés varient. Elles peuvent être calculées par:

$$\kappa_1(d) = \frac{\kappa_1}{1 + \kappa_1 d} \quad (4.32)$$

$$\kappa_2(d) = \frac{\kappa_2}{1 + \kappa_2 d} \quad (4.33)$$

Si les signes des courbure changent le long de la distance  $d$ , c'est que le photon passe une focale et un déphasage  $\delta_{FL} = \pi/2$  sera ajouté aux champs électriques.

## 4.5 Comparaison avec la théorie rigoureuse

En tenant compte de tous les types de déphasages, l'effet d'interférence peut être pris en compte dans le modèle MCTRO et le diagramme de diffusion peut être comparé avec la théorie de Lorenz-Mie pour une sphère éclairée par une onde plane. Ici, deux cas de diffusion sont étudiés : une gouttelette sphérique (voir figure 4.12-4.13) et une bulle sphérique (voir figure 4.14-4.15). A partir des deux groupes de figures, on peut voir que les résultats issus du modèle MCTRO correspondent bien avec ceux de la théorie rigoureuse sauf autour de l'angle d'arc-en-ciel pour une goutte et autour de l'angle critique de diffusion pour une bulle et vers l'avant ( $0^\circ$ ). Le désaccord dans la direction avant

est dû au fait que la diffraction n'est pas considérée. Si nécessaire, la diffraction peut être calculée par l'approximation de Fraunhofer comme nous l'avons fait dans le chapitre précédent. Pour améliorer les diagrammes de diffusion près de l'angle d'arc-en-ciel et de l'angle critique de diffusion, un modèle spécifique pourrait être mis en œuvre.

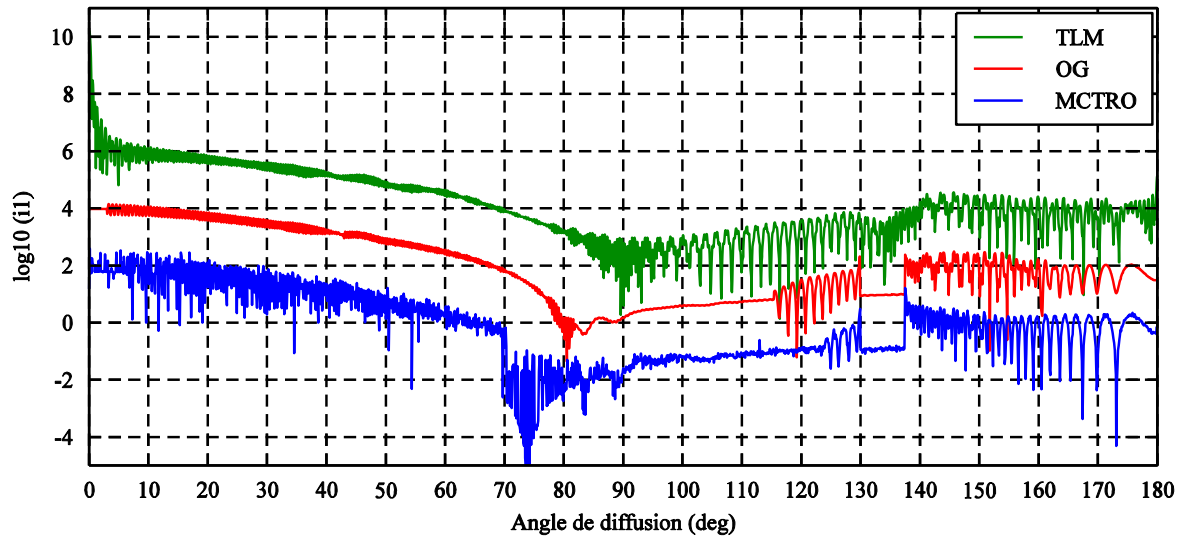


Figure 4.12 Comparaison des diagrammes de diffusion pour la polarisation parallèle, simulés par la théorie de Lorenz-Mie, par le modèle d'OG et par le modèle MCTRO pour une gouttelette sphérique de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Les résultats du modèle d'OG et de MCTRO ont été décalés des facteurs  $10^2$  et  $10^3$  pour permettre la comparaison.

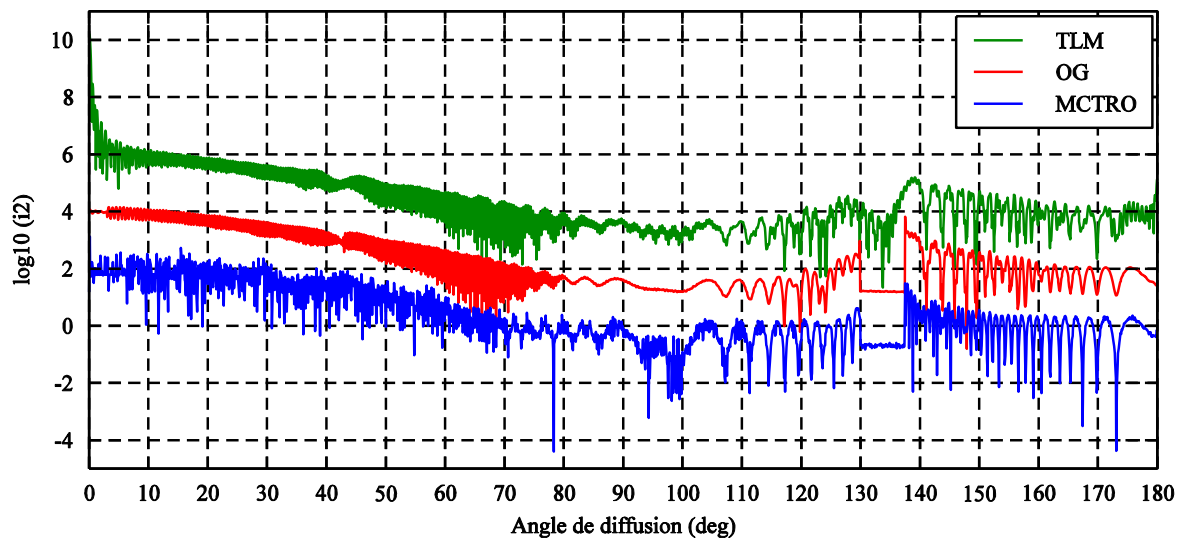


Figure 4.13 Même cas que pour la figure 4.12 mais pour la polarisation perpendiculaire.

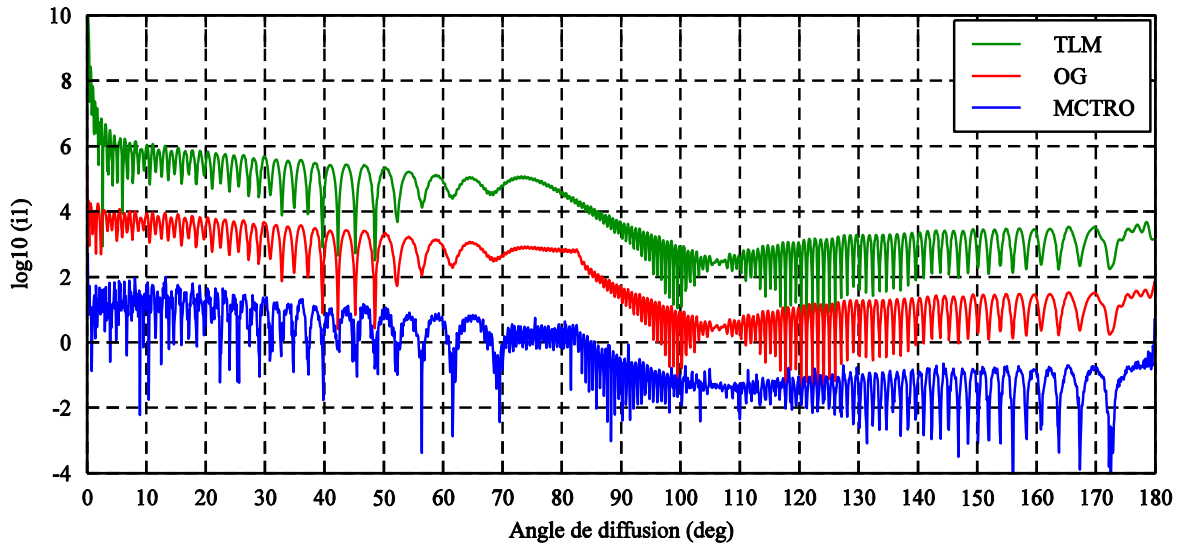


Figure 4.14 Comparaison des diagrammes de diffusion pour la polarisation parallèle, simulés par la théorie de Lorenz-Mie, par le modèle d'OG et par le modèle MCTRO pour une bulle sphérique de rayon  $a = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 0.75$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Les résultats du modèle d'OG et de MCTRO ont été décalés par des facteurs  $10^2$  et  $10^3$  pour permettre la comparaison.

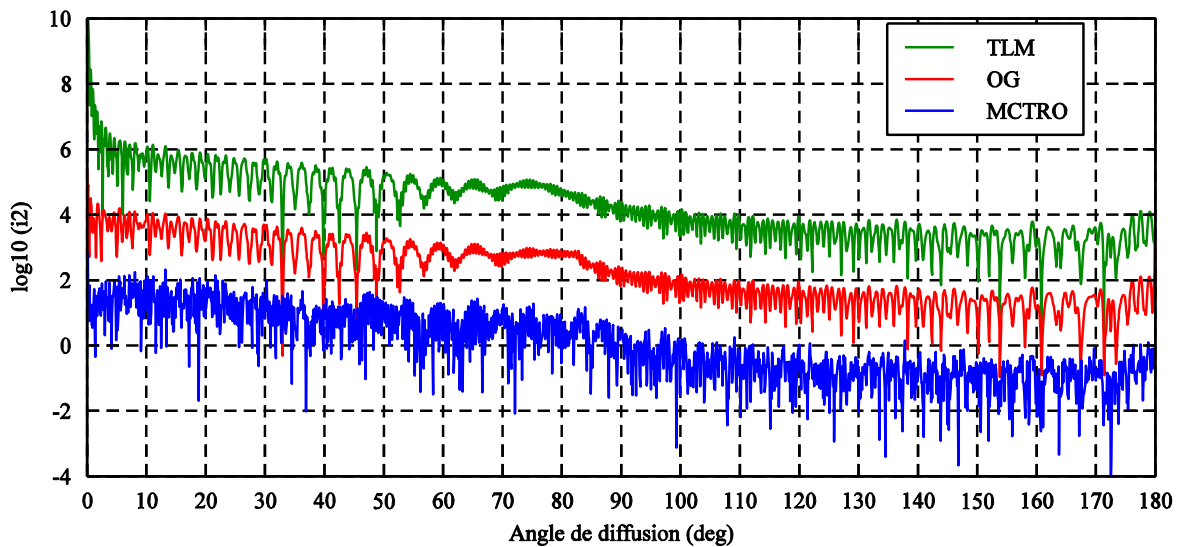


Figure 4.15 Même cas que pour la figure 4.14 mais pour la polarisation perpendiculaire.

#### 4.6 Diffusion d'un sphéroïde : comparaison avec le modèle TRVC

Une fois le modèle MCTRO validé par comparaison avec la théorie rigoureuse pour une sphère, il est possible de l'appliquer pour étudier la diffusion par une particule de forme plus complexe. Comme il n'y a pas de théorie rigoureuse disponible pour la diffusion par un sphéroïde de grand paramètre de taille, excepté le modèle TRVC en 2D, on applique le modèle MCTRO au cas d'un sphéroïde et les résultats de ces deux modèles peuvent être comparés.

On considère un sphéroïde d'axe de révolution  $x$  décrit par :

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2 + z^2}{b^2} = 1 \quad (4.34)$$

avec  $a$  et  $b$  les rayons suivant l'axe de révolution  $x$  et les axes transversaux respectivement. L'onde plane se propage aussi suivant l'axe  $x$ .

Les diagrammes de diffusion d'une gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25 \mu\text{m}$  et de rayon transversal  $b = 50 \mu\text{m}$  sont illustrés sur les figures 4.16-4.17. On trouve que globalement les résultats issus du modèle MCTRO correspondent bien à ceux du modèle TRVC.

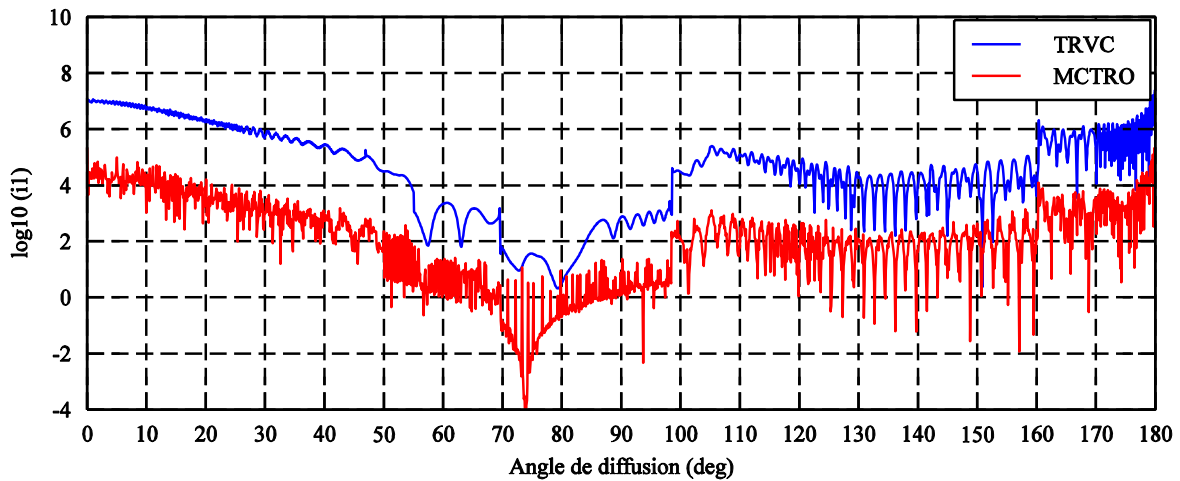


Figure 4.16 Comparaison des diagrammes de diffusion pour la polarisation parallèle, simulés par MCTRO et par TRVC pour une gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25\mu\text{m}$ , de rayon transversal  $b = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Le résultat du modèle MCTRO a été décalé par un facteur  $10^1$  pour permettre la comparaison.

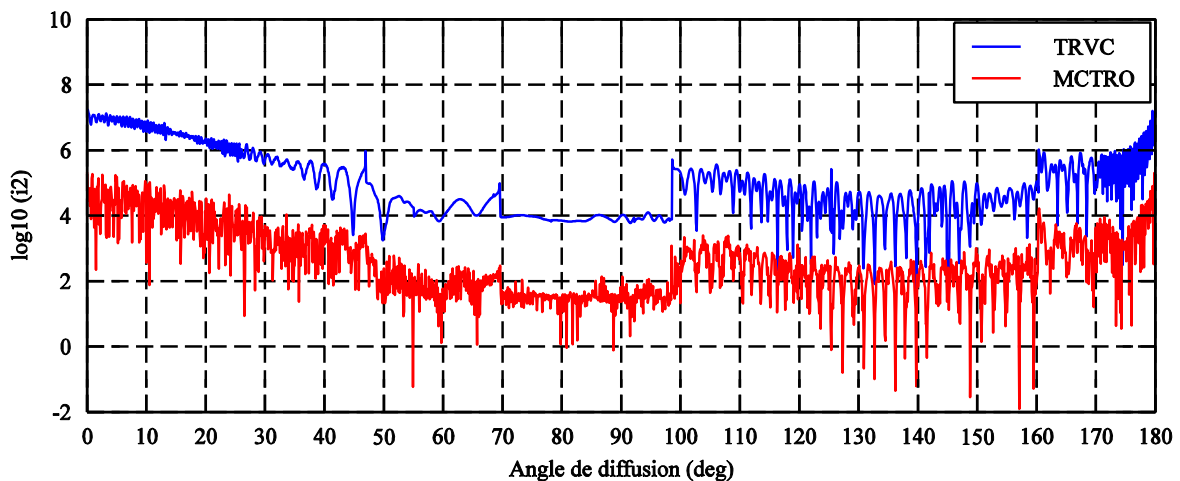


Figure 4.17 Même cas que pour la figure 4.16 mais pour la polarisation perpendiculaire.

