N^o d'ordre : 440 Année 2005

THÈSE

présentée en vue de
l'obtention du titre de

DOCTEUR
de
L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE
DE L'AÉRONAUTIQUE ET DE L'ESPACE

SPÉCIALITÉ : ÉLECTROMAGNÉTISME ET OPTIQUE

par

Hervé CHANAL

Étude de la diffusion optique par des matériaux hétérogènes rugueux : Diffusions surfacique, volumique et couplage surface/volume

Soutenue le 9 décembre 2005 devant la Commission d'Examen :

MM.	**P.F.**	**COMBES**	**Président du jury**
	J.J.	**GREFFET**	**Rapporteur**
	A.	**REINEIX**	**Rapporteur**
	P.	**BORDERIES**	
	M.	**SAILLARD**	**Directeur de thèse**
	J.-P.	**SEGAUD**	
MM.	**O.**	**CALVO-PEREZ**	**Invité**
	N.	**FLOURY**	**Invité**

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Marc Saillard pour avoir accepté d'être mon directeur de thèse. Durant ces trois années, il a su me faire profiter de son expérience, de ses compétences scientifiques et de ses conseils. L'aboutissement de cette thèse lui doit beaucoup.

Je remercie chacun des membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. En particulier, je remercie Jean Jacques Greffet et Alain Reineix pour avoir accepté d'être rapporteurs de cette thèse et pour leur travail de relecture.

Je remercie Xavier Briottet et Laurent Hespel pour leur accueil au sein de l'unité QDO puis de l'unité POM du DOTA Toulouse. Je remercie également mes encadrants ONERA Jean Pierre Segaud et Pierre Borderies. Je remercie Elodie Bachelier pour l'aide qu'elle m'a apportée pour comprendre les outils et méthodes numériques utilisés dans cette thèse.

Je remercie Michelle Mora, Annie Carles-Baihlé, Jacques Graffeuil et Etienne Sicard pour leur aide dans les dernières étapes administratives de la thèse.

Durant ces trois années de thèse, j'ai pu apprécier la gentillesse et la gaieté de mes collègues et amis au sein du DOTA Toulouse. Je remercie tout d'abord Bernard et Sandrine pour avoir su garder la bonne humeur et une joyeuse complicité dans le bureau que nous avons partagé. Je remercie Joël pour avoir appris la pâtisserie pour mon anniversaire ainsi que pour tous ses conseils. J'ai côtoyé avec plaisir quotidiennement les doctorants du DOTA : Nicolas, Guillaume, Keyvan, Xavier L., Dimitri, Sophie L., Pierre M., Marie, Julien, Sebastian, Isabelle, Mickael, Jean-Marc et Emmanuel. Je remercie les ingénieurs du DOTA pour leur accueil et leur bonne humeur, et notamment Philippe R. l'indien, Philippe D. l'apprenti pingouin et Christian M. pour sa gentillesse. Je remercie finalement Geneviève Corrège et Sophie Fortin pour leur aide et leur accueil au DOTA.

Je remercie vivement mes amis de l'ISIMA qui m'ont suivi durant ce voyage à Toulouse : Simon, Gonzo et Jeremy pour ces trois ans et leur soutien tout au long de cette thèse.

Enfin, je remercie tout particulièrement mes amis du Studio 5 du nouveau théâtre Jules Julien pour leurs grandes qualités humaines et leur générosité durant ces années passées ensemble. Le mot du vent dans les savanes du silence restera inoubliable et gardera toujours sa force.

Table des matières

Introduction **9**

I Présentation de la méthode **17**

1 Chaîne de modélisation **19**

1.1 Introduction 19
1.2 BRDF d'un matériau 19
1.3 Modèle 21

2 Méthode de résolution électromagnétique **25**

2.1 Introduction 25
2.2 Implémentation en espace libre 26
2.2.1 Équations de Maxwell dans les milieux 26
2.2.2 Discrétisation des équations de Maxwell 28
2.2.3 Représentation des surfaces courbes 30
2.2.4 Équivalence conductivité/partie imaginaire de la permittivité 31
2.2.5 Condition de stabilité du schéma de Yee 32
2.2.6 Conditions absorbantes 32
2.2.7 Dispersion numérique 33
2.2.8 Onde incidente 33
2.2.8.1 Expression temporelle 33
2.2.8.2 Découpage champ total/champ diffracté 34
2.2.8.3 Introduction du champ incident 35
2.2.8.4 Initialisation numérique 36
2.2.9 Calcul du champ lointain 38
2.2.10 Obtention des champs dans le domaine fréquentiel 42
2.3 Étude et validation du calcul électromagnétique 42
2.3.1 Particule de rayon $r = 2\lambda_0$ et d'indice $n = 1.6$ 43
2.3.2 Particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n = 1.02$, $n = 1.6$ et $n = 4$ 47
2.3.3 Deux particules de rayon $r = \lambda_0/2$ et d'indice $n = 2.25$ en polarisation TM 47

2.3.4 Conclusion . . . 49
2.4 Milieu semi-infini . . . 53
2.4.1 Onde incidente . . . 53
2.4.1.1 Onde plane . . . 53
2.4.1.2 Faisceau gaussien . . . 53
2.5 Calcul de la BRDF . . . 61
2.5.1 Expression de la BRDF . . . 61
2.5.2 Intensité cohérente et incohérente . . . 62
2.5.3 Exemples de BRDF . . . 63
2.5.4 Conclusion . . . 63

3 Génération de milieux aléatoires 65
3.1 Génération de la surface aléatoire . . . 65
3.1.1 Présentation . . . 65
3.1.2 Description des surfaces . . . 65
3.1.3 Génération . . . 66
3.1.4 Étude de surfaces aléatoires . . . 67
3.1.4.1 Caractéristiques statistiques des surfaces . . . 67
3.1.4.2 Effet de la discrétisation . . . 69
3.1.5 Conclusion . . . 71
3.2 Génération de milieux hétérogènes . . . 72
3.2.1 Présentation . . . 72
3.2.2 L'algorithme de Metropolis [89] . . . 73
3.2.2.1 Initialisation . . . 73
3.2.2.2 Déplacement des particules . . . 74
3.2.2.3 Fin de l'algorithme . . . 75
3.2.2.4 Exemples de milieux générés . . . 75
3.2.3 Fonction de corrélation de paires . . . 77
3.2.3.1 Calcul de la fonction de corrélation de paires . . . 77
3.2.3.2 Exemples de fonctions de corrélation de paires . . . 80
3.3 Génération d'une surface élastique . . . 82
3.3.1 Présentation . . . 82
3.3.2 Algorithme de génération . . . 82
3.3.3 Exemple de surfaces générées . . . 84
3.3.4 Caractéristique des surfaces . . . 85
3.3.4.1 Changement d'échelle . . . 85
3.3.4.2 Distribution des hauteurs . . . 86
3.3.4.3 Fonction d'auto-corrélation . . . 86
3.4 Conclusion . . . 90

II Étude de la diffusion optique par des matériaux hétérogènes rugueux 91

4 Diffusion par une surface rugueuse 93
4.1 Introduction . . . 93
4.2 Géométrie du problème . . . 94
4.3 Introduction à la diffusion par une surface rugueuse . . . 95
4.3.1 Généralités . . . 95
4.3.2 Algorithme de Monte Carlo . . . 95
4.4 Résultats et comparaisons . . . 101
4.4.1 Comparaisons entre la Méthode des Moments et la FDTD . . . 101
4.4.1.1 Résultats . . . 101
4.4.1.2 Résultats de la confrontation . . . 118
4.4.2 Résultats . . . 119
4.4.2.1 Influence de ks/kL . . . 119
4.4.2.2 Influence de l'indice . . . 120
4.5 Conclusion sur la diffusion surfacique . . . 123

5 Étude de l'homogénéisation et de la diffusion volumique 127
5.1 Présentation du problème . . . 127
5.2 Méthodes approchées de détermination de l'indice effectif . . . 129
5.2.1 Lois de mélange . . . 129
5.2.2 Modèle de Foldy-Twersky et Keller . . . 130
5.2.3 Conclusion . . . 131
5.3 Méthode de détermination d'un indice effectif basé sur la FDTD . . . 132
5.3.1 Introduction . . . 132
5.3.2 Détermination du coefficient d'extinction . . . 133
5.3.3 Détermination de la partie réelle de l'indice effectif . . . 135
5.3.4 Limites de la méthode . . . 136
5.4 Comparaisons . . . 139
5.4.1 Introduction . . . 139
5.4.2 Milieux sans pertes . . . 140
5.4.2.1 Influence de la fonction de corrélation de paires (PCF) sur l'approximation de Keller . . . 140
5.4.2.2 Influence des pertes dans les particules . . . 141
5.4.2.3 Influence de la taille des particules . . . 143
5.4.3 Milieux à pertes . . . 143
5.4.3.1 Influence des pertes dans le milieu . . . 143
5.4.3.2 Influence de l'indice des particules . . . 150
5.4.3.3 Influence de la taille des particules . . . 153

5.4.3.4 Utilisation du modèle de Keller pour l'étude de l'influence de la taille des particules . . . 156
5.4.3.5 Conclusion . . . 156
5.4.4 Extension aux polymatériaux . . . 158
5.5 Diffusion par un ensemble bidisperse de particules . . . 160
5.5.1 Présentation du problème . . . 160
5.5.2 Paramètres du calcul . . . 160
5.5.3 Réduction des tavelures . . . 161
5.5.4 Petites particules d'indice optique $n_{PP} = 2.25 + i0.2$ . . . 162
5.5.5 Petites particules d'indice optique $n_{PP} = 2.25$ . . . 163
5.5.6 Validité de l'approche . . . 168
5.6 Conclusion . . . 169

III Étude du couplage surface/volume 171

6 Couplage surface/volume 173
6.1 Présentation du problème . . . 173
6.2 Comparaisons de résultat FDTD/MoM Hybride . . . 174
6.3 Influence de la rugosité de surface . . . 175
6.4 Influence de la fraction volumique et de la taille des particules . . . 180
6.4.1 Milieu hôte à pertes . . . 180
6.4.2 Milieu hôte à faibles pertes . . . 182
6.5 Limites de l'hypothèse de découplage . . . 190
6.6 Surfaces corrélées à la position des particules . . . 190
6.6.1 Milieu hôte à pertes . . . 191
6.6.2 Milieu hôte à faibles pertes . . . 195
6.7 Synthèse . . . 197
6.8 Conclusion . . . 201