Les figures 4.18-4.19 comparent les diagrammes de diffusion d'une bulle sphéroïdale de même taille que pour les figures 4.16-4.17. Les résultats des deux modèles sont aussi en bon accord, même si les résultats du modèle MCTRO apparaissent bruités. En comparant avec les figures d'une gouttelette

sphéroïdale, on peut voir que le comportement diffusif d'une bulle sphéroïdale est totalement différent de celui d'une gouttelette sphéroïdale.

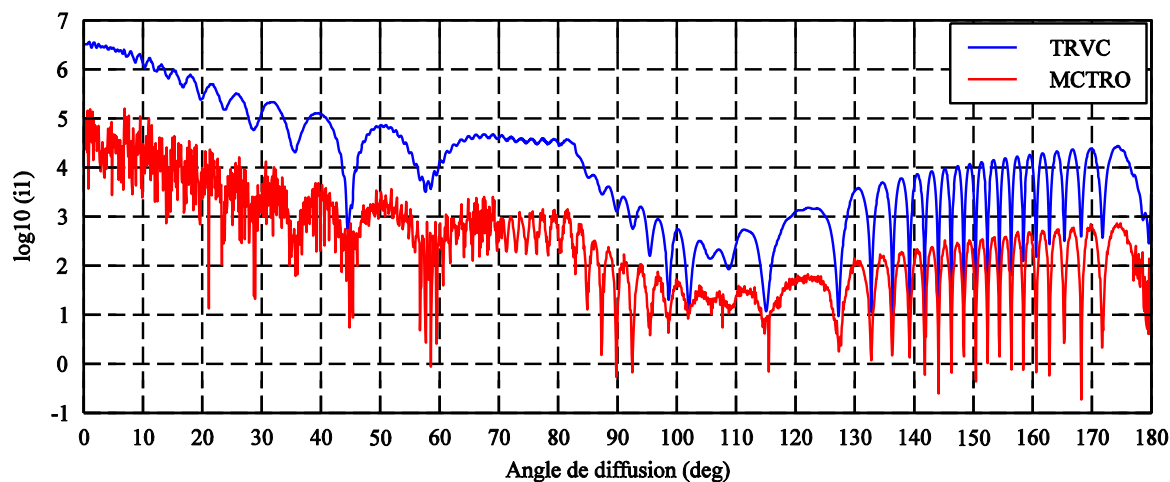


Figure 4.18 Comparaison des diagrammes de diffusion pour la polarisation parallèle, simulés par MCTRO et par TRVC pour une bulle sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25\mu\text{m}$ , de rayon transversal  $b = 50\mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 0.75$  éclairée par une onde plane polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ . Le résultat du modèle de MCTRO a été décalé par un facteur  $10^1$  pour permettre la comparaison.

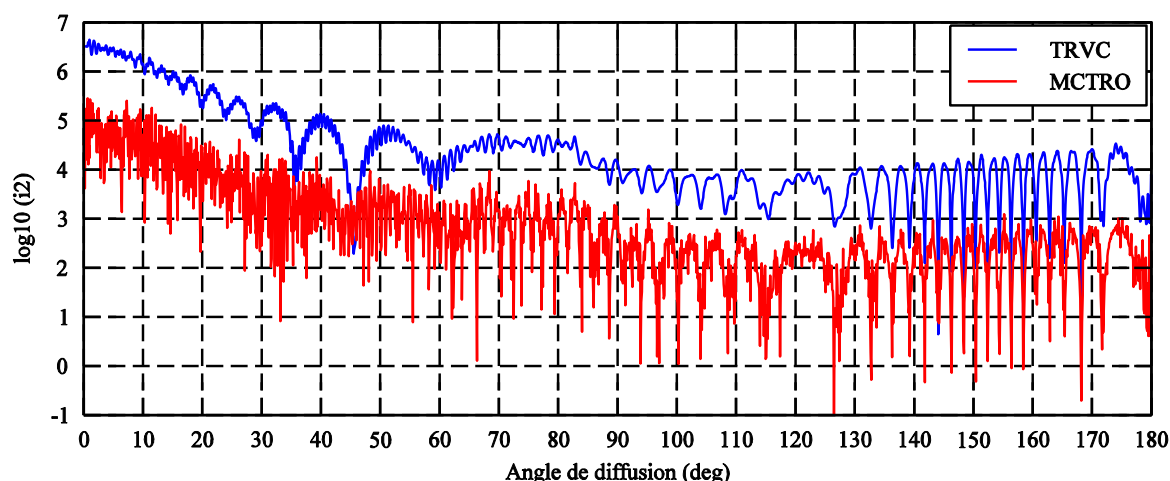


Figure 4.19 Même cas que pour la figure 4.18 mais pour la polarisation perpendiculaire.

## 4.7 Validation du modèle en 3D

En validant le modèle MCRTO en 2D par comparaison avec la théorie rigoureuse, le modèle sera étudié en 3D.

### 4.7.1 Stratégie de parallélisation du programme

Le passage de 2D à 3D du modèle MCRTO ne pose pas de problème spécifique, puisque toutes les formules, en particulier celles permettant de calculer les courbures, ont été introduites dans leur forme la plus générale. En 3D, les directions principales de la surface, de l'onde et du plan de diffusion

ne coïncident évidemment pas. Au cours de la propagation, il est donc nécessaire de faire des rotations à chaque interaction du photon avec la surface de l'objet.

Dans le cas 2D, les photons sont envoyés sur une ligne. En travaillant en 3D, le nombre de photons doit croître de façon extrêmement importante pour obtenir la même précision relative. Afin que les temps de calcul n'augmentent pas excessivement, le code 3D a été parallélisé. La parallélisation est simple et efficace. Il y a deux stratégies :

- la face du domaine par laquelle les photons sont envoyés est divisée en zones (une zone par processeur). Chacune de ces zones est attribuée à un processeur.
- chaque processeur envoie des photons à des positions tirées aléatoirement sur toute la face d'entrée du domaine.

Ces deux techniques donnent les mêmes résultats.

Dans la mesure où la trajectoire de chaque photon est parfaitement indépendante des autres (aucun effet non linéaire n'est pris en compte), le temps de calcul est presque exactement divisé par le nombre de processeurs utilisés. Il suffit ensuite de récupérer et de sommer les contributions venant de tous les processeurs.

#### 4.7.2 Validation du modèle

Comme dans le cas en 2D, le modèle sera validé en 3D sans effet. Ici, on étudie la distribution d'intensité de différents ordres pour un sphéroïde. La figure 4.20 représente la comparaison des distributions d'intensité non polarisée de différents ordres calculées par le modèle TRVC et par le modèle MCTRO pour une gouttelette sphéroïdale. Quand on envoie des photons de nombre  $10^{10}$  sur 5 processeurs, le temps de calcul est de l'ordre de l'heure.

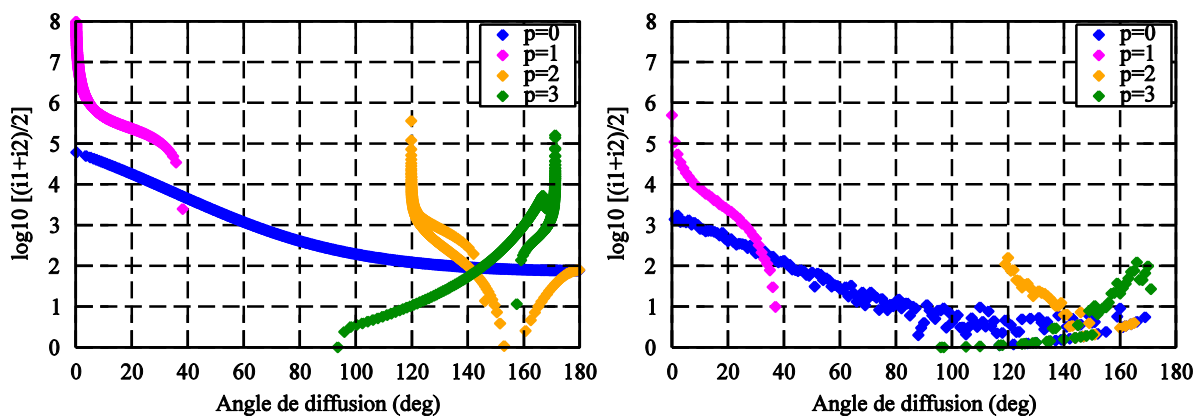


Figure 4.20 Comparaison des distributions d'intensité non polarisée de différents ordres calculées par TRVC et par MCTRO pour une gouttelette sphéroïdale de rayon de révolution  $a = 25 \mu\text{m}$ , de rayon transversal  $b = 50 \mu\text{m}$  et d'indice de réfraction  $m = 1.33$  éclairée par une onde plane non polarisée de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$ .

A partir des figures ci-dessus, on peut constater que les deux modèles sont en bon accord pour la diffusion sans prise en compte d'effets ondulatoires.

## 4.8 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle MCTRO qui est une extension du modèle MCTR. Afin de valider différents effets ondulatoires dans le modèle MCTRO tels que polarisation, phase, interférences et absorption, on a étudié le cas le plus simple : la diffusion d'une onde plane par une sphère homogène. Les photons dans le modèle MCTRO sont décrits non seulement par leur direction comme dans le modèle MCTR, mais aussi par leur polarisation, leur phase et les courbures du front d'onde. Ces nouvelles propriétés permettent de prendre en compte l'effet d'interférences entre les photons. En comparant avec les résultats de TLM pour une sphère, nous avons montré que la précision du modèle MCTRO est considérablement améliorée par rapport au modèle MCTR. La comparaison des diagrammes de diffusion globaux montre qu'en prenant en compte les propriétés ondulatoires, le modèle MCTRO peut prédire le diagramme de diffusion avec une précision satisfaisante dans presque toutes les directions sauf la direction vers l'avant (il faudrait ajouter un modèle pour la diffraction) et autour de l'angle d'arc-en-ciel pour une gouttelette et l'angle critique de diffusion pour une bulle. Puis, le modèle MCTRO a été utilisé pour prédire la diffusion par un sphéroïde éclairé par une onde plane et les résultats ont été comparés avec ceux du modèle TRVC. L'accord des deux modèles est remarquable.

Le code de calcul MCTRO a été validé par l'étude présentée dans ce chapitre. L'effort doit néanmoins être poursuivi pour le rendre facilement utilisable en 3D : re-écriture de certaines parties, lien avec des données issues de DNS, etc.

On voit que la diffraction joue un rôle important sur la diffusion pour les directions vers l'avant. Cet effet n'a pas été pris en considération dans le modèle MCTRO. La prise en compte de la diffraction fait l'objet du chapitre suivant.

# Chapitre 5 : Modèle de l'incertitude d'Heisenberg pour la diffraction

## 5.1 Introduction

La diffraction joue un rôle important dans le phénomène de la diffusion de la lumière par des particules. Notamment, lorsqu'on traite le problème de diffusion avec les modèles basés sur le tracé de rayons, l'effet de diffraction doit être pris en compte séparément. Comme nous l'avons déjà évoqué, ce phénomène peut être décrit par le principe de Huygens-Fresnel. Les très nombreux travaux effectués sur le sujet utilisent presque tous la transformée de Fourier et l'intégrale de diffraction par un obstacle, souvent de forme régulière [73-78]. Dans nos modèles, pour ajouter la diffraction, il suffit donc de faire la projection 2D de l'objet et de calculer la diffraction à partir de cette projection.

Malheureusement, cette approche n'est pas forcément adaptée au problème de la diffusion de la lumière par un objet complexe. En effet, celui-ci n'est pas forcément une particule, mais peut être composé d'éléments séparés : dans le cas d'un jet liquide, le cœur du jet est entouré d'un grand nombre d'éléments liquides de forme les plus diverses. Un modèle adéquat devrait pouvoir prendre en compte la multi-diffraction. L'objectif de ce chapitre est d'étudier quelques voies exploratoires dans cette direction.

Dans la mesure où dans tous les modèles de diffusion présentés dans les chapitres précédents, le principe fondamental est le tracé de rayons, nous nous sommes attachés à regarder les potentiels de modèles pour la diffraction basés sur ce même principe.

En particulier, la théorie géométrique de la diffraction (TGD) complète la théorie de l'optique géométrique en introduisant des rayons diffractés. Cette théorie n'est cependant valable que pour quelques formes très simples, ou problèmes canoniques comme la sphère, le cylindre infini ou le cylindre fini. Pour traiter la diffraction en utilisant une technique de type Monte Carlo, un modèle basé sur le principe d'incertitude d'Heisenberg (IH) a été proposé [79]. Il est basé sur l'idée que la diffraction est un phénomène local, dépendant de la distance entre le rayon lumineux et l'objet diffractant. Plus cette distance est réduite, plus le rayon va diffracter, c'est-à-dire voir sa trajectoire dévier.

Heinisch [79] applique, pour la première fois en 1971, les analyses statistiques de Monte Carlo (MC) pour étudier la diffraction, sans tenir compte des interférences par une ouverture de forme



quelconque en utilisant le principe d'incertitude d'Heisenberg. Puis, en 1999, sur la base du modèle de Heinisch, Freniere [80] simplifie la partie tracé du photon diffracté. Serikov [65] en 2001 prend en compte les interférences entre les photons diffractés et valide le modèle pour des ouvertures de forme simple en comparant ses résultats avec ceux de solutions analytiques.

Pour pouvoir étudier la diffraction de chaque photon, puis prédire le champ diffracté par un système complexe comme un spray, il faut tout d'abord comprendre et reproduire les modèles existants, les évaluer et choisir la meilleure méthode adaptée à notre modèle MCTRO. Cette méthode sera validée pour des ouvertures de forme simple. Toutes les validations seront faites par des comparaisons des distributions d'intensité suivant l'axe avec des solutions mathématiques et aussi par la prédiction d'images de diffraction en 2D.

Dans ce chapitre, on fait d'abord un rappel sur la théorie classique de la diffraction utilisant le principe de Huygens-Fresnel. Puis, une étude bibliographique sur le développement du modèle d'IH sera présentée. Sur la base des théories et modèles existants, nous proposons un modèle de diffraction d'IH en précisant la phase pour la diffraction de Fraunhofer. La validation du modèle sera faite pour des ouvertures de forme typique en comparant avec des résultats analytiques. Puis, le modèle sera étendu aux cas qui n'ont pas été étudiés dans les références précitées : des ouvertures de forme plus complexe telle qu'une ouverture elliptique, puis de deux ouvertures de forme simple.

## 5.2 Rappel du principe de Huygens-Fresnel

Au sens large, la diffraction est tout ce qui ne répond pas aux lois de l'optique géométrique : la diffraction est une propriété ondulatoire.

Le principe de Huygens-Fresnel (HF) explique la propagation d'une onde en termes d'ondes sphériques secondaires générées en tout point du front d'onde.

Soit une onde monochromatique incidente sur une ouverture. D'après le principe de Huygens, tout élément de surface de l'ouverture peut être considéré comme une source secondaire, se propageant de proche en proche (Huygens) et l'amplitude de l'onde émise par cette source secondaire est proportionnelle à la somme de chacun des éléments de surface de l'onde incidente (Fresnel). Les ondes émises par ces différentes sources interfèrent entre elles pour donner l'onde diffractée.