Conclusion 203

Annexes 207

A Diffusion par un cylindre 209
A.1 Géométrie du problème . . . 209
A.2 Résolution analytique . . . 210
A.2.1 Matrice de diffusion . . . 210
A.2.1.1 Solution générale . . . 210

A.2.1.2 Approximation des petits cylindres 212
A.2.2 Extinction, diffusion et absorption 212

B Maxwell-Garnett et Bruggeman **215**
B.1 Théorie 215
B.2 Résultats 219

C Modèle de Keller et de Foldy-Twersky **221**
C.1 Introduction 221
C.2 Théorie 221
C.3 Conclusion 226

D Diffusion par un milieu hétérogène **229**
D.1 Introduction 229
D.2 Résultats 229

Introduction

La modélisation de la diffusion par des matériaux hétérogènes rugueux est un sujet complexe tant au niveau théorique que numérique. Elle comporte de nombreux domaines d'application comme la télédétection [2], les applications biomédicales [135], les cosmétiques [46] ou encore la caractérisation de matériaux. La diversité des thèmes abordés reflète l'étendue des paramètres à prendre en compte pour la modélisation ainsi que les degrés de liberté possibles dans leur choix. Dans le cadre de cette thèse nous étudierons un milieu hétérogène rugueux dans le domaine résonant dont les propriétés sont caractéristiques du domaine optique ou infrarouge. Nous chercherons à calculer numériquement la Fonction de Distribution de la Réflectance Bidirectionnelle (FDRB ou BRDF en anglais).

Parmi l'ensemble des applications possibles, prenons l'exemple des peintures. Elles se composent d'un mélange d'un liant et de pigments. L'interface avec le milieu extérieur est rugueuse. La diffusion par ces matériaux a principalement deux contributions :

- La diffusion volumique due à la présence des pigments, celle ci est fortement dépendante de leur taille, de leur forme, de leurs propriétés optiques et de leur distribution spatiale ;
- La diffusion surfacique due aux rugosités qui dépend de leurs formes, et de leurs propriétés optiques.

La prise en compte de toutes les interactions entre les différents éléments constituant le milieu hétérogène rugueux est coûteuse en ressources informatiques. Ainsi de nombreuses méthodes proposent de traiter un problème plus simple sous certaines conditions définissant leur domaine de validité. On parlera alors de méthodes approchées (par opposition aux méthodes numériques).

Les diffusions surfacique et volumique ont souvent été étudiées séparément. De nombreuses méthodes ont été développées pour traiter séparément chacune des deux facettes de ce problème. Dans la suite de cette introduction, nous allons citer les principales approches qui ont été utilisées.

Diffusion par une surface rugueuse La diffusion par une surface rugueuse a été largement étudiée et de nombreuses approches ont été développées [130]. Suivant les approximations choisies, on peut classer ces méthodes en deux grandes catégories : les méthodes asymptotiques et les méthodes rigoureuses.

Les méthodes asymptotiques sont basées sur un développement asymptotique des équations de Maxwell suivant un paramètre donné, par exemple le nombre d'onde. Cette approximation induit un domaine de validité pour lequel la précision des résultats est suffisante. On trouve une étude de ces méthodes, de leurs implications et de leur domaine de validité dans les articles [49, 35]. Elles sont relativement nombreuses, plusieurs développement asymptotiques étant possibles. Nous allons en citer quelques unes.

La méthode des faibles perturbations (Small Perturbation Method - SPM) permet de traiter très rapidement des surfaces très peu rugueuses [117]. Cette méthode est basée sur le théorème d'extinction et donne une expression analytique et explicite du champ diffracté. Elle est extrêmement rapide mais son domaine de validité est très réduit.

La méthode la plus couramment utilisée est l'approximation de Kirchhoff (KA) [125, 72, 23]. Les champs sont remplacés par leur valeur sur un plan tangent à la surface. Cette approche est valable pour des rayons de courbure grands devant la longueur d'onde. Une extension très largement utilisée est l'IEM.

L'approximation de Rayleigh suppose que le champ peut se décomposer en une somme d'ondes planes progressives rayonnées et reçues dans tout l'espace (même au niveau de la surface rugueuse)[65, 81]. Cette approximation n'est valable que pour de faibles pentes.

L'approximation des faibles pentes (Small Slope Approximation - SSA) est basée sur un développement vis à vis de la pente de la surface [128]. C'est une approche qui combine la méthode des faibles perturbations et l'approximation de Kirchhoff. Son domaine de validité est limité par la pente de la surface. Elle est particulièrement utile lorsque la surface présente deux échelles de rugosité comme la surface de la mer.

L'optique géométrique (OG) [98, 11, 28] suppose que tous les paramètres caractéristiques de la surface sont très grands devant la longueur d'onde. Les ondes sont remplacées par des rayons qui sont suivis de la source à la sortie du domaine de calcul.

Dans la Mean Field Theory (MFT) [114, 113, 15], la surface est considérée comme une hétérogénéité en volume. La valeur moyenne de la permittivité est uniquement dépendante de la profondeur. Le domaine de validité de cette approche est plus limité par l'amplitude des variations de la permittivité que par la géométrie du problème. Cette méthode, qui traite la surface de manière volumique, permet de traiter la surface et le volume de manière identique.

L'approche de Brown [10, 34] suppose que la surface rugueuse peut être remplacée par un ensemble de plans avec des élévations aléatoires qui seraient vues de la même façon par le champ moyen. Cette approximation donne des bons résultats lorsque la surface est faiblement rugueuse.

La combinaison de toutes ces méthodes rapides permet de traiter un grand nombre de cas de diffusion par une surface rugueuse. Néanmoins lorsque la taille de ses rugosités est dans le domaine résonant ou lorsque les pentes sont trop fortes, ces approches ne sont plus applicables. De plus, dans la plupart des cas, leur domaine de validité exact n'est pas

connu. Ces limitations conduisent à l'utilisation de méthodes rigoureuses pour la résolution numérique des équations de Maxwell. Elles permettent de déterminer la diffusion des surfaces quelconques au prix d'un temps de calcul largement supérieur, notamment dû à l'utilisation d'un algorithme de Monte Carlo.

Les méthodes numériques les plus utilisées pour le calcul de la diffusion par une surface rugueuse sont les méthodes intégrales [108, 45, 86, 112]. Si la surface est un conducteur parfait le problème se résout sous la forme d'une équation intégrale de surface dont les courant de surfaces sont les inconnues. Lorsque l'interface est diélectrique, l'étude se réduit à deux équations intégrales couplées. Celles-ci se résolvent le plus souvent par la méthode des moments (MoM). Il s'agit d'une procédure de discrétisation des équations intégrales par le développement des courants inconnus sur des fonctions de base ayant pour support la surface. Les champs rayonnés sont projetés sur des fonctions tests dans l'écriture des relations de continuité, l'ensemble formant un système linéaire de dimension finie. La précision du résultat dépend du pas de discrétisation de la surface. Le coût numérique de cette méthode varie en $O(N^3)$ pour le schéma numérique le plus simple où N est le nombre d'inconnues. Son occupation mémoire varie en $O(N^2)$. Par conséquent, cette méthode est rapidement limitée par le nombre d'inconnues du problème.

Cette contrainte a été largement dépassée par les nombreux développements qui ont eu lieu ces dernières années. En effet, on peut utiliser une approche itérative pour la résolution du système linéaire. Cette solution diminue le coût numérique de la MoM en $O(pN^2)$ ou p est le nombre d'itérations [17]. L'apparition de la Fast Multipole Method (FMM - Méthode des multipoles rapides) combinée à un algorithme multiniveau (MLFMM) a permis de diminuer de manière significative la complexité et la place mémoire qui croissent désormais en $O(NlogN)$ [77]. L'adjonction d'un algorithme d'optimisation (SDFMM) permet d'atteindre une complexité en $O(N)$[60]. Toutes ces améliorations ont contribué à faire de la MoM une des méthodes les plus performantes pour l'étude de la diffusion par des surfaces rugueuses.

L'utilisation de méthodes numériques volumiques est moins courante pour le calcul de la diffusion par une surface rugueuse puisqu'elle requiert un maillage volumique de tout l'espace de calcul. Le nombre total d'inconnues est donc plus grand que pour une méthode intégrale de frontière. Néanmoins, comme nous le verrons, elles peuvent traiter plus facilement un milieu inhomogène.

Les différences finies dans le domaine temporel (Finite Difference Time Domain - FDTD) sont basées sur l'approximation des dérivées dans les équations de Maxwell en temporel par des différences finies centrées d'ordre 2 [30, 51, 50, 132, 63]. Malgré sa relative simplicité, son utilisation pour traiter les surfaces n'est pas triviale. Néanmoins, comme le calcul s'effectue dans le domaine temporel, cette méthode permet d'avoir une information sur une large bande de fréquences quand plusieurs calculs sont nécessaires avec une méthode spectrale. La complexité et la place mémoire occupée par cette méthode sont

en $O(N)$.

Dans l'algorithme de la matrice T [108, 112, 45], l'espace de calcul est discrétisé perpendiculairement à la surface. A partir d'une décomposition spectrale des champs, on en déduit un système d'équations différentielles que l'on peut résoudre avec un algorithme aux différences finies. Cependant, cette méthode n'est ni très stable ni très rapide.

La FEM est basée sur des éléments finis [76, 64]. Elle permet de traiter des milieux avec une géométrie complexe sur un maillage en général tétraédrique.

De nombreuses autres méthodes rigoureuses existent dans la littérature, comme par exemple la méthode C [7, 5, 6]. Leur utilisation reste marginale pour l'instant.

Les méthodes rigoureuses sont désormais une alternative possible pour l'étude de la diffusion par une surface rugueuse. Leur utilisation permet de prendre en compte tous les phénomènes présents comme par exemple les diffusions multiples sur la surface. Leur domaine d'application (taille et géométrie des échantillons traitables) ne cesse de croître avec la puissance des ordinateurs.