On considère une ouverture  $\Sigma$  contenue dans le plan  $x = 0$ , soit  $E(P_1) = E(y_1, z_1)$  l'amplitude de l'onde incidente en un point  $P_1$  quelconque de l'ouverture, de coordonnées  $(y_1, z_1)$ . L'amplitude de l'onde émise par la source secondaire de surface  $d\Sigma$  autour de  $P_1$  est de la forme  $KE(P_1)d\Sigma$  où  $K$  est une constante qu'il n'est pas utile de chercher à déterminer ici.

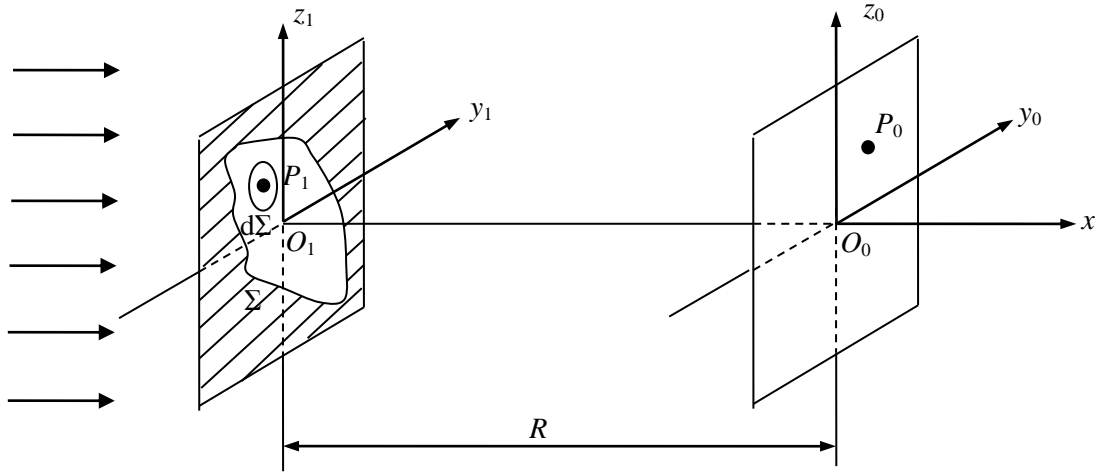


Figure 5.1 Géométrie du principe de Huygens-Fresnel.

Lorsqu'elle arrive au point d'observation  $P_0$ , de coordonnées  $(y_0, z_0)$  dans le plan  $x = R$ , cette onde a pour amplitude, en notation complexe :

$$dE(P_0) = \frac{1}{P_1 P_0} KE(P_1) d\Sigma e^{i\varphi_{P_1 P_0}} = \frac{1}{P_1 P_0} KE(P_1) d\Sigma e^{i\frac{2\pi \overline{P_1 P_0}}{\lambda}} \quad (5.1)$$

Le facteur  $1/\overline{P_1 P_0}$  rend compte de la décroissance de l'amplitude de l'onde sphérique émise en  $P_1$  et  $\varphi_{\overline{P_1 P_0}}$  représente le déphasage de l'onde entre  $P_1$  et  $P_0$ .

L'amplitude totale en  $P_0$  s'obtient en sommant les contributions de tous les points de l'ouverture, soit :

$$E(P_0) = K \iint_{\Sigma} \frac{E(P_1)}{P_1 P_0} e^{i\frac{2\pi \overline{P_1 P_0}}{\lambda}} d\Sigma \quad (5.2)$$

La diffraction de Fresnel ou de Fraunhofer peut être déduite à partir de cette intégration dans les différentes conditions d'observation.

Aux grandes distances, c'est-à-dire lorsqu'on se place en champ lointain, le rayon de courbure des ondes sortantes diffractées devient très grand, si bien que ces ondes peuvent être approximées par des ondes planes dans le plan image : c'est la diffraction dans l'approximation de Fraunhofer et l'amplitude de l'onde diffractée dans ces conditions s'écrit :

$$E(P_0) = K' \iint \frac{E(P_1)}{P_1 P_0} \exp\left[-\frac{ik}{R}(y_0 y_1 + z_0 z_1)\right] dy_1 dz_1 \quad (5.3)$$

où le terme de phase constant lors de l'intégration,  $\exp\left[-\frac{ik}{2R}(y_0^2 + z_0^2)\right]$  est contenu dans la nouvelle constante  $K'$ .

### 5.3 Etude bibliographique sur le modèle de diffraction de l'incertitude d'Heisenberg

Afin de pouvoir appliquer le modèle de l'incertitude d'Heisenberg pour la diffraction dans notre modèle de Monte Carlo par tracé de rayons, il faut bien comprendre les modèles existants d'IH. Une étude bibliographique est présentée ci-après.

#### 5.3.1 Le modèle de Heinishch

Considérons qu'un photon s'approche d'une ouverture, la direction  $\vec{x}$  étant la direction incidente du photon. Soit  $\Delta z'$  la distance du photon par rapport au bord de l'ouverture le plus proche et soit  $\Delta p_{z'}$  l'incertitude de quantité de mouvement de ce photon. On admet qu'on ne peut à la fois connaître avec une précision infinie la distance et la quantité de mouvement et que les incertitudes sur ces deux grandeurs sont reliées par le principe d'incertitude d'Heisenberg :

$$\Delta z' \Delta p_{z'} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.4)$$

où  $\hbar = h/2\pi$  et  $h$  est la constante de Planck, la quantité de mouvement du photon est  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  (ici,  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde avec pour module  $k = 2\pi/\lambda$ , et  $\lambda$  la longueur d'onde). Ainsi, le photon passant près d'un bord a la possibilité d'être dévié dans le plan  $xz'$  (voir figure 5.2) d'un angle maximum de :

$$\tan \sigma_{z'} = \frac{\Delta p_{z'}}{p_x} \geq \frac{1}{2\Delta z'k} \quad (5.5)$$

avec  $\sigma_{z'}$  la variance de la déviation angulaire dans la direction  $z'$ ,  $p_x$  la quantité de mouvement dans la direction  $x$  égale à  $h/\lambda$ .

La direction du photon diffracté peut être déterminée à partir de la probabilité sur l'angle  $\theta_{z'}$  :

$$p(\theta_{z'}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{z'}} \exp\left(-\frac{\theta_{z'}^2}{2\sigma_{z'}^2}\right) \quad (5.6)$$

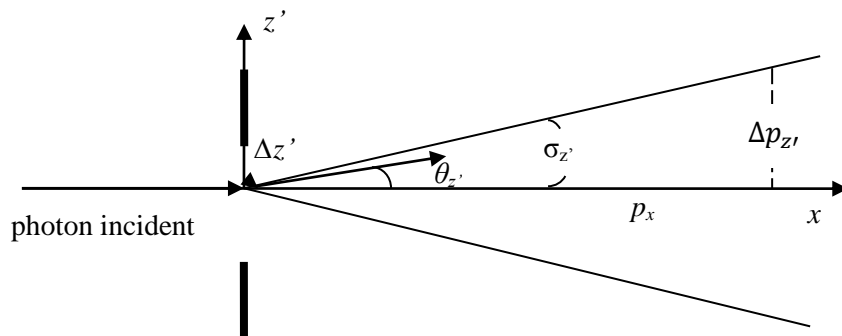


Figure 5.2 Schéma de la déviation du photon diffracté.

Considérons maintenant un faisceau de photons arrivant sur une ouverture de forme quelconque. Soit  $P(y, z)$  un point quelconque de cette ouverture (voir figure 5.3) et  $\Delta z'$  la distance entre le point  $P(y, z)$  et le point du bord de l'ouverture le plus proche, noté  $Q$ . En assimilant la direction  $PQ$  comme le

petit axe d'une ellipse, on peut tracer la plus grande ellipse possible centrée sur  $P$  incluse dans l'ouverture, qui va toucher le bord de l'ouverture. La distance correspondant au grand axe de l'ellipse est notée  $\Delta y'$ . Le photon sera dévié alors à la fois dans le plan  $xz'$  et aussi dans le plan  $xy'$ .

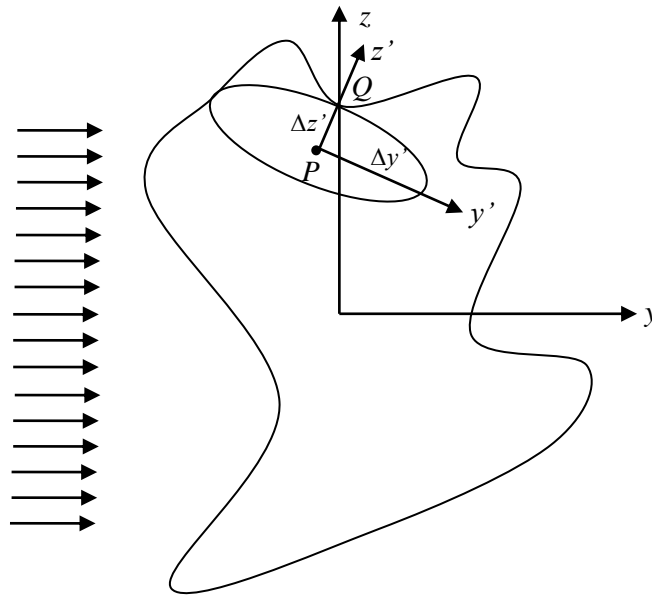


Figure 5.3 Géométrie du modèle d'IH pour la diffraction par une ouverture de forme quelconque.

On obtient la variance de la déviation angulaire  $\sigma_{y'}$  dans la direction  $y'$  de façon similaire à l'équation 5.5:

$$\tan \sigma_{y'} = \frac{\Delta p_{y'}}{p_x} \geq \frac{1}{2\Delta y'k} \quad (5.7)$$

et la probabilité pour le photon de sortir dans la direction  $\theta_{y'}$  est donnée par :

$$p(\theta_{y'}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{y'}} \exp\left(-\frac{\theta_{y'}^2}{2\sigma_{y'}^2}\right) \quad (5.8)$$

La direction du photon diffracté peut donc être déduite à partir des déviations dans les deux directions liées à l'ellipse.

Le modèle proposé par Heinisch peut simuler la distribution d'intensité du champ diffracté qualitativement, mais les franges d'interférence ne peuvent pas être prédites car la phase n'est pas prise en compte.

### 5.3.2 Le modèle de Freniere

En 1999, sur la base du modèle de Heinisch, Freniere [80] propose de combiner les deux déviations angulaires dans les deux directions.

Dans ce modèle, la distance  $\Delta y'$  est obtenue directement par la distance entre le point d'incidence et le bord de la surface de l'objet suivant la direction  $y'$ . Elle n'est plus déduite en déterminant l'ellipse la plus grande à l'intérieur de l'ouverture comme précédemment. On postule que

la distribution de probabilité pour les déviations angulaires de chaque direction est une distribution gaussienne, et que les mécanismes correspondant aux déviations des deux directions sont indépendants et séparables. Ainsi, la distribution de probabilité pour les déviations angulaires du photon  $\theta_z$  et  $\theta_y$ , obéit à une distribution gaussienne elliptique:

$$p(\theta_{z'}, \theta_{y'}) = p(\theta_{z'})p(\theta_{y'}) = \frac{1}{2\pi\sigma_{z'}\sigma_{y'}} \exp\left(-\frac{\theta_{z'}^2}{2\sigma_{z'}^2} - \frac{\theta_{y'}^2}{2\sigma_{y'}^2}\right) \quad (5.9)$$

En comparant avec les calculs analytiques suivant l'axe pour la diffraction par un trou circulaire en champ lointain, le résultat simulé de ce modèle est en accord qualitatif avec les résultats analytiques. Cependant, les interférences ne sont pas encore prises en compte.

### 5.3.3 Le modèle de Serikov

Les auteurs des références [79-82] utilisent le modèle d'IH pour prédire qualitativement la diffraction de Fraunhofer et de Fresnel. Cependant, les oscillations du champ diffracté ne peuvent pas être reproduites car les interférences entre les photons ne sont pas prises en compte. En 2001, pour pouvoir générer des interférences Serikov propose de modéliser le photon par un nombre complexe, véhiculant une information sur l'amplitude et la phase.

Pour obtenir la direction, Serikov tire une paire de valeurs  $\tan \theta_{z'}$  et  $\tan \theta_{y'}$ , en utilisant la distribution gaussienne ci-dessous [65] :

$$\tan \theta_{z'} = \sqrt{2}\sigma_{z'}\sqrt{-\ln U_1} \cos \varphi \quad (5.10)$$

$$\tan \theta_{y'} = \sqrt{2}\sigma_{y'}\sqrt{-\ln U_1} \sin \varphi \quad (5.11)$$

où  $\varphi = 2\pi U_2$ , et  $U_1$  et  $U_2$  sont des nombres aléatoires indépendants de distribution uniforme répartie sur  $[0,1]$ . La phase est calculée à partir de la distance parcourue par le photon :

$$\phi = \exp\left[i\frac{2\pi}{\lambda}(s - s_0)\right] \quad (5.12)$$

où  $(s - s_0)$  est la distance parcourue par le photon à partir de la position initiale caractérisée par  $s_0$ .

Pour des ouvertures beaucoup plus grandes que la longueur d'onde du faisceau incident, Likeness recommande de n'appliquer le modèle de diffraction d'IH que lorsque le photon passe à une distance du bord de l'ouverture de moins de  $50\lambda$  à  $500\lambda$  [82]. D'un autre côté, Morbey et Hutchings pensent qu'appliquer le modèle à partir d'environ  $100\lambda$  est suffisant pour obtenir de bons résultats [65].

Les distributions d'intensité suivant l'axe du champ diffracté par une fente et par un trou circulaire ont été simulées par ce modèle en prenant en compte les interférences et ont été comparées avec des résultats analytiques. On observe que le modèle est capable de reproduire les franges d'interférence, en termes de positions et d'amplitude des maxima et des minima d'intensité. Pour cela, il faut cependant introduire un coefficient ad-hoc, permettant de vérifier les inégalités (5.5) et (5.7). On obtient de bons résultats pour :

$$\tan \sigma_{z'} = 3 \times \frac{1}{2\Delta z'k} \quad (5.13)$$

$$\tan \sigma_{y'} = 3 \times \frac{1}{2\Delta y'k} \quad (5.14)$$

Etant données les distances  $\Delta z'$  et  $\Delta y'$  correspondant à la position à laquelle se présente le photon sur l'ouverture, les déviations angulaires  $\sigma_{z'}$  et  $\sigma_{y'}$  peuvent être déduites par les deux équations ci-dessus.

## 5.4 Notre modèle d'IH

Sur la base des travaux de recherche présentés ci-dessus, des codes de simulation de la diffraction selon le modèle d'IH ont été écrits. Ces codes sont validés par comparaison avec les résultats trouvés dans la littérature.

### 5.4.1 Configuration géométrique

Soit  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$  un repère cartésien. Une ouverture est pratiquée dans le plan  $(\vec{y}, \vec{z})$  et un faisceau incident se propage suivant la direction  $\vec{x}$  (voir figure 5.4). On considère un point  $P$  à l'intérieur de l'ouverture, correspondant à la position d'un photon incident. Soit  $Q$  le point du bord de l'ouverture, le plus proche de  $P$ . On appelle  $z'$  la direction correspondant à  $PQ$ . Dans le plan défini par  $(\vec{x}, \vec{z}')$ , la déviation angulaire du photon par rapport à  $\vec{x}$  est l'angle  $\theta_{z'}$ . Dans le plan perpendiculaire, défini par  $(x, y')$ , avec  $y'$  orthogonal à la fois à  $x$  et à  $z'$ , le photon est dévié de l'angle  $\theta_{y'}$ .