Diffusion et propagation dans un matériau hétérogène Ce sujet est très vaste et va de la détermination de paramètres équivalents dans les équations de Maxwell standard à la création d'un nouvel ensemble d'équations stochastiques décrivant la propagation des champs électromagnétiques dans le milieu hétérogène [43]. La première approche n'est souvent pas possible mais reste largement la plus utilisée. Dans ce cadre, on cherche à obtenir des paramètres équivalents (ou effectifs) au milieu hétérogène.

Les deux approches les plus connues sont issues de l'électrostatique avec les théories de Maxwell Garnett (MG) [42] et de Bruggeman [12]. Ces théories ne font intervenir ni la taille des particules ni leur forme. En fait le choix de la loi de mélange utilisée en dépendra et de nombreuses études comparent les approches d'homogénéisation disponibles [111, 73, 36, 80, 126] en fonction de la géométrie étudiée. Les différentes approches sont comparées à des résultats expérimentaux [22, 105, 94]. D'autres lois existent en fonction des applications, par exemple on peut utiliser pour des ellipsoïdes les lois décrites dans [44, 88], ou à proximité de la percolation [115].

Lorsque la taille des hétérogénéités augmente par rapport à la longueur d'onde, on ne peut plus utiliser ces lois de mélange du fait de l'augmentation de la diffusion. La notion d'indice effectif devient fortement dépendante du phénomène que l'on cherche à synthétiser. Dans la plupart des cas, il s'agira de représenter l'évolution du champ cohérent (la partie non diffusée de l'onde incidente) dans le milieu hétérogène. Les théories précédentes ont été étendues pour prendre en compte la taille des particules [107] et représenter cette évolution. Cette approche permet de traiter des diffuseurs isotropes peu nombreux dans un milieu hôte homogène. D'autres travaux portent sur la création de nouvelles lois de mélanges [37, 41].

On cherchera plutôt à obtenir la constante de propagation effective à partir de laquelle

on pourra remonter à l'indice effectif. Il s'agit le plus souvent d'une approche perturbative : la constante de propagation du milieu hôte est modifiée par la prise en compte de l'hétérogénéité. Plusieurs théories ont été développées suivant la fraction volumique occupée par les diffuseurs. Lorsque celle ci est faible, on pourra utiliser le modèle de Foldy-Lax (ou Foldy-Twersky suivant l'auteur) [39]. La prise en compte de la diffusion double pourra se faire en utilisant le modèle de Keller [69] ou l'approximation quasi-cristalline (Quasi-Christaline Approximation - QCA) [29]. Ces théories permettent de calculer la constante de propagation effective dans de nombreux matériaux hétérogènes, mais leur domaine de validité est peu connu. Celui-ci peut être déterminé en comparant les résultats de ces modèles avec des expériences [59, 54]. La seconde solution consiste à calculer la diffusion par un ensemble de particules par une méthode électromagnétique pour remonter à l'indice effectif. Il s'agit de retrouver le comportement d'un matériau homogène à partir de la réponse d'un matériau hétérogène. On retrouve les méthodes présentées précédemment. La MoM est utilisée dans [109, 33, 4] pour des géométries 2D et en 3D pour des distributions monodisperses ou polydisperses de particules. Les matrices T sont utilisées dans [131] et la FDTD en 2D dans [68] pour de très petites particules.

L'utilisation de cet indice effectif permet de reproduire le comportement en propagation du champ cohérent mais il ne suffit pas à déterminer le diagramme de rayonnement complet d'un milieu hétérogène. Ces informations sont utiles pour l'équation du transfert radiatif (ETR) [55, 33, 106, 136]. Cette équation permet de calculer la diffusion par un milieu hétérogène. Il s'agit d'une approche phénoménologique du transport de la lumière dans un milieu aléatoire. Elle est relativement rapide en fonction des ordres de diffusion multiple pris en compte. Néanmoins, elle ne peut prédire des phénomènes cohérents comme le pic de rétrodifusion exalté. De plus, les limites de son domaine de validité ne sont pas toujours connues.

De nombreuses autres méthodes sont utilisées comme la théorie du champ moyen (MFT) lorsque la diffusion multiple peut être négligée et que les variations d'indices sont faibles [14]. Lorsque les dimensions sont très grandes devant la longueur d'onde, on pourra utiliser l'optique géométrique (OG) [124] . D'autres théories approchées sont répandues comme par exemple la Distorded Born Approximation (DBA)[75], la méthode des matrices S [87] ou celle des sources fictives [87].

Les méthodes numériques sont employées lorsque la taille des hétérogénéités se rapproche de la longueur d'onde, ou que la forme des particules est complexe [20]. La FDTD est largement utilisée, notamment grâce à sa capacité à traiter des géométries quelconques [120, 122] ou des indices optiques variants continûment dans l'espace [91]. Ainsi, elle est utilisée pour l'étude de la réponse optique sur une large bande spectrale de cellules de peau présentant des variations d'indice rapide et des hétérogénéités de la taille de la longueur d'onde [52, 31, 32]. En effet l'utilisation d'une méthode numérique différentielle, comme la FDTD, permet de traiter un nombre arbitraire de particules sans augmenter le nombre

d'inconnues grâce à son maillage volumique.

Les méthodes intégrales de surfaces sont moins employées, car leur utilisation est ici plus lourde que pour le calcul de la diffusion par une surface rugueuse. La Méthode des Moments est utilisée dans [33, 4, 109, 2] pour diverses tailles et formes de particules en 2D et en 3D.

D'autres approches sont néanmoins possibles, ainsi Stout *et al* décrivent la diffusion par un demi-espace comportant des sphères en utilisant les matrices de transfert [118]. Mishenko *et al* présentent, dans leur livre, également la FDTD ou la DDA (Discrete Dipole Approximation) qui est une méthode intégrale de volume[90].

Diffusion par un milieu hétérogène rugueux La diffusion par un matériau hétérogène rugueux fait intervenir les deux parties précédentes [58]. Néanmoins, la littérature disponible sur ce sujet est beaucoup plus réduite. Deux approches sont représentées :

- L'utilisation de deux méthodes différentes pour traiter la surface et le volume, on parlera alors d'hybridation de méthodes ;
- L'utilisation d'une méthode pouvant traiter simultanément un problème surface/volume.

La première approche est en général plus rapide mais repose souvent sur de nombreuses hypothèses. On trouve dans cette catégorie les méthodes combinant deux modèles approchés. L'approche la plus utilisée est l'ETR pour la diffusion volumique avec le modèle de Kirchhoff pour la diffusion surfacique [74, 18, 53, 33].

Partant sur une base différente, les articles [112, 87] montrent qu'il est possible de séparer la diffusion due au volume de la diffusion due à la surface. Le résultat est alors la somme des deux contributions. Cette approche est validée numériquement sur les cas présentés par une méthode basée sur la MoM pour l'étude de la diffusion par la surface et sur le formalisme des matrices S pour le calcul de la diffusion par le volume. Une méthode des moments hybride est aussi utilisée dans [110] combinée à la théorie des images pour l'étude de bosses hétérogènes.

Les approches perturbatives sont aussi utilisées. Ainsi, la MFT [14] permet d'étudier un milieu hétérogène rugueux pour des hétérogénéités dans le régime d'homogénéisation et pour de faibles contrastes d'indice. On retrouve une approche perturbative dans l'article [92] pour un domaine de validité équivalent.

Les méthodes rigoureuses pures n'ont pas été beaucoup appliquées à l'étude d'un milieu hétérogène rugueux. Leur coût numérique est en effet important. Néanmoins la FDTD a été utilisée pour l'étude de la glace [95] dans le domaine micro-onde. Dans ce cas, la taille des particules est très faible devant la longueur d'onde. La FEM a été utilisée pour l'étude d'un milieu hétérogène lamellaire rugueux [99] ou pour une particule unique sur une surface rugueuse [64].

On trouvera dans [9] une étude expérimentale de la contribution de la diffusion surfacique par rapport à la diffusion volumique dans le cas de la glace.

Notre travail de thèse se propose d'approfondir ces aspects en s'appuyant sur une méthode numérique.

Nous présenterons dans le premier et dans le deuxième chapitre la méthode de calcul retenue pour l'étude de la diffusion par un milieu hétérogène rugueux. Elle se base sur l'algorithme de la FDTD en 2D couplé à une génération de milieu basé sur l'algorithme de Metropolis. La méthode numérique de résolution du problème électromagnétique a été choisie pour sa capacité à traiter simplement le problème de surface/volume sans faire d'approximation ou d'hypothèses de couplage. Nous validerons notre approche en comparant les résultats obtenus par la FDTD au diagramme de diffusion analytique en champ lointain de cylindres à section circulaire. Nous finirons le calcul de l'étude de milieux semi-infini et par des exemples de BRDF.

Dans le troisième chapitre, nous expliciterons les algorithmes de génération de la surface et du milieu hétérogène. Nous montrerons des fonctions de représentation des statistiques des milieux générés. Nous finirons par un algorithme de génération de surfaces reposant sur les particules.

Nous aurons alors une méthode numérique et un générateur de milieu polyvalent pour étudier la diffusion par des matériaux hétérogènes rugueux. Les prochains chapitres montreront des applications de cette méthode.

Dans le quatrième chapitre de ce manuscrit nous présenterons l'utilisation de la méthode pour déterminer le diagramme de diffusion par un matériau homogène rugueux. Cette étude sera faite en comparant les résultats obtenus par la FDTD avec une autre méthode rigoureuse : la MoM. Nous chercherons à déterminer un domaine de validation croisé des deux approches pour des surfaces rugueuses hors du domaine d'application des méthodes asymptotiques. Cette étude sera faite pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle et gaussienne.

Le cinquième chapitre sera orienté vers la détermination de paramètres effectifs pour la propagation du champ cohérent et sur le diagramme de diffusion de milieux hétérogènes. Nous présenterons une approche nouvelle de détermination de l'indice effectif basée sur l'étude de la décroissance du champ à l'intérieur du milieu étudié. Ces résultats pour des milieux monodisperses seront comparés avec des modèles analytiques approchés. Nous appliquerons cette méthode à l'homogénéisation des petites particules dans un ensemble bidisperse de particules.

Le sixième et dernier chapitre sera relatif à l'étude du couplage surface volume. Nous l'étudierons pour différentes tailles et indice de particule avec des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle. Nous finirons par une étude plus originale en utilisant des surfaces corrélées à la position des particules.

Première partie

Présentation de la méthode

Chapitre 1

Chaîne de modélisation

1.1 Introduction

Nous avons présenté dans l'introduction plusieurs méthodes permettant de modéliser la diffusion par des matériaux hétérogènes rugueux. Dans notre cas, nous cherchons à obtenir une méthode de référence pour le calcul du problème complet et pour la détermination du domaine de validité de méthodes approchées.

Ces exigences nous ont conduit à choisir une méthode rigoureuse de résolution des équations de Maxwell. Nous avons retenu la FDTD, car elle permet de traiter les problèmes de diffusion surfacique, volumique ou couplant les deux de la même façon et sans faire d'hypothèses. Elle est donc adaptée pour servir méthode de référence pour les études sur les matériaux hétérogènes rugueux quelles que soient leurs géométries ou leurs propriétés physiques.

Nous allons commencer ce chapitre par la définition d'une grandeur souvent utilisée dans le domaine optique pour étudier le champ lointain rayonné : la BRDF (Bidirectional Reflectance Directional Function). Nous poursuivrons en définissant l'objet de notre étude et notamment le modèle utilisé pour représenter ces matériaux. Nous finirons en montrant comment la FDTD s'intègre dans une chaîne de modélisation pour le calcul de la diffusion.

1.2 BRDF d'un matériau

Nous cherchons à obtenir par la modélisation la BRDF [119] de matériaux hétérogènes rugueux à partir de leurs propriétés statistiques et physiques. Cette grandeur repose sur deux autres quantités radiatives : la luminance et l'éclairement. Nous commencerons par les définir pour aboutir dans le chapitre 2 à une formulation de la BRDF pour une géométrie bidimensionnelle adaptée à notre algorithme.

– La luminance :

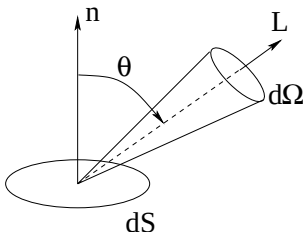


FIG. 1.1 – Luminance

La luminance L est définie comme le flux d'énergie émis par unité d'angle solide dans la direction (θ, ϕ) par unité de surface. Si on appelle d^2F le flux rayonné à travers une surface élémentaire orientée dS à l'intérieur d'un angle solide $d\Omega$ dans une direction (θ, ϕ) alors la luminance se définit comme :

$$L(\theta, \phi) = \frac{d^2F(\theta, \phi)}{d\Omega d\sigma} \tag{1.1}$$

L'angle θ est défini par la direction d'émission par rapport à la normale à la surface. $d\sigma$ est la surface apparente et vaut $d\sigma = dScos\theta$. La géométrie de calcul est représentée Figure 1.1.

Lorsque la luminance L ne dépend pas de (θ, ϕ) on dit que le rayonnement est lambertien.

– L'éclairement

L'éclairement E est défini comme la densité de flux F traversant la surface dS à l'intérieur d'un angle solide Ω. Il s'obtient en intégrant la luminance :

$$E = \int_{\Omega} L(\theta, \phi) cos\theta d\Omega$$

– La Fonction de Distribution de la Réflectance Bidirectionnelle (FDRB)

La FDRB est plus connue sous son acronyme anglais BRDF (Bidirectional Reflectance Distribution Function). Cette grandeur caractérise la réponse optique en réflexion d'un matériau. Elle dépend de l'angle d'incidence et de l'angle d'observation, des paramètres statistiques et physiques du matériau. Elle est notée ρ'', et elle est définie comme le rapport de la luminance directionnelle diffusée L_r par l'échantillon à l'éclairement directionnel incident E_i de direction (θ_i, ϕ_i). Dans la direction (θ_r, ϕ_r), elle s'écrit :

$$\rho''(\theta_i, \phi_i, \theta_r, \phi_r) = \frac{L_r(\theta_r, \phi_r)}{E_i(\theta_i, \phi_i)} \tag{1.2}$$

Son unité est le $[sr^{-1}]$. La géométrie de calcul est présentée Figure 1.2.

On peut définir de même la BTDF (Bidirectional Transmittance Distribution Function) pour la lumière transmise. Le terme BSDF (Bidirectional Scattered Distribution Function) désigne quand à lui l'ensemble BRDF et BTDF.

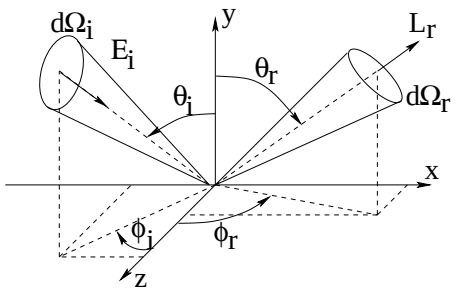


FIG. 1.2 – La réflectance bidirectionnelle

Dans notre cas, nous sommes dans une géométrie bidimensionnelle. On a donc $d\Omega = d\theta$ et $d\sigma = cos\theta dl$. La luminance s'écrit alors :

$$L(\theta) = \frac{d^2F}{cos\theta dl d\theta} \tag{1.3}$$

Nous verrons dans le chapitre suivant une définition de la BRDF pour les géométries étudiées.

1.3 Modèle

Nous étudions, dans le cadre de cette thèse, des matériaux hétérogènes rugueux comprenant (Figure 1.3) :

- Un milieu hôte homogène (1) caractérisé par son indice optique ;
- Une surface rugueuse (2) séparant le milieu hôte du vide caractérisée par ses paramètres statistiques ;
- Un ensemble polydisperse de particules (3) caractérisées par leur forme, leur distribution spatiale, leur taille, leur indice optique.

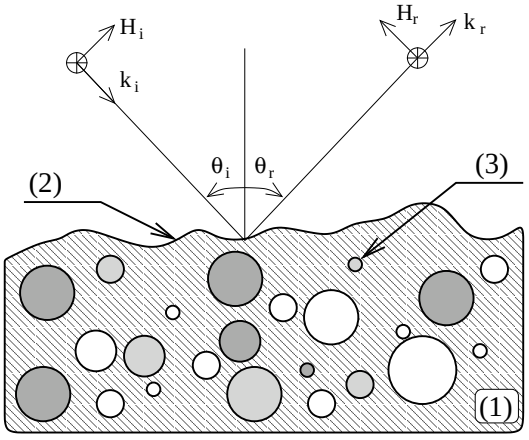


FIG. 1.3 – Objet de l'étude

Comme nous le verrons dans le prochain chapitre, la FDTD nous permet de modéliser le champ lointain diffracté par un milieu déterminé (la permittivité et la perméabilité doivent être connues dans tout l'espace de calcul). Un exemple de résultat du calcul de la diffusion par une surface rugueuse déterministe éclairée par un faisceau gaussien est présenté figure 1.4(a). On observe une figure de tavelure (plus communément appelée speckle en anglais).

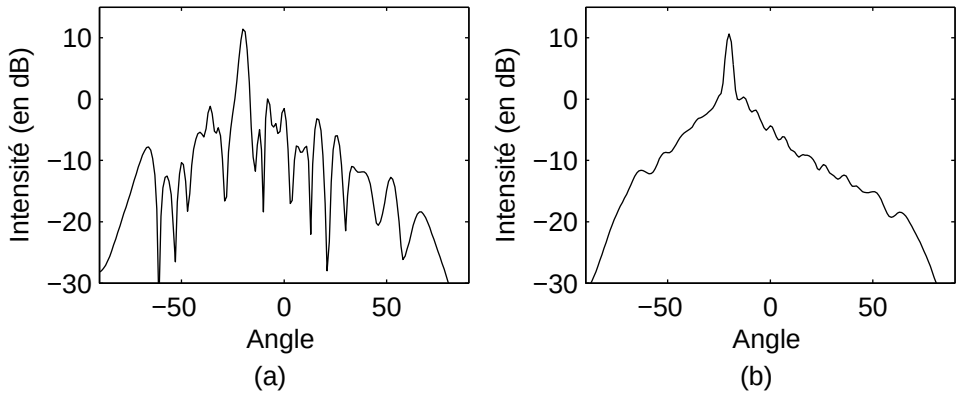


FIG. 1.4 – Intensité diffusée par une réalisation d'une surface rugueuse (a) et moyenne effectuée pour 150 réalisations (b)

Les oscillations rapides du diagramme proviennent de la nature parfaitement cohérente de l'onde incidente. En effet, les ondes réfléchies par la surface interagissent de manière destructive ou constructive suivant leur phase. On montre [108] que l'ouverture angulaire $\delta\theta$ des pics de la figure de tavelure dépend de la taille L de la surface illuminée par le faisceau incident et de la longueur d'onde λ étudiée. Elle vaut grossièrement $\delta\theta = \lambda L^{-1}$. Expérimentalement, la longueur de cohérence finie des sources lasers et l'intégration angulaire des détecteurs masquent en partie ce phénomène.

Ainsi, la figure 1.4(a) dépend de la surface étudiée et de l'onde incidente. Elle présente donc un intérêt limité. Afin d'obtenir une BRDF uniquement dépendante des paramètres statistiques et physiques de la surface, le résultat du calcul par la FDTD du champ lointain est moyenné sur un grand nombre de réalisations. La figure 1.4(b) présente le résultat de la moyenne effectuée sur 150 réalisations. La plupart des méthodes asymptotiques donnent directement le résultat pour une infinité de réalisations.

La première étape de calcul consiste donc à générer un ensemble de réalisations respectant les caractéristiques physiques et statistiques du cas considéré. Cette étape fait appel à un générateur de milieu basé sur l'algorithme de Metropolis pour le positionnement des hétérogénéités. Son utilisation nous permet de prendre en compte des contraintes physiques (comme le fait que les particules ne doivent pas s'interpénétrer) et d'atteindre des fortes fractions volumiques dans un temps de calcul raisonnable.

En résumé la chaîne de modélisation comportera les éléments suivants :

- Un générateur de milieux aléatoires ;
- Un solveur électromagnétique.

Le tout étant intégré dans un algorithme de Monte Carlo.

Nous allons maintenant présenter ces deux composantes plus en détail au cours des deux chapitres suivants.