On note  $\alpha$  l'angle entre la direction  $z'$  et  $y$ ,  $\vec{e} = (e_x, e_y, e_z)^T$  le vecteur unitaire suivant la direction de propagation du photon diffracté.

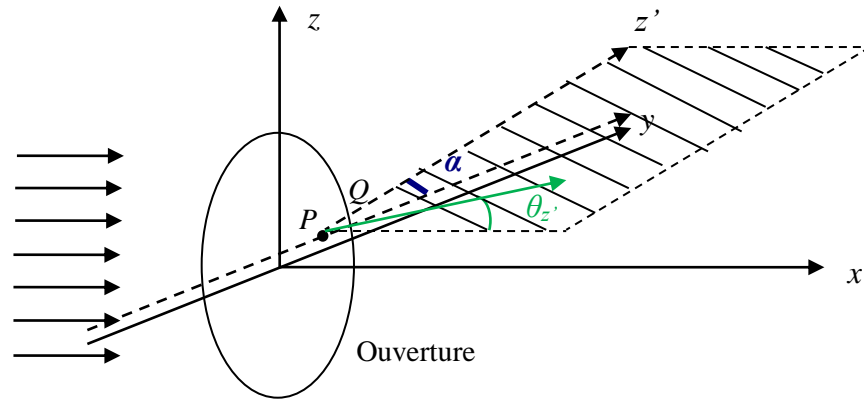


Figure 5.4 Géométrie de la détermination de la direction de diffraction d'un photon.

La projection de  $e_y$  et  $e_z$  dans la direction  $z'$  est  $(e_y \cos \alpha + e_z \sin \alpha)$  et on a la relation suivante :

$$\frac{e_y \cos \alpha + e_z \sin \alpha}{e_x} = \tan \theta_{z'} \quad (5.15)$$

La même expression peut être obtenue pour la direction  $y'$  :

$$\frac{e_y \cos(\alpha + \pi/2) + e_z \sin(\alpha + \pi/2)}{e_x} = \tan \theta_{y'} \quad (5.16)$$

Le vecteur  $\vec{e}$  étant un vecteur unitaire, on a :

$$e_x^2 + e_y^2 + e_z^2 = 1 \quad (5.17)$$

En combinant les équations (5.15-5.17), on peut déduire le vecteur  $(e_x, e_y, e_z)$  par :

$$e_x = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 \theta_{z'} + \tan^2 \theta_{y'}}} \quad (5.18)$$

$$e_y = \frac{\tan \theta_{z'} e_x - e_z \sin \alpha}{\cos \alpha} \quad (5.19)$$

$$e_z = e_x \frac{\tan \theta_{y'} + \tan \alpha}{\cos \alpha + \tan \alpha \sin \alpha} \quad (5.20)$$

En déterminant la direction de diffraction de chaque photon qui porte l'amplitude complexe  $\phi$  calculée par l'équation (5.12), le champ diffracté peut être calculé par une superposition de toutes les contributions des photons ayant la même direction de diffraction.

#### 5.4.2 Le problème numérique lié au modèle de Serikov

Comme décrit dans le principe de Huygens-Fresnel et la théorie géométrique de diffraction, la phase de l'onde secondaire et d'un rayon diffracté ne dépend que du trajet optique et de la longueur d'onde incidente. Donc, Serikov [65] définit la phase de chaque photon diffracté par  $\exp\left[i\frac{2\pi}{\lambda}r\right]$  où  $r$  est la distance parcourue par le photon. Théoriquement, cette définition est valable aussi bien pour la diffraction en champ proche (Fresnel) et la diffraction en champ lointain (Fraunhofer). Cependant, pour le champ lointain, la distance très grande peut poser un problème numérique. Ce problème est exposé ci-après en comparant les calculs numériques avec les résultats de l'expression analytique.

Le code basé sur le modèle de Serikov a été écrit pour la diffraction par une fente. La distribution du champ diffracté par une fente déduite par le principe d'HF est donnée par [83] :

$$I(P) = I_0 \left[ \frac{\sin\left(\frac{1}{2}ka \sin \theta\right)}{\frac{1}{2}ka \sin \theta} \right]^2 \quad (5.21)$$

avec  $P$  le point d'observation,  $a$  la largeur de la fente,  $\theta$  l'angle de diffraction et  $I_0$  l'intensité au centre ( $\theta = 0$ ).

La figure 5.5 présente la comparaison des distributions d'intensité diffractée par une fente de largeur  $a = 4\lambda$  obtenues avec notre code et par le résultat analytique. La distance d'observation est de  $R = 200\lambda$ . En comparant avec les résultats présentés dans la référence [65] dans la même configuration (voir figure 5.6), on constate que, dans ce cas, notre code peut prédire correctement le champ diffracté. Les positions et les intensités des maxima et minima correspondent mieux aux résultats analytiques que dans la référence [65].

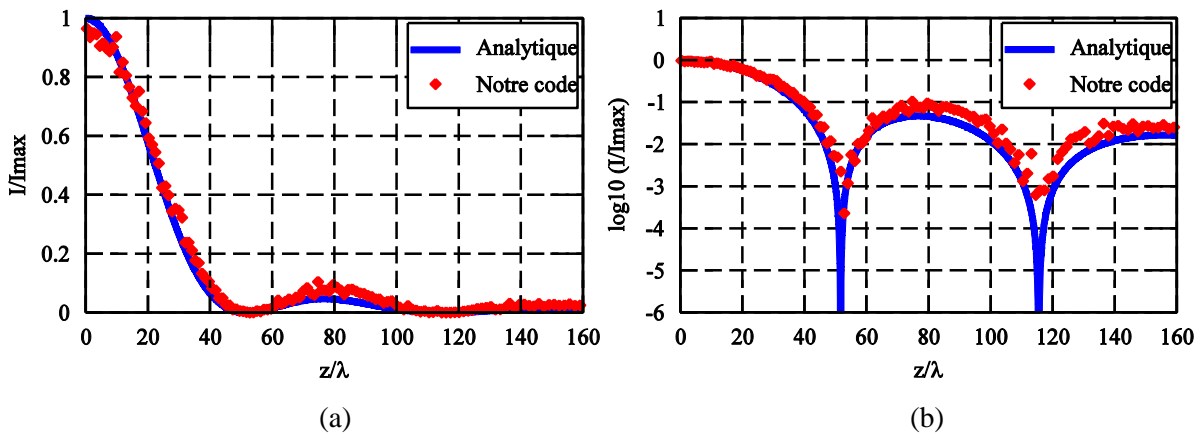


Figure 5.5 Comparaison des distributions d'intensité normalisées du champ diffracté pour une fente de largeur  $a = 4\lambda$  ( $\lambda = 0.6328\mu m$ ) simulées par notre code et par l'expression analytique. La distance d'observation est de  $R = 200\lambda$ . Le nombre total de photons envoyés est de  $10^8$ .

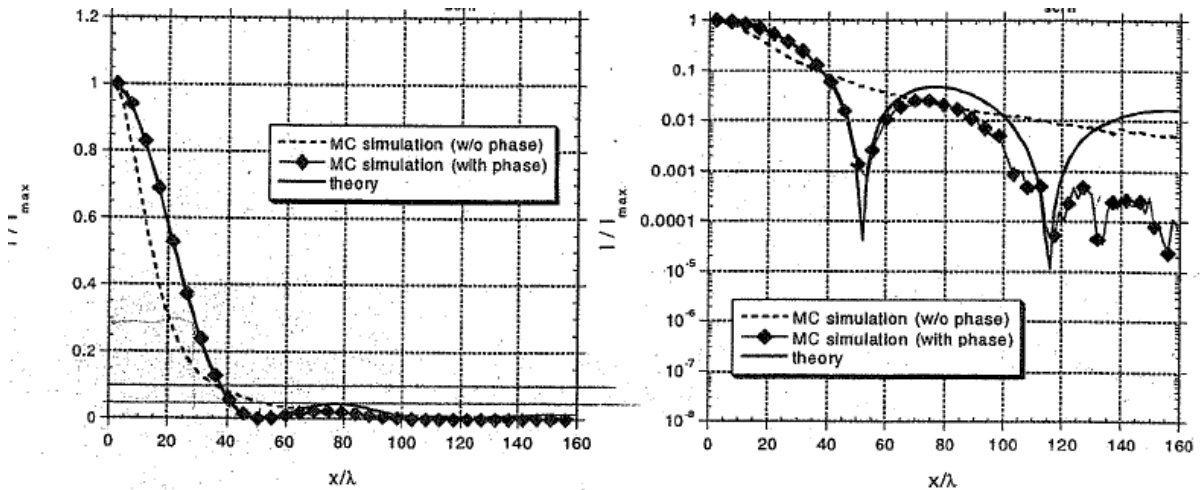


Figure 5.6 Même cas que pour la figure 5.5 mais ce sont les résultats présentés dans la référence [65].

Positionnons nous maintenant à une distance d'observation beaucoup plus grande :  $R = 20000\lambda$ . Les résultats calculés par le modèle de Serikov et par l'expression analytique sont présentés sur la figure 5.7. On peut voir que dans le cas d'un plan d'observation situé à grande distance, le modèle ne peut pas prédire correctement le champ diffracté : il y a un problème numérique dans le calcul du terme de phase  $\exp\left[i\frac{2\pi}{\lambda}r\right]$ .



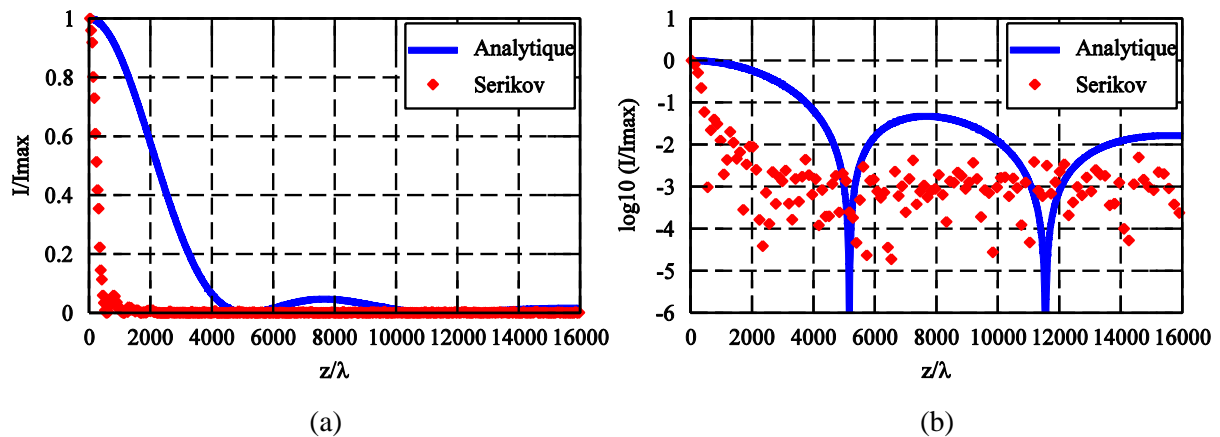


Figure 5.7 Même cas que pour la figure 5.5 mais la distance d'observation est de  $R = 20000\lambda$ .

### 5.4.3 Amélioration du modèle de diffraction d'IH

Sur la base des études sur les théories classiques de diffraction et le développement du modèle d'IH, nous proposons un modèle de diffraction d'IH utilisant des notions liées à la diffraction de Fraunhofer. Afin de simuler la diffraction en champ lointain, le photon portera une phase de type Fraunhofer  $\exp\left[-\frac{ik}{R}(y_0y_1 + z_0z_1)\right]$ . Le champ diffracté total en un point d'observation est alors la somme des champs complexes des photons arrivés en ce point. La direction de diffraction est déterminée par la méthode d'IH.

La théorie géométrique de la diffraction constate que la phase du champ d'un rayon est proportionnelle à la différence de longueur optique du rayon par rapport à un point de référence. L'argument du terme de phase peut être considéré comme la différence de phase entre les ondes secondaires du point  $P_1$  et de l'origine  $O_1$  (voir figure 5.1). C'est une hypothèse très importante pour l'extension du modèle de diffraction d'IH aux ouvertures plus complexes et multiples.

## 5.5 Validation du modèle pour la diffraction de Fraunhofer par des ouvertures de forme simple

La validation du modèle de diffraction décrite ci-dessus est faite pour des ouvertures de forme simple comme une fente, une ouverture carrée et une ouverture circulaire par comparaison avec les solutions analytiques déduites par la théorie de diffraction de Fraunhofer. Les photons sont lancés sur tout le plan incident (voir figure 5.8). Les distributions d'intensité suivant l'axe et les images de diffraction sont simulées et vérifiées. A noter que tous les résultats ont été obtenus en utilisant le coefficient 3, c'est-à-dire les équations 5.13 et 5.14.

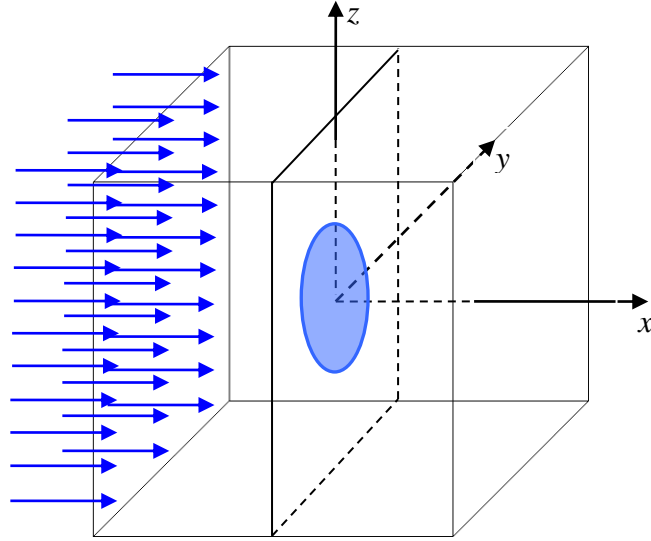


Figure 5.8 Géométrie du modèle de diffraction appliqué dans le modèle MCTRO.

### 5.5.1 Diffraction par une fente

La distribution d'intensité normalisée du champ diffracté par une fente de largeur  $a = 10\lambda$  simulée par notre modèle d'IH est comparée avec celle calculée par l'expression analytique (voir figure 5.9). On constate que l'accord est très correct. Des calculs ont été aussi effectués pour  $a = 20\lambda$ ,  $50\lambda$ ,  $100\lambda$  et on trouve que l'accord est également bon.

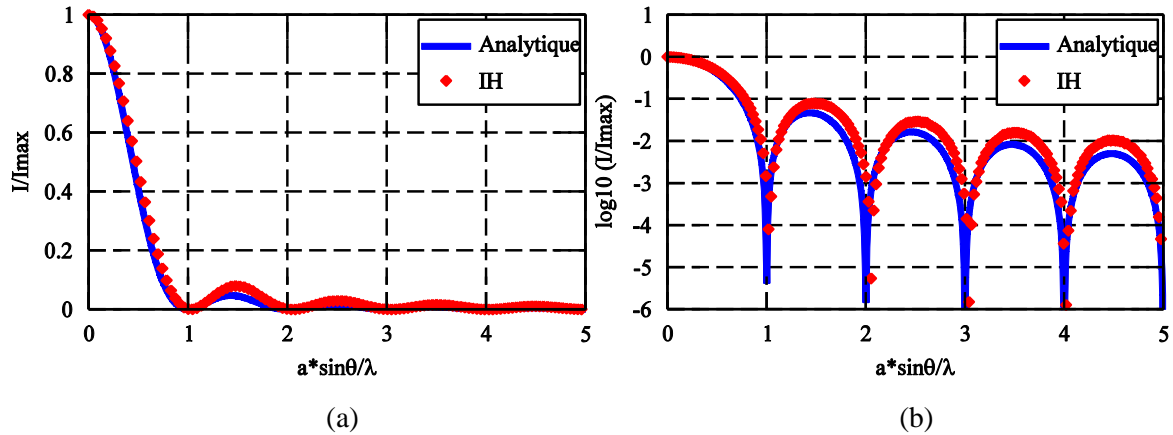


Figure 5.9 Comparaison des distributions d'intensité normalisée du champ diffracté pour une fente de largeur  $a = 10\lambda$  ( $\lambda = 0.6328\mu m$ ) simulées par notre modèle et par l'expression analytique en champ lointain.