Chapitre 2

Méthode de résolution électromagnétique

2.1 Introduction

La FDTD est une méthode numérique différentielle proposée en 1966 par Yee [134, 123] suivant un algorithme efficace. Elle se base sur des différences finies centrées d'ordre deux en espace et en temps appliquées aux équations de Maxwell. Il s'agit d'une méthode de résolution des équations de Maxwell sous leur forme différentielle ; l'espace étudié entier est discrétisé. Cette méthode présente plusieurs avantages numériques. Tout d'abord, son schéma est explicite facilitant son implémentation. De plus, sa complexité croit en $O(N)$ où N est le nombre d'inconnues. Elle permet donc de calculer la diffraction par des objets de grande taille devant la longueur d'onde [38]. L'objectif de ce chapitre est de présenter les grandes lignes de cette méthode et de donner les adaptations effectuées pour traiter des matériaux hétérogène rugueux. Cette présentation sera orientée sur l'application de la FDTD à l'étude de la diffusion par un milieu semi-infini et son utilisation en tant que méthode de référence.

Dans la première partie de ce chapitre, nous déterminerons les équations de base de la FDTD à partir des équations de Maxwell dans les milieux diélectrique l.h.i. (linéaire homogène isotropes) [24]. Nous étudierons notamment l'insertion du champ incident dans le domaine de calcul avec une formulation champ total / champ diffracté. Puis, nous verrons comment calculer les champs lointains rayonnés par l'objet étudié à partir des résultats en champ proche de la FDTD. Car, en effet, c'est à partir des champs lointains que nous pourrons calculer la BRDF.

Dans une deuxième partie, nous présenterons les résultats de la validation de notre algorithme sur des géométries canoniques (cylindres diélectriques infinis en incidence normale). Cette étape nous permettra de déterminer les paramètres de calcul pour avoir une précision suffisante dans la suite de l'étude pour le calcul de la diffusion de volume. Nous

commencerons par comparer le résultat en champ lointain de la FDTD avec le résultat analytique du modèle de Rayleigh [70] pour différentes tailles de cylindres et différents indices. Nous comparerons finalement nos résultats numériques avec un modèle négligeant l'interaction entre particules pour deux cylindres en faisant varier leur distance inter-centre.

La troisième partie de ce chapitre exposera les adaptations apportées à l'algorithme FDTD en espace libre pour pouvoir traiter des milieux semi-infinis. Nous étudierons une approche originale d'insertion du champ incident dans le domaine de calcul basée sur l'utilisation d'un faisceau gaussien. Nous présenterons notamment son comportement en incidence.

Finalement, dans la quatrième partie, nous étudierons des exemples de BRDF calculées avec l'algorithme présenté dans ce chapitre. Nous ferons la distinction entre champ cohérent et champ incohérent. Puis, nous présenterons des phénomènes cohérents difficilement modélisables sans une approche rigoureuse de résolution des équations de Maxwell.

2.2 Implémentation en espace libre

2.2.1 Équations de Maxwell dans les milieux

La FDTD est une méthode basée sur la discrétisation des équations de Maxwell en temporel dans les milieux. Celles-ci régissent, à un niveau mésoscopique, le comportement du champ électrique $\vec{E}$ et du champ magnétique $\vec{H}$ à partir des caractéristiques électromagnétiques du milieu : la permittivité ϵ, la perméabilité μ, et la conductivité σ. Ces équations sont exprimées pour un milieu diélectrique homogène linéaire isotrope et s'obtiennent à partir des équations de Maxwell dans le vide. Nous supposerons qu'il n'y a pas de dispersion sur la partie réelle de la permittivité ϵ et que les courants $\vec{j}$ suivent la loi d'Ohm locale :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \tag{2.1}$$

Elles s'écrivent :

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \overrightarrow{rot} \vec{E} \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \overrightarrow{rot} \vec{H} - \frac{\sigma}{\epsilon} \vec{E} \tag{2.3}$$

Afin de symétriser ces équations et de pouvoir par la suite créer un matériau fictif absorbant, nous introduisons une conductivité magnétique ρ' :

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu}\overrightarrow{rot}\vec{E} - \frac{\rho'}{\mu}\vec{H} \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\overrightarrow{rot}\vec{H} - \frac{\sigma}{\epsilon}\vec{E} \tag{2.5}$$

La conductivité magnétique n'ayant pas de sens physique, elle est nulle pour un matériau réel. En projetant ces équations sur un système de coordonnées cartésiennes, on trouve :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} - \rho' H_x\right) \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} - \rho' H_y\right) \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \rho' H_z\right) \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x\right) \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y\right) \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z\right) \tag{2.11}$$

Lorsque le problème est bidimensionnel, c'est à dire lorsqu'il possède une direction d'invariance, le système ci-dessus peut se découpler en deux sous-systèmes disjoints de trois équations associées à deux polarisations indépendantes. Les orientations utilisées sont présentées Figure 2.1.

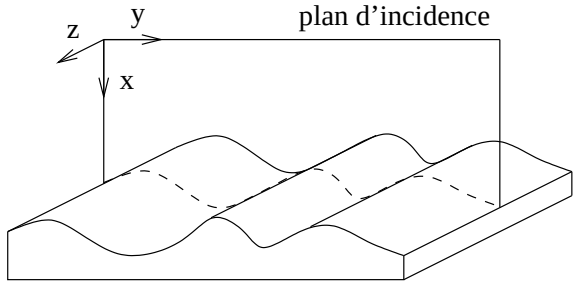


FIG. 2.1 – Géométrie de calcul bidimensionnelle

Nous prendrons ici les conventions suivantes :

- La polarisation TE ou H// ou VV pour laquelle le champ électrique est transverse et le champ magnétique parallèle à la direction d'invariance ;

– La polarisation TM ou E// ou HH pour laquelle le champ magnétique est transverse et le champ électrique parallèle à la direction d'invariance.

Si l'on prend l'axe z comme direction d'invariance, les deux sous-systèmes sont :

– En polarisation TM :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(-\frac{\partial E_z}{\partial y} - \rho' H_x\right) \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \rho' H_y\right) \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z\right) \tag{2.14}$$

– En polarisation TE :

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x\right) \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon}\left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y\right) \tag{2.16}$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \rho' H_z\right) \tag{2.17}$$

Ce sont ces équations que nous allons discrétiser dans la suite de ce chapitre. On remarque qu'elles satisfont au principe de dualité selon lequel un champ électrique doit être remplacé par un champ magnétique sans changement de signe tandis qu'un champ magnétique doit être remplacé par un champ électrique avec changement de signe. Les ϵ et μ doivent être échangées sans changement de signe.

2.2.2 Discrétisation des équations de Maxwell

Nous allons rappeler les grandes étapes de leur discrétisation. Nous étudierons ici la polarisation TM, sachant que l'on peut appliquer le même raisonnement dans l'autre polarisation. Le passage de l'une à l'autre se fait par interversion des champs et des constantes électromagnétiques.

Le domaine de calcul est discrétisé par un maillage régulier rectangulaire (c.f. Figure 2.2). Les champs $\vec{E}$ et $\vec{H}$ sont décalés d'un demi pas d'espace et de temps.

On pose $(\Delta x, \Delta y)$ comme pas de maillage spatial respectivement sur l'axe x et l'axe y et Δt le pas de maillage temporel. On associe à un point M de coordonnées (i, j) dans le domaine de calcul discrétisé, ses coordonnées cartésiennes $(i\Delta x, j\Delta y)$ dans l'espace réel. On notera de la même façon $F^n(i, j)$ la valeur d'une fonction dépendant de l'espace et du temps pour représenter $F(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t)$. n est le numéro d'itération en temps de l'algorithme.

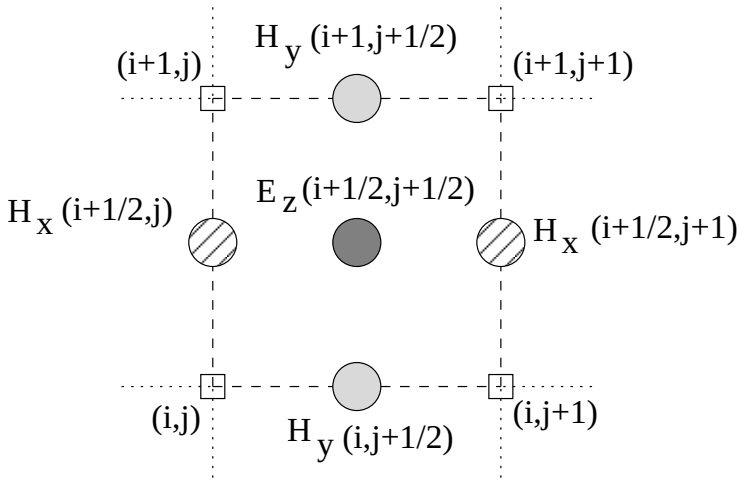


FIG. 2.2 – Maille FDTD en polarisation TM

Le schéma de Yee est basé sur des différences finies centrées d'ordre 2 en espace et en temps. La discrétisation des dérivées spatiales ou temporelles d'un champ F représentant E ou H est effectuée grâce aux expressions suivantes :

$$\frac{\partial F^n(i,j)}{\partial t} = \frac{F^{n+\frac{1}{2}}(i,j) - F^{n-\frac{1}{2}}(i,j)}{\Delta t} \tag{2.18}$$

$$\frac{\partial F^n(i,j)}{\partial x} = \frac{F^n(i+\frac{1}{2},j) - F^n(i-\frac{1}{2},j)}{\Delta x} \tag{2.19}$$

L'approximation des dérivées est centrée. Cette caractéristique du schéma de Yee lui permet d'avoir une précision d'ordre deux (en $o(\Delta x^2)$ et en $o(\Delta t^2)$) et d'être plus stable et plus précis. L'interpolation de la fonction F s'effectue à l'aide d'une fonction linéaire :

$$F^n(i,j) = \frac{F^n(i+\frac{1}{2},j) + F^n(i-\frac{1}{2},j)}{2} \tag{2.20}$$

Les équations (2.18) à (2.20) sont utilisées pour discrétiser les équations de Maxwell. Par exemple pour le cas TM (équations 2.12 à 2.14), on obtient :

$$
\begin{aligned}
H_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j) &= \frac{\left(1-\frac{\Delta t\rho'_{ij}}{2\mu}\right)}{\left(1+\frac{\Delta t\rho'_{ij}}{2\mu_{ij}}\right)} H_x^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j) \\
&+ \frac{\Delta t}{\mu\left(1+\frac{\Delta t\rho'_{ij}}{2\mu_{ij}}\right)} \left(\frac{E_z^n(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}) - E_z^n(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2})}{\Delta y}\right) \quad (2.21) \\
H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j) &= \frac{\left(1-\frac{\Delta t\rho'_{ij}}{2\mu}\right)}{\left(1+\frac{\Delta t\rho'_{ij}}{2\mu_{ij}}\right)} H_y^{n-\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j) \\
&+ \frac{\Delta t}{\mu\left(1+\frac{\Delta t\rho'_{ij}}{2\mu_{ij}}\right)} \left(\frac{E_z^n(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}) - E_z^n(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2})}{\Delta x}\right) \quad (2.22) \\
E_z^{n+1}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}) &= \frac{\left(1-\frac{\Delta t\sigma_{ij}}{2\epsilon_{ij}}\right)}{\left(1+\frac{\Delta t\sigma_{ij}}{2\epsilon_{ij}}\right)} E_z^n(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}) \\
&- \frac{\Delta t}{\left(1+\frac{\Delta t\sigma_{ij}}{2\epsilon_{ij}}\right)} \left(\frac{H_y^{n+\frac{1}{2}}(i+1,j+\frac{1}{2}) - H_y^{n+\frac{1}{2}}(i,j+\frac{1}{2})}{\Delta x}\right. \\
&- \left.\frac{H_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j)}{\Delta y}\right) \quad (2.23)
\end{aligned}
$$

où ϵ_{ij}, σ_{ij}, μ_{ij} et ρ'_{ij} représentent les valeurs de ϵ, σ, μ et ρ' au noeud (i,j).

Ces équations permettent de calculer le champ au pas de temps n à partir des champs limitrophes au pas de temps précédant. Ainsi, tous les calculs sont effectués de manière locale. Néanmoins, la valeur des champs aux bords du domaine de calcul doit être connue. Nous verrons comment traiter ce problème à l'aide de conditions aux limites absorbantes.

2.2.3 Représentation des surfaces courbes

La discrétisation de l'espace de calcul pour la FDTD modifie la représentation des surfaces courbes ou transverses en introduisant des marches d'escaliers [56, 66, 16]. Cette approximation peut conduire à des erreurs significatives lors de la modélisation de structure fines [116]. Kaneda *et al.* [67] proposent une méthode pour prendre en compte les cellules FDTD remplies d'un matériau de permittivité ϵ_1 et d'un matériau de permittivité ϵ_2 de fractions volumiques respective $(1-f_v)$ et f_v. Pour cela, en polarisation TM, ils utilisent la loi d'Ampère appliquée sur une maille de surface S et de contour C :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_S \vec{D}d\vec{S} = \oint_C \vec{H}d\vec{l} \quad (2.24)$$

Soit, après discrétisation :

$$\Delta x\Delta y\frac{D_z^{n+1}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})-D_z^{n}(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})}{\Delta t}$$
$$=\Delta x(H_x^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j)-H_x^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2},j))-\quad\Delta y(H_y^{n+\frac{1}{2}}(i,j+\frac{1}{2})-H_y^{n+\frac{1}{2}}(i,j-\frac{1}{2})) \tag{2.25}$$

Comme la composante parallèle du champ électrique est continue à l'interface, on peut exprimer D_z comme :

$$D_z=(f_v\epsilon_2+(1-f_v)\epsilon_1)E_z \tag{2.26}$$

On retrouve alors une équation similaire à l'équation (2.23) avec $\epsilon=(f_v\epsilon_2+(1-f_v)\epsilon_1)$. Nous en verrons une application dans le chapitre 4 pour l'étude de surfaces rugueuses de fonction d'auto-corrélation exponentielle.

2.2.4 Équivalence conductivité/partie imaginaire de la permittivité

Un matériau absorbant est représenté par une permittivité complexe. Or l'algorithme FDTD [61] que nous utilisons ne permet de prendre en compte que des permittivités réelles. Afin de pouvoir prendre en compte la partie imaginaire de la permittivité, nous utilisons la conductivité. En effet, les équations de Maxwell en régime harmonique s'écrivent (avec la convention $\frac{\partial}{\partial t}\leftrightarrow -i\omega$) :

$$\nabla\times\vec{H} = -i\omega\epsilon\vec{E}+\sigma\vec{E} \tag{2.27}$$
$$\nabla\times\vec{E} = i\omega\mu_0\vec{H} \tag{2.28}$$

En exprimant la permittivité sous forme complexe, il vient :

$$\epsilon=\epsilon_1+i\epsilon_2 \tag{2.29}$$

En introduisant l'équation (2.29) dans (2.27), on trouve :

$$\nabla\times\vec{H}=-i\omega\epsilon_1\vec{E}+(\sigma+\omega\epsilon_2)\,\vec{E} \tag{2.30}$$

On définit donc la conductivité équivalente par :

$$\sigma_{eq}=\sigma+\omega\epsilon_2 \tag{2.31}$$

Celle-ci est réelle et permet donc de modéliser un matériau absorbant dans notre al-

gorithme. Néanmoins, la valeur de σ_{eq} obtenue dépend de la fréquence ; nous prendrons la fréquence principale de l'onde incidente. La permittivité du milieu ne sera donc plus représentative que sur un domaine restreint du spectre électromagnétique. Cette approximation conduit à des erreurs négligeables dans le domaine temporel [61] mais pourrait introduire des erreurs importantes lorsque nous nous intéressons à une fréquence particulière du spectre. Il faudra donc prendre en compte cet effet lorsque les calculs ne seront pas effectués à la fréquence centrale de l'onde incidente et utiliser une permittivité corrigée.

2.2.5 Condition de stabilité du schéma de Yee

La condition de stabilité permet de s'assurer que l'erreur générée par l'approximation de Yee ne diverge pas lors de l'écoulement du temps. Elle relie le pas de discrétisation spatial au pas de discrétisation temporel. Elle s'écrit :

$$c\Delta t \leq \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}}} \tag{2.32}$$

où c est la vitesse maximale de l'onde dans le domaine de calcul. Dans le cas général où $\Delta x = \Delta y$ (que nous considérerons par la suite), la condition de stabilité s'écrit :

$$c\Delta t \leq \frac{\Delta x}{\sqrt{2}} \tag{2.33}$$

En fait, pour un problème de dimension D, cette condition s'écrit $c\Delta t \leq \Delta x/\sqrt{D}$. Dans notre cas (géométrie bidimensionnelle) nous utiliserons la condition $c\Delta t = \frac{\Delta x}{2}$.

2.2.6 Conditions absorbantes

Comme nous l'avons vu dans les équations (2.21) à (2.23), nous devons pouvoir connaître les valeurs des champs aux limites du domaine de calcul. On distingue deux approches différentes pour traiter ce problème :

- L'absorption numérique : il s'agit d'équations mathématiques permettant de calculer le champ sur le bord du domaine de calcul comme si celui-ci était ouvert sur l'espace libre. Les plus connues sont les conditions de Mur [93], ou plus récemment des conditions exactes par hybridation avec des équations intégrales temporelles [78].
- Des matériaux absorbants : il s'agit d'absorber l'onde avant qu'elle n'arrive aux bords du domaine de calcul à l'aide de matériaux absorbants adaptés. Les conditions absorbantes les plus performantes et les plus utilisées sont les PML [13].

Le code de calcul utilise une combinaison de ces deux méthodes : les Absorbants Large Bande (ALB) comme matériau absorbant et les conditions de Mur du premier ordre comme absorption numérique. La description du choix de ces conditions et de leur implémentation est faite dans la thèse de Jaureguy [61].

2.2.7 Dispersion numérique

La discrétisation spatiale et temporelle du schéma de Yee modifie la vitesse de propagation des ondes dans le milieu. Cet effet, dont l'amplitude dépend de la fréquence provoque une modification de la forme de l'onde (c.f. Figure 2.3). C'est un des effets les plus gênants lors de l'utilisation d'algorithmes tel que la FDTD.

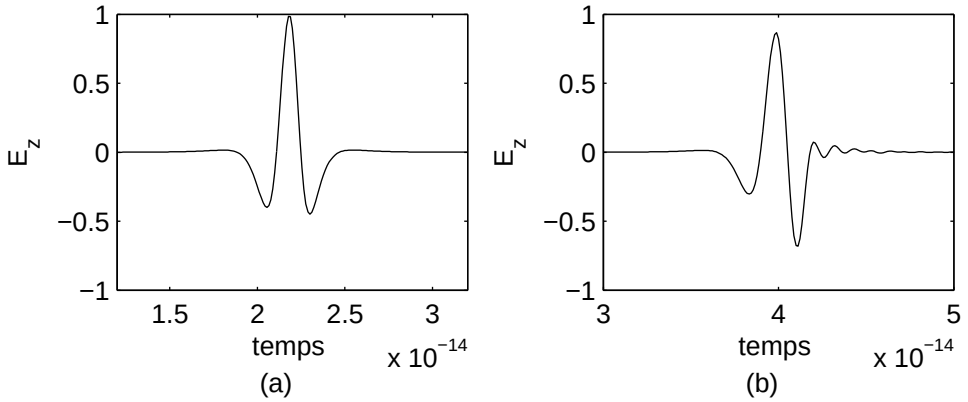


FIG. 2.3 – Effet de la dispersion numérique pour un pas de discrétisation spatial de $\lambda_0/15$ sur le champ $|E_z|$ pris en deux points de l'espace de calcul, la figure (a) représente l'onde initiale et la figure (b) l'onde propagée

La dispersion numérique dépend :

- du pas de maillage spatial et de la longueur d'onde ;
- des indices des milieux rencontrés ;
- de l'orientation du vecteur d'onde par rapport à l'orientation du maillage ;
- de la taille du domaine de calcul.

Cet effet diminue avec le pas de maillage et peut être pris en compte [83, 91, 129]. On peut ainsi parfois intégrer son effet lors du calcul des observables. Nous verrons comment nous prenons en compte cet effet lors de l'insertion du champ incident.