### 5.5.2 Diffraction par une ouverture carrée

Pour le champ lointain, l'expression mathématique du champ diffracté suivant l'axe  $z$  par une ouverture carrée déduite par le principe d'HF est donnée par :

$$I(P) = I_0 \left[ \frac{\sin\left(\frac{l_z}{\lambda} \sin \theta\right)}{\left(\frac{l_z}{\lambda} \sin \theta\right)} \right]^2 \quad (5.22)$$

où  $l_z$  est la largeur de l'ouverture carrée.

On compare les champs diffractés normalisés par une ouverture carrée obtenus par notre modèle d'IH et par l'équation analytique (voir figure 5.10). Les deux courbes sont en assez bon accord. L'image de diffraction en 2D simulée est montrée sur la figure 5.11 et elle correspond à l'image que l'on observerait expérimentalement. Les points lumineux sont distribués dans les deux directions  $y, z$  et l'énergie diffractée est concentrée au centre. A titre d'exemple, pour simuler l'image de la figure 5.11, il a fallu envoyer  $10^8$  photons et le temps de calcul sur un PC standard est de quelques heures.

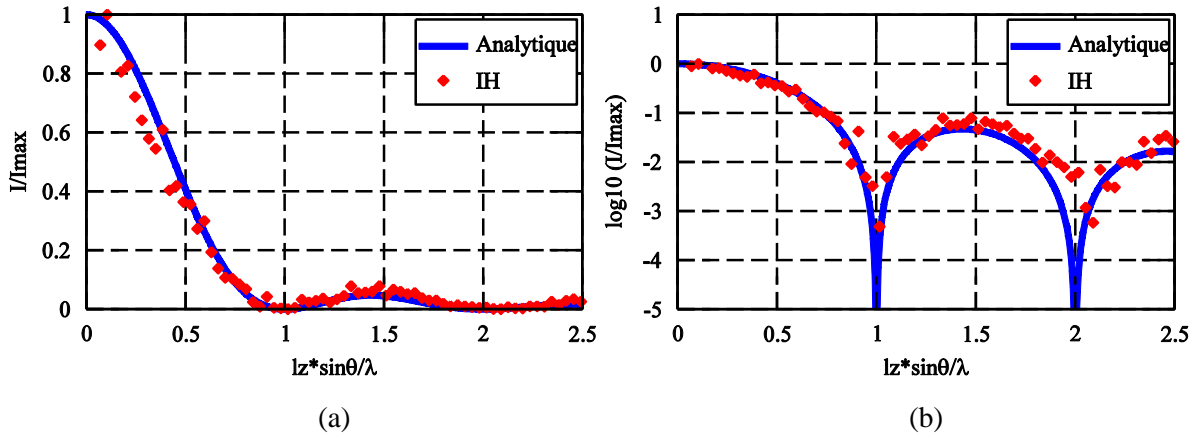


Figure 5.10 Comparaison des distributions d'intensité normalisée du champ diffracté pour une ouverture carrée de largeur  $l_z = l_y = 10\lambda$  éclairée par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu m$  obtenues par notre modèle de diffraction et par l'expression analytique en champ lointain.

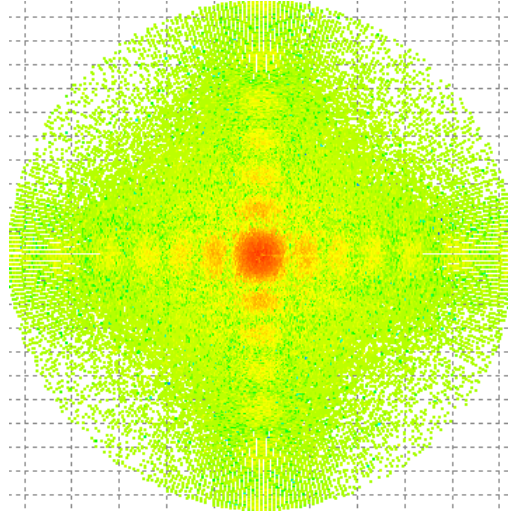


Figure 5.11 Image de diffraction de Fraunhofer simulée par le modèle pour une ouverture carrée et les mêmes paramètres que ceux de la figure 5.10.

### 5.5.3 Diffraction par une ouverture circulaire

Dans le champ lointain, l'équation analytique du champ diffracté suivant l'axe  $z$  par une ouverture circulaire déduite par le principe d'HF est donnée par :

$$I(P) = I_0 \left[ \frac{2J_1(ka \sin \theta)}{ka \sin \theta} \right]^2 \quad (5.23)$$

où  $a$  est le rayon de l'ouverture circulaire et  $J_1$  est la fonction de Bessel de premier ordre.

La figure 5.12 représente la comparaison des distributions d'intensité normalisées du champ diffracté par une ouverture circulaire obtenues par notre modèle et par l'expression analytique. Le résultat de notre modèle d'IH correspond au résultat analytique. L'image de diffraction en 2D simulée est illustrée sur la figure 5.13. Selon l'expression, la distribution d'intensité ne dépend que de l'angle de diffraction  $\theta$ , la figure de diffraction par une ouverture circulaire est composée de franges circulaires et l'intensité de diffraction est concentrée dans le disque lumineux central qui est appelé la tâche d'Airy. Les intensités des cercles concentriques deviennent de plus en plus atténuées lorsqu'on s'éloigne du centre.

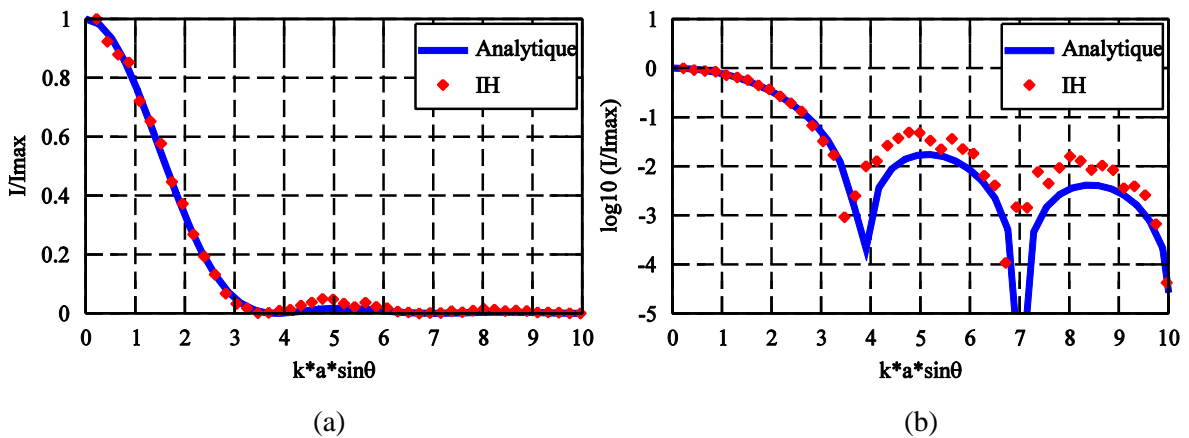


Figure 5.12 Comparaison des distributions d'intensité normalisées du champ diffracté pour une ouverture circulaire de rayon  $a = 25\mu m$  éclairée par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu m$  obtenues par notre modèle et par l'expression analytique en champ lointain.

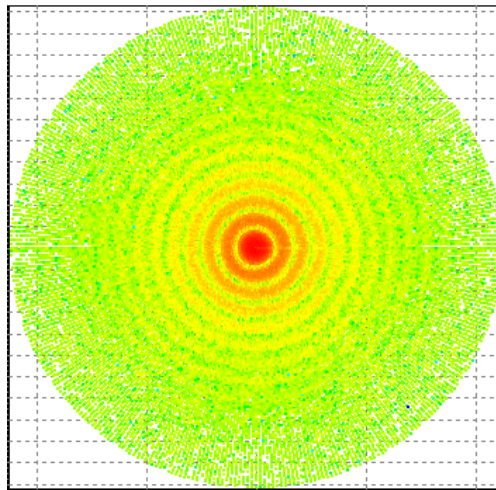


Figure 5.13 Image de diffraction de Fraunhofer simulée par notre modèle d'IH pour une ouverture circulaire avec les mêmes conditions que sur la figure 5.12.

## 5.6 Diffraction de Fraunhofer par une ouverture elliptique

Nous allons maintenant étendre au cas d'une ouverture elliptique.

### 5.6.1 Solution analytique

On considère une ouverture elliptique de grand axe  $2a$  et de petit axe  $2b$  dans le plan  $(y_1, z_1)$  centrée sur l'origine. Cette ouverture est éclairée par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda$  (voir figure 5.14). Le rapport  $b/a$  est nommé le rapport axial  $\epsilon$ . L'axe  $x_0$  est la direction de propagation de l'onde ou l'axe optique normal à l'ouverture. Selon le principe de Huygens-Fresnel, le champ diffracté  $U(x_0, y_0, z_0)$  au point d'observation  $P_0$  peut être exprimé comme [84] :

$$U(x_0, y_0, z_0) = \frac{C}{\lambda x} \iint_{\text{Ellipse}} U_A(0, y_1/\epsilon, z_1) \times \exp\left[-\frac{jk}{x}(z_0 z_1 + y_0 y_1)\right] \times \exp\left[-\frac{jk}{2x}(z_1^2 + y_1^2)\right] dz_1 dy_1 \quad (5.24)$$

$$\text{avec } C = -j \exp(jkx) \exp\left[-\frac{jk}{2x}(z_0^2 + y_0^2)\right] \quad (5.25)$$

où l'amplitude  $U_A(0, y_1/\epsilon, z_1)$  est l'éclairage de l'ouverture.  $(x_1, y_1, z_1), (x_0, y_0, z_0)$  représentent respectivement le système de coordonnées dans le plan de l'ouverture et dans le plan d'observation, avec  $x = |x_1 - x_0|$  pour la distance entre les deux plans (c'est-à-dire la distance d'observation). Pour un éclairage uniforme de l'ouverture :

$$U_A(0, y_1/\epsilon, z_1) = \begin{cases} 1 & \text{à l'intérieur de l'ouverture} \\ 0 & \text{à l'extérieur de l'ouverture} \end{cases} \quad (5.26)$$

En définissant la géométrie de l'ouverture dans les coordonnées elliptiques :

$$x_1 = 0, y_1 = \epsilon \rho \sin \theta, z_1 = \rho \cos \theta \quad (5.27)$$

Puis,

$$dz_1 dy_1 = \epsilon \rho d\rho d\theta \quad (5.28)$$

Et en effectuant la substitution :

$$t = (\rho/a)^2 \quad (5.29)$$

On obtient :

$$U(x_0, y_0, z_0) = C \frac{1}{2} \frac{\epsilon a^2}{\lambda x} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \exp\left\{j \frac{ka^2}{2x} t [1 + (\epsilon^2 - 1) \sin^2 \theta]\right\} \times \exp\left[-j \frac{ka^2}{x} t^{1/2} \left(\frac{z_0}{a} \cos \theta + \epsilon \frac{y_0}{a} \theta\right)\right] dt d\theta \quad (5.30)$$

On peut résoudre cette intégrale par la méthode numérique développée par Hopkins [84]. Pour ce faire, on discrétise  $t = (\rho/a)^2 \in [0, 1]$  par pas de  $\delta_t$  et  $\theta \in [0, 2\pi]$  par pas de  $\delta_\theta$ , le nombre de pas en  $t$  étant égal à  $N_t$  et le nombre de pas en  $\theta$  étant égal à  $N_\theta$ . Cette intégrale peut alors être discrétisée comme suit [84] :

$$U(x_0, y_0, z_0) = C \frac{1}{2} \delta_t \delta_\theta \epsilon F \sum_p^{N_t} \sum_q^{N_\theta} \exp[jS(t_p, \theta_q)] \times \text{sinc}\left[\frac{1}{2} \delta_t S_t(t_p, \theta_q)\right] \text{sinc}\left[\frac{1}{2} \delta_\theta S_\theta(t_p, \theta_q)\right] \quad (5.31)$$

où  $F = a^2/\lambda x$  définit le nombre de Fresnel. Kathuria [84] donne les expressions de termes  $S, S_t, S_\theta$  en champ lointain :

$$S(t, \theta) = -t^{1/2} \left[ \cos \theta \left( \frac{kaz_0}{x} \right) + \varepsilon \sin \theta \left( \frac{kay_0}{x} \right) \right] \quad (5.32)$$

$$S_t(t, \theta) = \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{2} t^{-1/2} \left[ \cos \theta \left( \frac{kaz_0}{x} \right) + \varepsilon \sin \theta \left( \frac{kay_0}{x} \right) \right] \quad (5.33)$$

$$S_\theta(t, \theta) = \frac{\partial S}{\partial \theta} = t^{1/2} \left[ \sin \theta \left( \frac{kaz_0}{x} \right) - \varepsilon \cos \theta \left( \frac{kay_0}{x} \right) \right] \quad (5.34)$$

où  $S_t$  et  $S_\theta$  sont les dérivées de la fonction  $S$  par rapport à  $t$  et  $\theta$ . Pour déterminer les valeurs  $\delta_t, \delta_\theta$ , les valeurs de  $N_t$  et  $N_\theta$  sont choisies de façon à ce que l'erreur sur  $U$  soit inférieure à 0.01. Kathuria utilise  $N_t = N_\theta = 80$  pour obtenir une bonne précision.

L'intensité dans le plan d'observation est proportionnelle au carré du module du champ, c'est à dire :

$$I = \left| \frac{1}{2} \delta_t \delta_\theta \varepsilon F \sum_p^{N_t} \sum_q^{N_\theta} \exp[jS(t_p, \theta_q)] \times \text{sinc} \left[ \frac{1}{2} \delta_t S_t(t_p, \theta_q) \right] \text{sinc} \left[ \frac{1}{2} \delta_\theta S_\theta(t_p, \theta_q) \right] \right|^2 \quad (5.35)$$

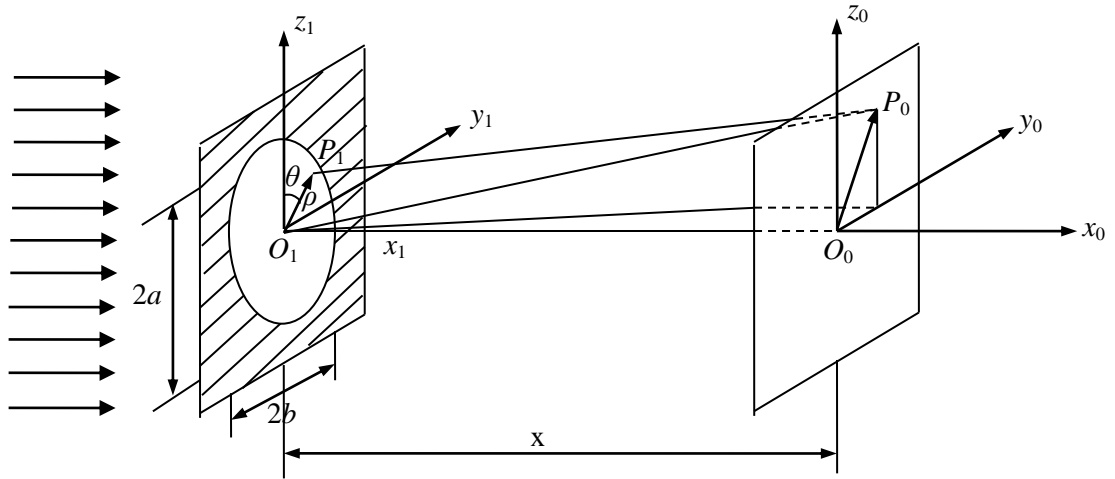


Figure 5.14 Géométrie de la diffraction de Fraunhofer par une ouverture elliptique.