2.2.8 Onde incidente

2.2.8.1 Expression temporelle

Nous devons choisir la variation temporelle de l'amplitude de la source. Cette forme est souvent fixée par le phénomène étudié. Dans notre cas, nous cherchons à disposer d'une information du comportement du matériau sur le spectre le plus large possible. Ainsi nous avons choisi [61] d'utiliser une impulsion courte large bande : l'ondelette de Rayleigh. Au temps t et pour une distance x par rapport à la source, son expression est donnée par :

$$F_{inc}(x,t) = \Re e\left(\frac{i}{\left(\frac{t-\frac{x}{c}}{2}\pi f + i\right)^5}\right) \tag{2.34}$$

$\Re e$ représente la partie réelle, c la vitesse de la lumière dans le vide et f la fréquence centrale de l'onde incidente. La forme de l'impulsion est représentée Figure 2.3(a). Nous pourrons ensuite utiliser une transformée de Fourier pour remonter au comportement du matériau sur un large spectre. Cette transformation permet d'étudier le comportement en régime continu plus commun en optique.

2.2.8.2 Découpage champ total/champ diffracté

Le domaine de calcul FDTD est limité spatialement. Afin de modéliser une source située à l'infini et de pouvoir séparer facilement le champ diffracté par l'objet du champ incident, deux approches sont possibles :

- Le découpage du domaine de calcul en deux zones : une zone de champ total dans laquelle le champ incident et le champ diffracté sont calculés ensemble et une zone de champ diffracté seul ;
- Le calcul en champ diffracté seul.

La seconde solution conduit à des erreurs plus importantes dues à la dispersion numérique [61]. Notre algorithme utilise donc un découpage en champ total/champ diffracté comme montré sur la Figure 2.4. La surface séparatrice s'appelle surface de Huygens et elle servira à introduire le champ incident.

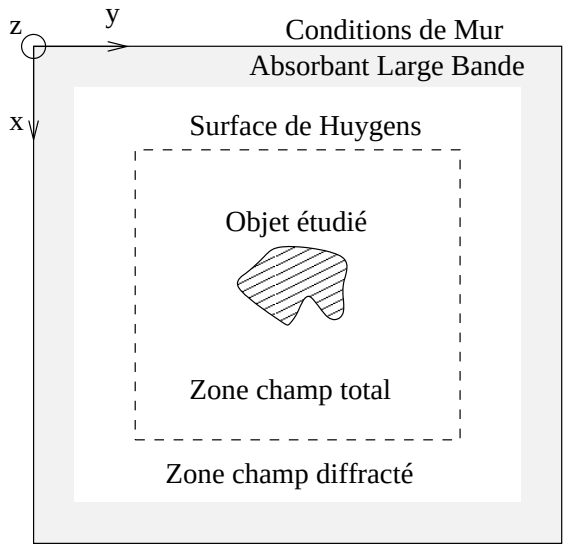


FIG. 2.4 – Découpage champ total / champ diffracté dans le domaine de calcul FDTD pour un objet en espace libre

Pour la suite de la thèse, les coordonnées des coins de la surface de Huygens seront dénommées (i_1, j_1), (i_1, j_2), (i_2, j_1), (i_2, j_2).

2.2.8.3 Introduction du champ incident

La technique présentée dans l'article de Mur et Taflove [123]) repose sur le principe d'équivalence. L'équation (2.34) permet d'obtenir analytiquement la valeur du champ incident dans tout l'espace de calcul, et en particulier sur la surface de Huygens. Le champ incident est inséré dans le domaine de calcul en ajoutant sa valeur sur la surface de Huygens dans la zone de champ total dans les équations (2.21) à (2.23). Elle agit alors comme une antenne qui rayonne le champ désiré. Afin de limiter son extension à la zone de champ total il est ré-émis sur une surface écartée d'une demi-maille en opposition de phase (il est retranché) dans la zone de champs diffracté (voir Figure 2.5).

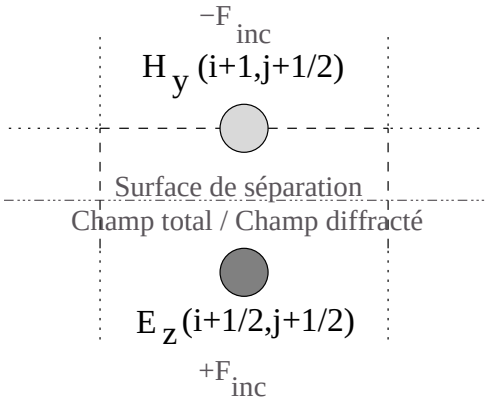


FIG. 2.5 – Insertion du champ incident sur une maille de la surface de Huygens

Par exemple, pour la partie de la surface du Huygens située entre les points de coordonnées (i_1, j_1) et (i_1, j_2), on obtient les équations suivantes en polarisation TM :

$$H_y^{n+\frac{1}{2}}(i_1+1, j+\frac{1}{2}) = H_y^{n+\frac{1}{2}}(i_1+1, j+\frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\mu} E_z^{inc}(i_1+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, n) \quad (2.35)$$

$$E_z^{n+1}(i_1+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) = E_z^{n+1}(i_1+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{\epsilon} H_y^{inc}(i_1+1, j+\frac{1}{2}, n+\frac{1}{2}) \quad (2.36)$$

On effectue des opérations similaires sur les trois autres faces. Néanmoins, comme il a été expliqué dans la partie 2.2.7, toute onde qui se propage dans le domaine de calcul FDTD subit une dispersion numérique. Ainsi, au fur et à mesure de la propagation de l'onde dans le domaine, la soustraction de l'onde incidente analytique à l'onde incidente réelle sera de moins en moins exacte. Cet effet entraîne des fuites sur la surface de Huygens susceptible de masquer les phénomènes que nous souhaitons observer. Par exemple, la Figure 2.6 représente l'amplitude du champ E_z dans tout le domaine de calcul pour une

zone de champ total située au centre du domaine de calcul entre les mailles 50 et 150 dans les deux dimensions. Comme, il n'y a pas d'éléments diffusant, la zone de champ diffracté devrait être vide. Les fuites sont ici faibles (-25 dB par rapport à l'amplitude maximale) pour les deux incidences représentées et ne sont pas gênantes lorsque la diffusion par l'objet étudié est suffisamment forte. Néanmoins, elles peuvent masquer des phénomènes de diffusion assez faibles, par exemple, lorsque les indices optiques des objets étudiés sont proches de celui de l'environnement extérieur.

2.2.8.4 Initialisation numérique

Ces fuites ne sont pas toujours acceptables pour l'étude de phénomènes fins pour la diffusion par des particules ou des objets en espace libre. En effet, la diffusion de l'objet peut devenir plus faible que les fuites sur la surface de Huygens, comme par exemple des particules dont l'indice est proche du milieu hôte. Ainsi, nous allons utiliser une autre forme d'initialisation pour améliorer la soustraction du champ incident sur la surface de Huygens [62]. Nous utilisons pour cela un algorithme FDTD monodimensionnel calculant en parallèle la propagation de l'onde incidente. Ce schéma est soumis aux mêmes erreurs que le schéma principal. L'utilisation de cette méthode est simple et rapide. Ainsi par exemple en TM, les équations de cet algorithme FDTD sont :

$$\tilde{H}_y^{n+\frac{1}{2}}(i) = \tilde{H}_y^{n-\frac{1}{2}}(i) + \frac{\Delta t}{\mu}\left(\frac{\tilde{E}_z^n\left(i+\frac{1}{2}\right) - \tilde{E}_z^n\left(i-\frac{1}{2}\right)}{\Delta x}\right) \tag{2.37}$$

$$\tilde{E}_z^{n+1}(i+\frac{1}{2}) = \tilde{E}_z^n(i+\frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{\epsilon}\left(\frac{\tilde{H}_z^{n+\frac{1}{2}}(i) - \tilde{H}_z^{n+\frac{1}{2}}(i)}{\Delta x}\right) \tag{2.38}$$

En prenant pour condition de stabilité $\Delta t = \frac{\Delta x}{2c}$, c'est à dire la même que celle prise en géométrie bidimensionnelle, les conditions numériques de rayonnement s'écrivent exactement :

$$\tilde{E}_z^{n+1}(i_{min}-1) = 0 \tag{2.39}$$

$$\tilde{H}_y^{n+\frac{1}{2}}(i_{max}) = \tilde{H}_y^{n-\frac{3}{2}}(i_{max}-2) \tag{2.40}$$

$$\tilde{E}_z^{n+1}(i_{max}-1) = 0 \tag{2.41}$$

L'insertion du champ incident dans l'algorithme de calcul bidimensionnel se fait de la même façon que pour l'initialisation de Mur et Taflove. Le résultat est présenté Figure 2.7 et est à comparer avec la Figure 2.6. Les fuites sur les bords de la surface de Huygens ont complètement disparu. Cette approche nous permet donc d'étudier des objets faiblement diffractants pour un coût numérique très faible. Néanmoins, elle n'est facilement utilisable