Les valeurs calculées à l'aide de l'équation 5.35 vont servir à valider le modèle IH.

### 5.6.2 Résultats du modèle d'IH et comparaison avec la solution analytique

Les images de diffraction en 2D obtenues avec notre modèle d'IH pour les ouvertures elliptiques sont présentées sur les figures 5.15 et 5.16. A partir de ces deux figures, on peut voir que les axes majeur et mineur sont échangés dans le champ lointain : la diffraction par une ellipse horizontale donne une tache lumineuse verticale et la diffraction par une ellipse verticale donne une tache lumineuse horizontale. L'ellipticité des images qu'on observe reste la même que celles des ouvertures provoquant la diffraction. Ce sont des résultats bien connus pour la diffraction par une ouverture elliptique [84].

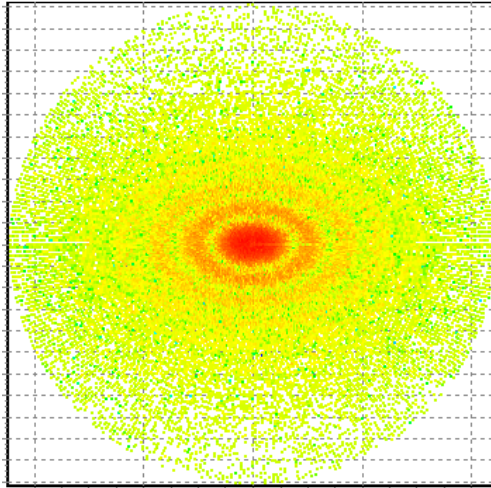


Figure 5.15 Image de diffraction de Fraunhofer simulée avec le modèle IH pour une ouverture elliptique de rayon suivant l'axe  $y_0$   $a = 25\mu\text{m}$  et suivant l'axe  $z_0$   $b = 40\mu\text{m}$ .

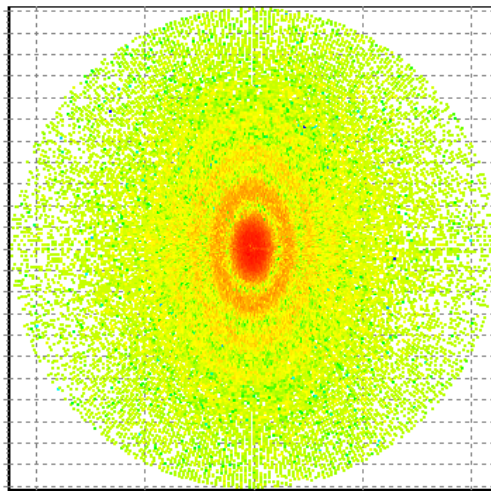


Figure 5.16 Même cas que la figure 5.15 mais pour les rayons  $a = 40\mu\text{m}$  et  $b = 25\mu\text{m}$ .

Pour quantifier la précision du modèle IH, on compare dans la figure 5.17 les distributions d'intensité du champ diffracté suivant l'axe  $y_0$  calculées par les expressions de Kathuria et notre modèle d'IH. On peut voir que le modèle IH permet de prédire les principales caractéristiques de la diffraction de Fraunhofer par une ouverture elliptique.

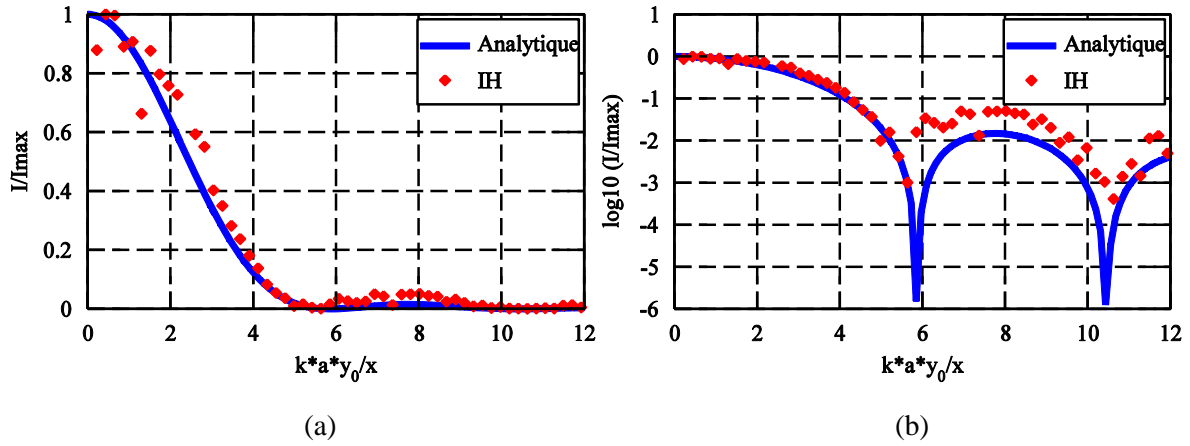


Figure 5.17 Comparaison des distributions d'intensité normalisée du champ diffracté pour une ouverture elliptique de rayons  $a = 25\mu\text{m}$  et  $b = 16.5\mu\text{m}$  éclairée par une onde plane de longueur d'onde  $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$  obtenues par notre modèle d'IH et par l'expression analytique en champ lointain.

## 5.7 Diffraction de Fraunhofer par deux ouvertures de forme simple

Notre modèle d'IH est étendu au cas de deux ouvertures de forme simple telles que deux fentes, deux ouvertures carrées ou deux ouvertures circulaires. On sait que pour le cas de plus d'une ouverture, il faut aussi prendre en compte les interférences entre les photons provenant des différentes ouvertures. Le centre d'une des deux ouvertures ( $y_{1c}, z_{1c}$ ) est considéré comme référence. La phase d'un photon diffracté devient  $\exp\left\{-\frac{ik}{R}[y_0(y_1 - y_{1c}) + z_0(z_1 - z_{1c})]\right\}$ .

Le champ diffracté par deux fentes de même largeur est donné par :

$$I(P) = I_0 \left[ \frac{\sin\left(\frac{1}{2}ka \sin \theta\right)}{\frac{1}{2}ka \sin \theta} \right]^2 \left[ 4\cos^2\left(\frac{kd}{2} \sin \theta\right) \right] \quad (5.36)$$

avec  $a$  la largeur des deux fentes et  $d$  la distance entre les deux fentes.

La figure 5.18 illustre la comparaison du champ diffracté normalisé par deux fentes simulé par notre modèle d'IH et par l'expression analytique. Les deux résultats correspondent bien.

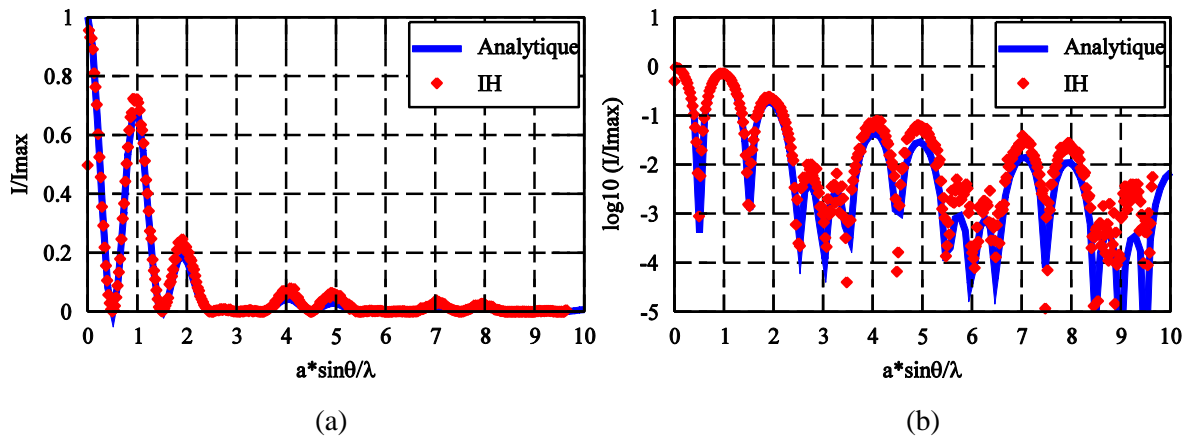


Figure 5.18 Comparaison des distributions d'intensité normalisée du champ diffracté normalisé par deux fentes de largeur  $a = 10\lambda$  ( $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ ) et de distance inter-fentes  $d = 3a$  obtenues par notre modèle d'IH et par l'expression analytique en champ lointain.



Les images de diffraction en 2D par deux ouvertures carrées et circulaires ont été également simulées (voir figures 5.19-5.22), en faisant varier la position relative de leurs centres. Les distributions des franges correspondent à l'interprétation physique que l'on peut en avoir. On remarque que la figure de diffraction n'est pas à symétrie de révolution comme dans le cas d'une seule ouverture. Il s'agit d'une figure striée de franges perpendiculaires à la direction des ouvertures. Le nombre de franges à l'intérieur de la tache centrale dépend de la distance  $D$  entre les centres par rapport à la taille de l'ouverture. Si  $D$  augmente, l'interfrange diminue, si  $D$  diminue, l'interfrange augmente.

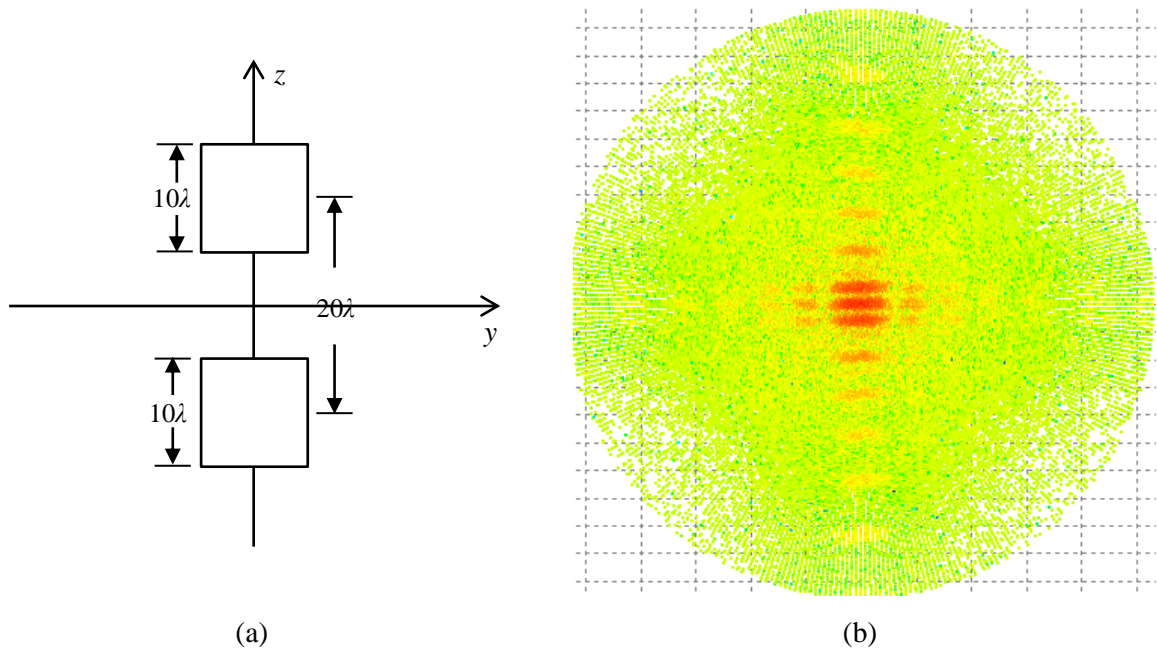
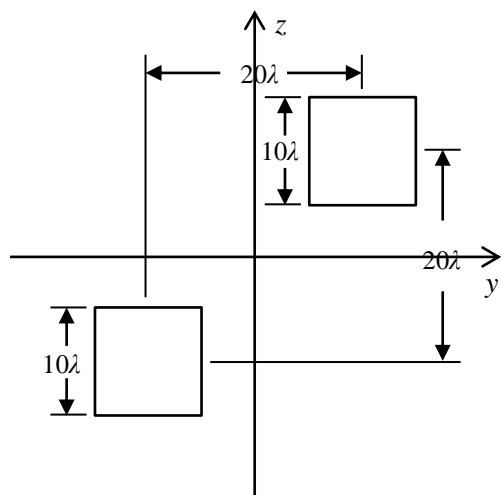
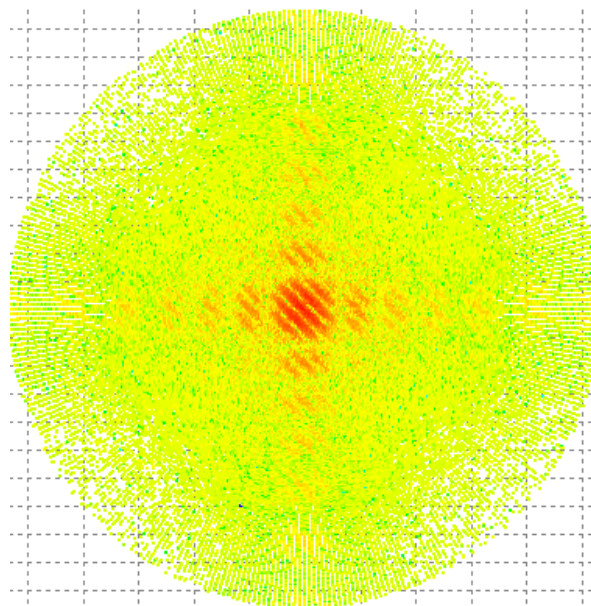


Figure 5.19 Image de diffraction de Fraunhofer simulée avec le modèle d'IH pour deux ouvertures carrées de même largeur  $l_z = l_y = 10\lambda$  ( $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ ) et dont les distances suivant les axes  $y$  et  $z$  entre les deux centres d'ouverture sont de  $d_y = 0$  et  $d_z = 20\lambda$ .

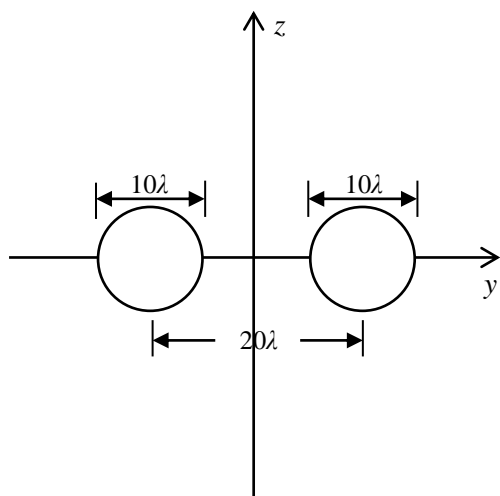


(a)

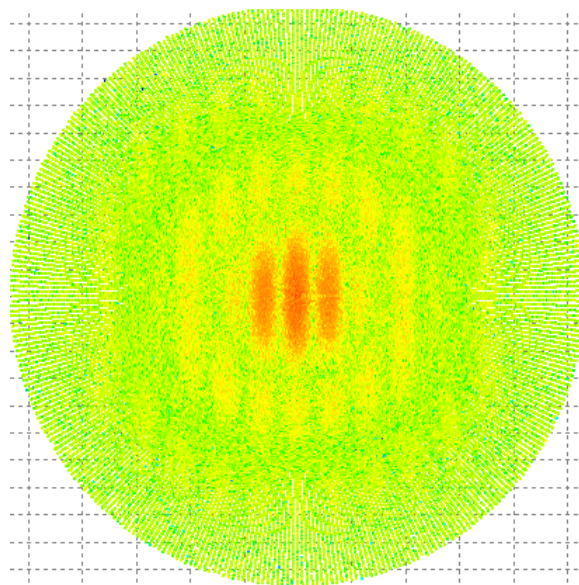


(b)

Figure 5.20 Même cas que pour la figure 5.19 sauf que les distances suivant les axes  $y$  et  $z$  entre les deux centres d'ouverture sont de  $d_y = 20\lambda$  et  $d_z = 20\lambda$ .



(a)



(b)

Figure 5.21 Image de diffraction de Fraunhofer simulée pour deux ouvertures circulaires de rayon  $a = 5\lambda$  ( $\lambda = 0.6328\mu\text{m}$ ) et les distances suivant les axes  $y$  et  $z$  entre les deux centres d'ouverture sont de  $d_y = 20\lambda$  et  $d_z = 0$ .

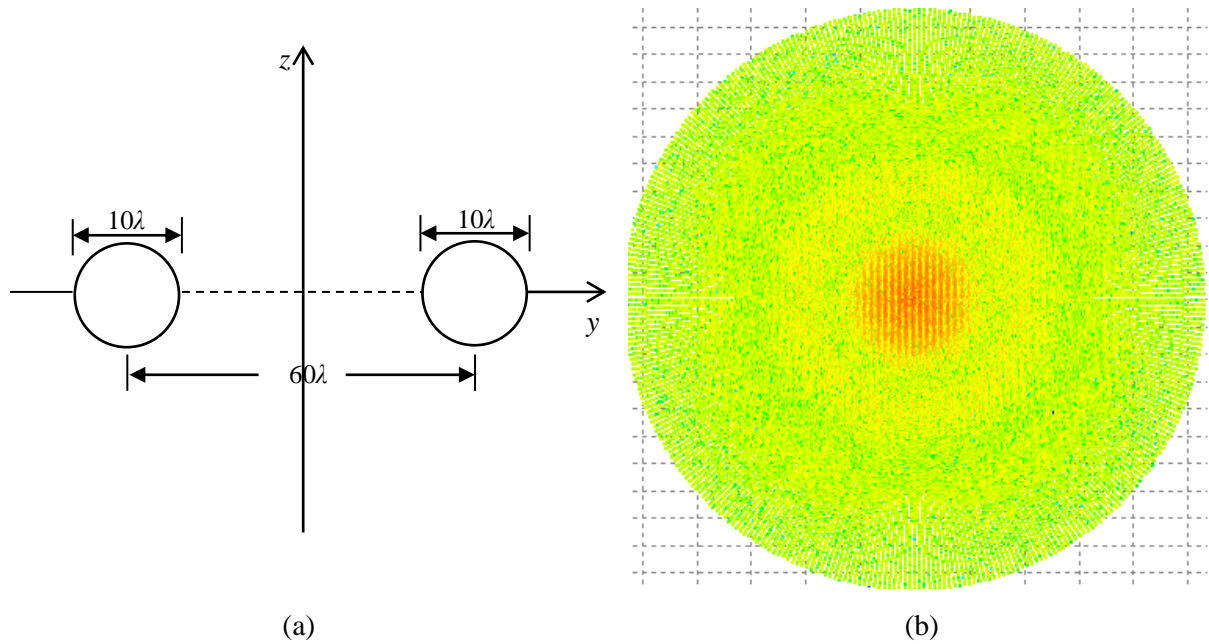


Figure 5.22 Même cas que pour la figure 5.21 sauf que les distances suivant les axes  $y$  et  $z$  entre les deux centres d'ouverture sont de  $d_y = 60\lambda$ .

## 5.8 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons rappelé les théories classiques de diffraction et étudié le modèle d'IH qui permet de prédire la diffraction par une ouverture de forme quelconque en utilisant la technique de Monte Carlo. Sur cette base, notre modèle d'IH est déduit en introduisant la phase pour la diffraction de Fraunhofer par rapport à un point de référence. Le modèle est validé par comparaison des distributions d'intensité suivant l'axe avec des résultats analytiques pour des ouvertures de forme simple comme une fente, une ouverture carrée et une ouverture circulaire. Les figures de diffraction ont été aussi présentées. En comparant avec les modèles de diffraction classique, on peut constater que notre modèle peut prédire correctement la diffraction en champ lointain par les ouvertures typiques. Notre modèle d'IH a été ensuite étendu au cas d'une ouverture elliptique. La distribution d'intensité du champ diffracté a été comparée avec la solution numérique et ces deux distributions sont en bon accord. Le modèle a été aussi étendu correctement au cas des deux ouvertures comme deux fentes, deux ouvertures carrées et deux ouvertures circulaires. Au final, le modèle d'IH s'avère être un outil très flexible qui permet d'étudier la diffraction d'un photon et de prédire le champ diffracté par un système optique complexe et qui est compatible avec l'approche du tracé de rayons. Par utilisation du théorème de Babinet, il peut prédire la diffraction par une particule de forme quelconque. A terme, ce modèle de diffraction sera introduit dans notre modèle MCTRO pour avoir ainsi un modèle décrivant tous les phénomènes inhérents à la diffusion par une particule de forme quelconque.

## Conclusion générale et perspectives

L'étude de l'interaction lumière-particule est essentielle pour la métrologie optique des particules dans les écoulements à phase dispersée. Il existe des théories rigoureuses qui peuvent prédire la diffusion de la lumière par une particule de forme très simple (sphère, cylindre droit,...). Malheureusement, les objets rencontrés dans les écoulements (comme les sprays) sont souvent de forme irrégulière et complexe. Les théories rigoureuses ne sont plus valables et même si de nombreuses méthodes numériques ont été développées pour traiter la diffusion par ce type d'objets. Toutes ces méthodes restent limitées aux petites particules. Le but de ce travail de thèse a été de développer et améliorer des outils basés sur l'optique géométrique et le tracé de rayons, capables de prendre en compte l'interaction entre la lumière et un objet de taille conséquente et très complexe. Nous nous sommes focalisés sur l'étude et le développement des modèles suivants : Optique géométrique étendue (OGE), Tracé de rayons vectoriels complexes (TRVC) et Monte Carlo par tracé de rayons (MCTR).

Une des difficultés majeure a été le problème de la validation. En effet, quand on veut étendre les modèles à des particules de forme relativement complexe (un sphéroïde, dans le cas le plus simple), aucune théorie rigoureuse n'est disponible pour comparer. Nous avons donc choisi de valider les modèles l'un par rapport à l'autre.

On peut désormais faire le bilan des différentes approches développées dans ce travail :

- l'Optique Géométrique Etendue (OGE) prend en compte non seulement la déviation de chaque rayon lumineux, mais aussi tous les types de déphasage (dus au trajet d'un rayon, à la réflexion ou à la réfraction et aux lignes focales), ainsi que les effets de la diffraction et de l'absorption. En prenant en compte tous ces effets, ce modèle peut prédire avec une bonne précision le champ total diffusé. Cependant, l'OGE est limitée au cas d'un faisceau incident se propageant selon l'axe de la particule. En effet, dès que le faisceau incident est incliné, les calculs de la divergence et du déphasage dû aux lignes focales deviennent très problématiques.

- le Tracé de Rayons Vectoriels Complexes (TRVC) permet de prédire précisément la diffusion par une grosse particule de forme arbitraire et de surface lisse. Il peut calculer correctement la divergence/convergence de l'onde et le déphasage dû aux lignes focales en suivant le changement des courbures de l'onde. Mais la version actuelle est limitée à la diffusion en 2D par un grand ellipsoïde dans le plan de symétrie.

- le Monte Carlo par tracé de rayons (MCTR) qui est un outil très flexible permettant de simuler la diffusion d'une onde plane par une grosse particule irrégulière ou par un objet éventuellement composé de différents éléments séparés. Cependant, les effets ondulatoires comme la polarisation, les interférences, la diffraction et aussi l'absorption ne sont pas pris en compte.

- Sur la base du modèle de MCTR, les effets ondulatoires comme la polarisation, les interférences et la divergence/convergence de l'onde, mais aussi l'absorption ont été modélisées. On appelle le modèle amélioré 'Monte Carlo par tracé de rayons d'ondes' (MCTRO).

Le tableau ci-dessous résume les possibilités de ces différentes approches.

	Forme de l'objet	2D ou 3D	Effets ondulatoires	Utilisable sur un spray	Temps de calcul
OGE	sphéroïde	2D	si l'onde incidente est dans l'axe du sphéroïde	non	faible
TRVC	ellipsoïde	2D	oui	non	faible
MCTR	quelconque	3D	non	oui	important
MCTRO	quelconque	3D	oui	oui	important

Tableau. Comparaison des quatre modèles OGE, TRVC, MCTR et MCTRO.

Après leur validation pour le cas d'une sphère en comparant avec la théorie de Lorenz-Mie, les modèles TRVC et MCTRO ont été utilisés pour étudier la diffusion par un sphéroïde (gouttelette ou bulle). Les résultats des deux modèles correspondent de façon remarquable. Il a été montré que le diagramme de diffusion dépend beaucoup du rapport d'aspect du sphéroïde et les positions de l'angle d'arc-en-ciel sont très sensibles à la forme de la particule. Par ailleurs, la diffusion par une bulle est totalement différente de celle d'une gouttelette.

Comme montré, ces deux modèles peuvent prédire précisément le diagramme de diffusion dans presque toutes les directions, sauf autour de l'angle d'arc-en-ciel pour une goutte et de l'angle critique de diffusion pour une bulle. Pour améliorer ce fait, il faudrait désormais inclure les effets de la diffraction, voire des ondes de surface. Des voies exploratoires ont été étudiées concernant la diffraction. En effet, si pour une particule de forme simple, la diffraction de Fraunhofer peut suffire, dans le cas d'un objet séparé en éléments, il serait judicieux d'utiliser un modèle compatible avec le tracé de rayons. Une technique basée sur le principe d'incertitude d'Heisenberg a été étudiée et semble bien fonctionner. Il reste à l'intégrer au code MCTRO.

Le perfectionnement des modèles de tracé de rayons ouvre de larges perspectives pour la métrologie des écoulements diphasiques. En effet, lorsqu'on effectue des mesures optiques sur un jet en phase d'atomisation (souvent de l'imagerie), l'interprétation des signaux (souvent des images) est un réel problème. L'idée est de simuler la métrologie en question sur un jet calculé numériquement en résolvant les équations de la mécanique des fluides. On obtient un signal également simulé, mais que

l'on peut interpréter en termes de grandeurs hydrodynamiques, puisque l'on connaît parfaitement l'objet qui l'a généré. Toute cette procédure dépend de la qualité du modèle d'interaction entre la lumière et un objet de forme quelconque. Ce travail de doctorat a permis de montrer que le code MCTRO permet de répondre à cette contrainte avec une précision raisonnable.



## Bibliographie

- [1]. K. F. Ren. *Diffusion des Faisceaux Feuille Laser par une Particule Sphérique et Application aux Ecoulement Diphasiques*. Thèse à l'Université de Rouen, 1995.
- [2]. G. Gouesbet, B. Maheu, and G. Gréhan, "Light scattering from a sphere arbitrarily located in a Gaussian beam, using a Bromwich formulation", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 5, pp. 1427-1443, 1988.
- [3]. G. Gouesbet and G. Gréhan, "Generalized Lorenz-Mie theories, from past to future", *Atomization and Sprays*, Vol. 10, pp. 277-333, 2000.
- [4]. F. Xu, *Diffusion d'un Faisceau Quelconque par un Sphéroïde et Mesure en Ligne de la Vapeur Humide par l'Extinction Spectrale de la Lumière*. Thèse à l'Université de Rouen, 2007.
- [5]. B. T. Draine and P. J. Flatau, "Discrete-dipole approximation for scattering calculations", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 11, No. 4, pp. 1491-1499, 1994.
- [6]. T. Nousiainen and K. Muinonen. "Surface-roughness effects on single-scattering properties of wavelength-scale particles," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 106, pp. 389-397, 2007.
- [7]. Y. You, G. W. Kattawar, P. Zhai, and P. Yang, "Invisibility cloaks for irregular particles using coordinate transformations", *Opt. Express*, Vol. 16, No. 9, pp. 6134-6145, 2008.
- [8]. P. Yang and K. N. Liou, "Finite-difference time domain method for light scattering by small ice crystals in three-dimensional space", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 13, pp. 2072-2085, 1996.
- [9]. T. Wriedt, "Using the T-Matrix Method for Light Scattering Computations by Non-axisymmetric Particles: Superellipsoids and Realistically Shaped Particles," *Part. Part. Syst. Charact.*, Vol. 19, pp. 256-268, 2002.
- [10]. D. Petrov, Y. Shkuratov, and G. Videen, "Analytic light-scattering solution of two merging spheres using Sh-matrices," *Opt. Commun.*, Vol. 281, pp. 2411-2423, 2008.
- [11]. T. Wriedt, "A review of elastic light scattering theories", *Part. Part. Syst. Charact.*, Vol. 15, pp. 67-74, 1998.
- [12]. F. Xu, K. F. Ren, and X. Cai, "Extended geometrical-optics approximation to on-axis Gaussian beam scattering. I. By a spherical particle," *Appl. Opt.*, Vol. 45, pp. 4990-4999, 2006.
- [13]. R. T. Wang and H.C. van de Hulst, "Rainbows: Mie computations and the Airy approximation", *Appl. Opt.*, Vol. 30, No. 1, pp. 106-117, 1991.



- [14]. J. A. Lock and L. Yang, "Interference between diffraction and transmission in the Mie extinction efficiency", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 8, No.7, pp. 1132-1134, 1991.
- [15]. E. A. Hovenac and J. A. Lock, "Assessing the contributions of surface waves and complex rays to far-field Mie scattering by use of the Debye series", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 9, No. 5, pp. 781-795, 1992.
- [16]. P. L. Marston and D. L. Kingsbury, "Scattering by a bubble in water near the critical angle: interference effects", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 71, Vol. 2, pp. 192-196, 1981.
- [17]. D. L. Kingsbury and P. L. Marston, "Mie scattering near the critical angle of bubbles in water", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 71, No. 3, pp. 358-361, 1981.
- [18]. P. L. Marston, "Critical angle scattering by a bubble: physique-optics approximation and observations", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 69, No. 9, pp. 1205-1211, 1979.
- [19]. J. A. Adam, "The mathematical physics of rainbows and glories", *Phys. Rep.*, Vol. 356, pp. 229-365, 2002.
- [20]. F. Xu, K. F. Ren, X. Cai, and J. Shen, "Extended geometrical-optics approximation to on-axis Gaussian beam scattering. II. By a spheroidal particle with end-on incidence," *Appl. Opt.*, Vol. 45, pp. 5000-5009, 2006.
- [21]. P. Yang and K. N. Liou, "Light scattering by hexagonal ice crystals: comparison of finite-difference time domain and geometric optics models", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 12, No. 12, pp. 162-176, 1995.
- [22]. P. Yang and K. N. Liou, "Geometric-optics-integral-equation method for light scattering by nonspherical ice crystals", *Appl. Opt.*, Vol. 35, No. 33, pp. 6568-6584, 1996.
- [23]. P. Yang and K. N. Liou, "Light scattering by hexagonal ice crystals: solutions by a ray-by-ray integration algorithm", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 14, No. 9, pp. 2278-2289, 1997.
- [24]. K. F. Ren, C. Rozé, and T. Girasole, "Tracé de rayons vectoriels complexes par géométrie différentielle pour la diffusion de la lumière par un objet de forme irrégulière", *CMOI*, Nov. 2010, Toulouse.
- [25]. K. F. Ren, F. Onofri, C. Rozé, and T. Girasole, "Vectorial complex ray model and application to two-dimensional scattering of plane wave by a spheroidal particle", *Opt. Lett.*, Vol. 36, No.3, pp. 370-372, 2011.
- [26]. Y. Takano and K. N. Liou, "Radiative Transfer in Cirrus Clouds. Part III: Light Scattering by Irregular Ice Crystals", *J. Atmos. Sci.*, Vol. 52, No. 7, pp. 818-837, 1995.
- [27]. Y. S. Grynko and Y. G. Shkuratov, "Scattering matrix calculated in geometric optics approximation for semitransparent particles faceted with various shapes", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 78, pp. 319-340, 2003.
- [28]. Y. G. Shkuratov and Y. S. Grynko, "Light scattering by media composed of semitransparent particles of different shapes in ray optics approximation: consequences for spectroscopy, photometry, and polarimetry of planetary regoliths", *Icarus*, Vol. 173, pp. 16-28, 2005.

- [29]. J. I. Peltoniemi, "Spectropolarised ray-tracing simulations in densely packed particulate medium", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 108, pp. 180-196, 2007.
- [30]. L. H. Liu, H. C. Zhang, and H. P. Tan, "Monte Carlo discrete curved ray-tracing method for radiative transfer in an absorbing-emitting semitransparent slab with variable spatial refractive index", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 84, pp. 357-362, 2004.
- [31]. D. Stankevich and Y. Shkuratov, "Monte Carlo ray-tracing simulation of light scattering in particulate media with optically contrast structure", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 87, pp. 289-296, 2004.
- [32]. A. Macke, "Scattering of light by polyhedral ice crystals", *Appl. Opt.*, Vol. 32, No. 15, pp. 2780-2788, 1993.
- [33]. R. Bhandrai and M. Kerker, "Monte Carlo analysis of the internal structure of light scattering particles with slit-scan illumination", *J. Stat. Phys.*, Vol. 52, Nos. 5/6, pp. 1263-1283, 1988.
- [34]. A. Doicu and T. Wriedt, "Equivalent refractive index of a sphere with multiple spherical inclusions", *J. Opt. A: Pure Applied Optics*, Vol. 3, pp. 204-209, 2001.
- [35]. T. Wriedt and R. Schuh, "The inclusion-concentration measurement of suspension droplets based on Monte Carlo ray tracing", *Meas. Sci. Technol.* Vol. 13, pp. 276-279, 2002.
- [36]. M. Mikrenska and R. Koulev, "Simulation of light scattering by large particles with randomly distributed spherical or cubic inclusions", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 110, pp. 1411-1417, 2009.
- [37]. C. Rozé, T. Girasole, L. Méès, G. Gréhan, L. Hespel, and A. Delfour, "Interaction between ultra pulses and a dense scattering medium by Monte Carlo simulation: consideration of particle size effect", *Optics communication*, Vol. 220, pp. 237-245, 2003.
- [38]. C. Calba, C. Rozé, T. Girasole, and L. Méès, "Monte Carlo simulation of the interaction between an ultra-short pulse and a strongly scattering medium: The case of large particles", *Opt. commun.*, Vol. 265, pp. 373-385, 2006.
- [39]. C. Calba, L. Méès, C. Rozé, and T. Girasole, "Ultrashort pulse propagation through a strongly scattering medium: simulation and experiments", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 25, No. 7, pp. 1541-1550, 2008.
- [40]. J. B. Keller, "Geometrical theory of diffraction", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 52, No. 2, pp.116-130, 1962.
- [41]. F. Xu, K. F. Ren, G. Gouesbet, G. Gérard, and X. Cai, "Generalized Lorenz-Mie theory for an arbitrarily oriented, located, and shaped beam scattered by a homogeneous spheroid", *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 24, No. 1, pp. 119-131, 2007.
- [42]. K. F. Ren, *Interaction lumière-particule et Applications au diagnostic optique*, cours du Master EFE, l'Université de Rouen, 2007.
- [43]. G. Gréhan and K. F. Ren, *Diffusion de la lumière par des particules et applications à la métrologie optique*, Cours du master, Université de Rouen, 1998.

- [44]. Van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles*, Dover, New York, 1957.
- [45]. H. Yu, J. Shen, and Y. Wei, “geometrical optics approximation of light scattering by large air bubbles”, *Particulology*, No. 6, pp. 340-346, 2008.
- [46]. F. R. A. Onofri, M. Krzysiek, J. Mroczka, K. F. Ren, S. Radev, and J. P. Bonnet, “Optical characterization of bubbly flows with a near-critical-angle scattering technique”, *Exp. Fluids*, Vol. 47, pp.721-732, 2009.
- [47]. L. Wu, H. Yang, X. Li, B. Yang, and G. Li, “Scattering by large bubbles: comparisons between geometrical-optics theory and Debye series”, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 108, pp. 54-64, 2007.
- [48]. H. Yu, J. Shen, and Y. Wei, “Geometrical optics approximation for light scattering by absorbing spherical particles”, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 110, pp. 1178-1189, 2009.
- [49]. A. Ungut, G. Gréhan, and G.Gouesbet, “Comparisons between geometrical optics and Loren-Mie theory”, *Appl. Opt.*, Vol. 20, No. 17, pp. 2911-2918, 1981.
- [50]. W. J. Glantschnig and S. Chen, “Light scattering from water droplets in the geometrical optics approximation”, *Appl. Opt.*, Vol. 20, No. 14, pp. 2499-2509,1981.
- [51]. E. A. Hovenac, “Calculation of far-field scattering from non-spherical particles using a geometrical optics approximation”, *Appl. Opt.*, Vol. 30, No. 33, pp. 4739-4746, 1991.
- [52]. J.P. Chevaillier, J.Fabre, and P. Hamelin, “Forward scattered light intensities by a sphere located anywhere in a Gaussian beam”, *Appl. Opt.*, Vol. 25, No. 7, pp. 1222-1225, 1986.
- [53]. J.P. Chevaillier, J.Fabre, G.Gréhan, and G. Gouesbet, “Comparison of diffraction theory and generalized Lorenz-Mie theory for a sphere located on the axis of a laser beam”, *Appl. Opt.*, Vol. 29, No. 9, pp. 1293-1298, 1990.
- [54]. J. A. Lock, “Ray scattering by an arbitrarily oriented spheroid. I. Diffraction and specular reflection”, *Appl. Opt.*, Vol. 35, No. 3, pp. 500-514, 1996.
- [55]. J. A. Lock, “Ray scattering by an arbitrarily oriented spheroid. II. Transmission and cross-polarization effects”, *Appl. Opt.*, Vol. 35, No. 3, pp. 515-531, 1996.
- [56]. D. Marcuse, “Light Scattering from elliptical fibers”, *Appl. Opt.*, Vol. 13, No. 8, pp. 1903-1905, 1974.
- [57]. G. A. Deschamps, “Ray techniques in electromagnetic”, *Proc. IEEE*, Vol. 60, No. 9, pp. 1022-1035, 1972.
- [58]. S. W. Lee, M. S. Sheshadri, V. Jamnejad, and R. Mittra, “Refraction at a curved dielectric interface: geometrical optics solution”, *IEEE T. Microw. Theory*, Vol. 30, No. 1, pp. 12-19, 1982.
- [59]. P. L. Marston, D. S. Langley, and D. L. Kingsbury, “Light scattering by bubbles in liquids: Mie theory, physical-optics approximation, and experiments”, *Appl. Sci. Res.*, Vol. 38, pp. 373-383, 1982.

- [60]. T. Ménard, S. Idlahcen, J. B. Blaisot, C. Rozé, A. Berlemont, T. Girasole, L. Méès, “Numerical simulation of optical diagnostics and comparisons to experiments”, 7<sup>th</sup> International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2010, Tampa, FL, May 30-June 4, 2010.
- [61]. S. Tanguy, T. Ménard, and A. Berlemont, “A Level Set method for vaporizing two-phase flows”, *J. Comp. Phys*, Vol. 221, pp. 837-853, 2007.
- [62]. F. Lekien and J. Marsden, “Tricubic interpolation in three dimensions”, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, Vol. 63, pp. 455-471, 2005.
- [63]. Y. Okada, A. M. Nakamura, and T. Mukai, “Light scattering by particulate media of irregularly shaped particles: laboratory measurements and numerical simulations”, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, Vol. 100, pp. 295-304, 2006.
- [64]. J. T. O. Kirk, ‘Monte Carlo modelling of the performance of a reflective tube absorption meter’, *Appl. Opt.*, Vol. 31, No. 30, pp. 6463-6468, 1992.
- [65]. S. Serikov and S. Kawamoto, “Numerical experiments in Monte Carlo modeling of polarization, diffraction, and interference phenomena”, *Proc. SPIE*, Vol. 4436, pp. 80-88, 2001.
- [66]. G. Kindlmann, R. Whitaker, T. Tasdizen, and T. Möller. “Curvature-Based Transfer Functions for Direct Volume Rendering: Methods and Applications”. *Proceedings of the 14th IEEE Visualization 2003 (VIS'03)*, pp. 513-520, 2003.
- [67]. M. Xu, “Electric field Monte Carlo simulation of polarized light propagation in turbid media”, *Opt. Express*, Vol. 12, No. 26, pp. 6530-6539, 2004.
- [68]. B. Kaplan, G. Ledanois, and B. Drévillon, “Mueller matrix of dense polystyrene latex sphere suspensions: measurements and Monte Carlo simulation”, *Appl. Opt.*, Vol. 40, No. 16, pp. 2769-2777, 2001.
- [69]. S. Bartel and A. H. Hielscher, “Monte Carlo simulations of the diffuse backscattering Mueller matrix for highly scattering media”, *Appl. Opt.*, Vol. 39, No. 10, pp. 1580-1588, 2000.
- [70]. E. R. Freniere, G. G. Gregory, and R. A. Hassler, “Polarization models for Monte Carlo ray tracing”, *Optical Design and Analysis Software, Proceeding of SPIE*, Vol. 3780, 1999.
- [71]. J. C. Ramella-Roman, S. A. Prahl, and S. L. Jacques, “Three Monte Carlo programs of polarized light transport into scattering media: part I”, *Opt. Express*, Vol. 13, No. 12, pp. 4420-4438, 2005.
- [72]. C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of light by Small Particles*, 1983.
- [73]. W. H. Southwell, “Validity of the Fresnel approximation in the near field”, *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 71, No. 1, pp. 7-14, 1981.
- [74]. Y. Kim, H. Grebel, and D. L. Jaggard, “Diffraction by fractally serrated apertures”, *J. Opt. Soc. Am. A.*, Vol. 8, No. 1, 1991.
- [75]. G. Urcid and A. Padilla, “Far-field diffraction patterns of circular sectors and related apertures”, *Appl. Opt.*, Vol. 44, No. 36, pp. 7677-7696, 2005.

- [76]. W. Sillitto, "Fraunhofer diffraction at straight-edged apertures", J. Opt. Soc. Am. A., Vol. 69, No. 5, pp. 765-770, 1979.
- [77]. P. Wendling, R. Wendling, and H. K. Weickmann, "Scattering of solar radiation by hexagonal ice crystals", Appl. Opt., Vol. 18, No. 15, pp. 2663-2671, 1979.
- [78]. A. Borovoi, E. Naats, U. Ooppel, and L. Grishin, "Shape characterization of a large nonspherical particle by use of its Fraunhofer diffraction pattern", Appl. Opt., Vol. 39, No. 12, pp. 1989-1997, 2000.
- [79]. R. P. Heinisch and T. S. Chou, "Numerical experiments in modelling diffraction phenomena", Appl. Opt., Vol. 10, No. 10, pp. 2248-2251, 1971.
- [80]. E. R. Freniere, G. Groot Gregory, and Richard A. Hassler, 'Edge diffraction in Monte Carlo ray tracing', Proc. SPIE, Vol. 3780, 1999.
- [81]. B. Likeness, "Stray light simulation with advanced Monte Carlo techniques", Proc. SPIE, Vol. 107, pp. 80-88, 1977.
- [82]. K. L. Coffey, K. J. Priestly, and J. R. Mahan, "Diffraction models of radiation entering an aperture for use in a Monte Carlo ray-trace environment", Proc. SPIE, Vol. 3429, pp. 213-219, 1998.
- [83]. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Cambridge Univ. Pr, 2003.
- [84]. Y. P. Kathuria, "Fresnel and far field diffraction due to an elliptical aperture", J. Opt. Soc. Am. A., Vol. 2, No. 6, pp. 852-857, 1985.



## Résumé

L'étude de l'interaction lumière-particule (diffusion de la lumière) est essentielle pour le développement et l'amélioration de la métrologie optique. Les théories rigoureuses ne sont pas adaptées aux particules de forme irrégulière. Des méthodes numériques ont alors été développées mais elles restent limitées aux petites particules. Restent les méthodes approchées du type optique géométrique.

Cette thèse a pour l'objet de prédire précisément l'interaction entre la lumière et un objet de grande taille et de forme quelconque. Sur la base de l'optique géométrique, nous avons développé deux méthodes approchées : le modèle de tracé de rayons vectoriels complexes (TRVC) et le modèle de Monte Carlo par tracé de rayons d'onde (MCTRO). Ils prennent en compte les propriétés ondulatoires telles que la polarisation, la phase, la divergence ou la convergence de l'onde pour prédire correctement les interférences. Les deux modèles ont été validés par comparaison avec la théorie de Lorenz-Mie pour une particule sphérique. On les a ensuite utilisés pour prédire la diffusion par une particule non sphérique, un sphéroïde. Les diagrammes de diffusion simulés par les deux modèles correspondent de façon remarquable entre eux. Le modèle peut être adapté à toute forme de particules.

Afin de tenir compte de la diffraction d'un rayon lumineux ou d'un photon, le modèle de l'incertitude de Heisenberg (IH) a été étudié et amélioré. Notre modèle de diffraction peut prédire avec précision la diffraction par une ouverture de forme complexe et deux ouvertures.

Nous avons donc développé un modèle d'interaction entre la lumière et un objet quelconque suffisamment précis pour pouvoir l'appliquer à des images de spray.

## Mots clés:

Interaction lumière-particule, interférences, optique géométrique, tracé de rayons vectoriels complexes, Monte Carlo par tracé de rayon d'onde, diffraction, incertitude de Heisenberg

## Summary

The particle-light interaction (light scattering) is the basic issue for the development and improvement of optical metrology. The rigorous theories are not suitable for irregular particles. Then, numerical methods have been developed, but they are still limited to small particles. It remains approximate methods of type geometrical optics.

The aim of this thesis is to predict accurately the interaction between light and large objects of any shape. On the basis of geometrical optics, we have developed two approximate methods: vectorial complex ray model (VCRM) and Monte Carlo ray tracing of wave (MCRTW). They take into account the wave properties such as polarization, phase and divergence or convergence of the wave to predict correctly the interferences. The two models have been validated by comparison with the Lorenz-Mie theory for a spherical particle. We have also used them to predict the scattering patterns of a non-spherical particle, a spheroid. The scattering diagrams simulated by the two models correspond remarkably between them. The model can be adapted to particle of any shape.

To consider the diffraction of a light ray or a photon, the Heisenberg uncertainty (HU) model has been studied and improved. Our diffraction model can accurately predict the diffraction by an aperture of complex shape and two apertures.

We have developed a model of interaction between light and any object sufficiently precise to be applied to images of spray.

## Key words:

Light-particle interaction, interferences, geometrical optics, vectorial complex ray model, Monte Carlo ray tracing of wave model, diffraction, Heisenberg uncertainty model