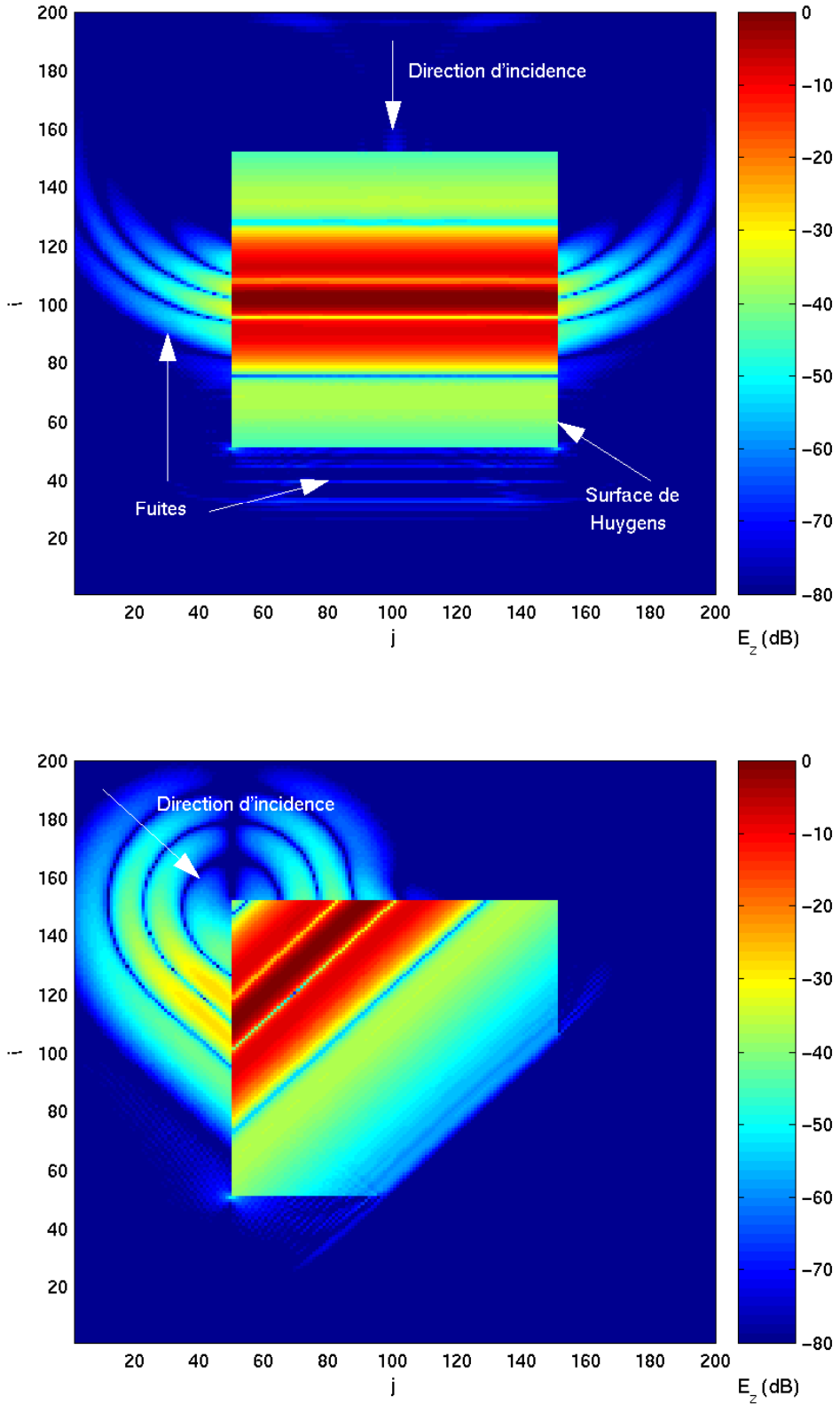


FIG. 2.6 – Effet de la dispersion numérique sur la décomposition champ total / champ diffracté pour deux incidences (0^o et 45^o) en polarisation TM pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$. Les échelles sont en mailles et l'intensité du champ E_z est représentée en dB au pas de temps considéré. La surface de Huygens est située en $i_1 = 50$, $j_1 = 50$, $i_2 = 150$ et $j_2 = 150$.

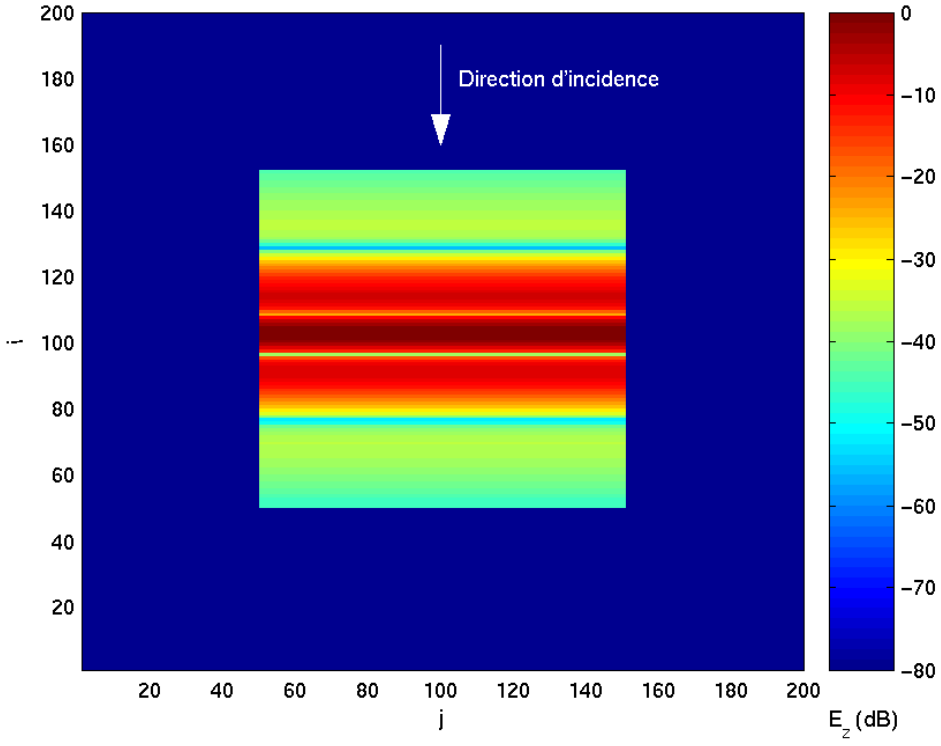


FIG. 2.7 – Découpage champ total / champ diffracté avec l'initialisation numérique en polarisation TM pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$ pour une incidence de 0^o.

qu'en incidence normale pour laquelle le maillage temporel et spatial des deux algorithmes est identique. L'incidence peut être traitée avec une interpolation des valeurs du champ obtenues grâce à l'algorithme monodimensionnel sur le maillage bidimensionnel [48, 47].

2.2.9 Calcul du champ lointain

La FDTD calcule les champs électromagnétiques localement. Or nous cherchons à déterminer le champ lointain diffracté pour obtenir la BRDF. Nous utilisons pour cela une procédure de transformation champ proche/champ lointain basée sur le principe d'équivalence [82].

La valeur des champs est collectée en fréquentiel sur un contour fermé en zone de champ diffracté. La géométrie de calcul est présentée Figure 2.8. Le point d'observation étant situé à une distance r en zone lointaine ($k\rho r \gg 1$), les potentiels vecteurs magnétiques $\vec{A}$ et électriques $\vec{F}$ s'écrivent :

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu}{4j}\int \vec{J}(\vec{r'})H_0^2(k|\vec{r}-\vec{r'}|)dL' \quad (2.42)$$

$$\vec{F}(\vec{r}) = \frac{\epsilon}{4j}\int \vec{M}(\vec{r'})H_0^2(k|\vec{r}-\vec{r'}|)dL' \quad (2.43)$$

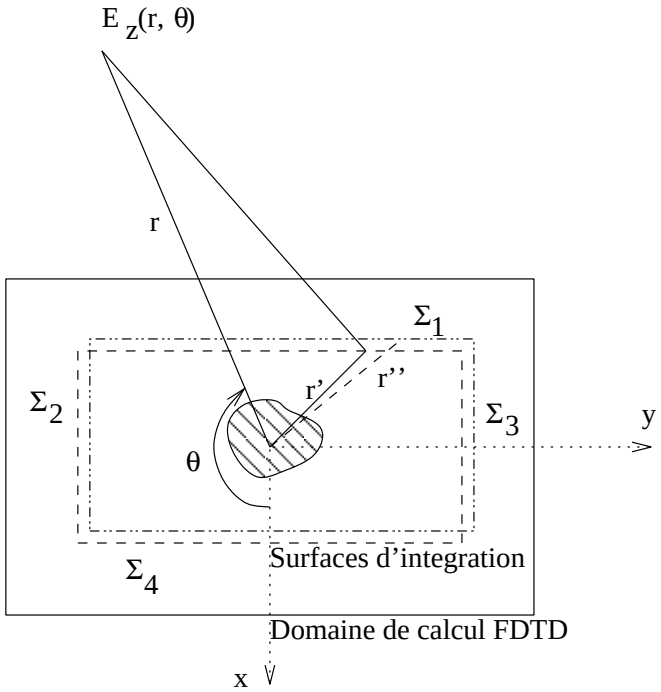


FIG. 2.8 – Géométrie utilisée pour le calcul du champ lointain

Où H_0^2 est la fonction de Hankel du deuxième ordre. Les courants électriques et magnétiques équivalents se calculent par :

$$\vec{J_s} = \vec{n} \times \vec{H} \quad (2.44)$$

$$\vec{M_s} = -\vec{n} \times \vec{E} \quad (2.45)$$

Les champs $\vec{E}$ et $\vec{H}$ ne sont pas calculés au même endroit sur le maillage de Yee. Les courants $\vec{J}$ et $\vec{M}$ sont donc calculés sur deux surfaces décalées d'un demi-pas spatial [82].

En polarisation TM, le champ $\vec{E}$ est porté par l'axe z. En champ lointain, on peut décomposer la contribution à E_z des courants électriques et magnétiques :

– La contribution du courant électrique intervient via sa composante sur l'axe z par :

$$E_z(\vec{r})|_{J_z} = -j\omega\vec{z}\cdot\vec{A}(\vec{r}) \quad (2.46)$$

où le produit scalaire est noté $\cdot$.

– La contribution du courant magnétique intervient via sa composante tangentielle à

la surface :

$$E_z(\vec{r})|_{M_t} = -\eta H_\varphi(\vec{r}) \tag{2.47}$$

avec :

$$H_\varphi(\vec{r}) = -j\omega\vec{\Phi}\cdot\vec{F}(\vec{r}) \tag{2.48}$$

Afin d'obtenir le champ rayonné total sur E_z, on somme les équations (2.46) et (2.47), et on remplace les potentiels vecteurs par leur valeur donnée dans les équations (2.42) et (2.43). On a alors :

$$\begin{aligned} E_z(\vec{r}) &= -\frac{\omega\mu}{4}\int_{L'} J_z(\vec{r}')H_0^2(k|\vec{r}-\vec{r}'|)dL' \\ &+ \frac{\eta\omega\mu}{4}\int_{L''}(\vec{\Phi}\cdot\vec{t}'')M_t(\vec{r}'')H_0^2(k|\vec{r}-\vec{r}''|)dL'' \end{aligned} \tag{2.49}$$

où L' représente le premier contour d'intégration (sur H) et L'' le second contour d'intégration (sur E), $\vec{t}$ est le vecteur tangent à la surface d'intégration. On note Σ'_T le premier contour d'intégration discrétisé et Σ''_T le second contour. Le pas de discrétisation choisi est celui de la grille FDTD Δx. Dans le cas d'un contour rectangulaire entourant l'objet, comme montré sur la Figure 2.8, on pose $\Sigma'_T = \Sigma'_1 \cup \Sigma'_2 \cup \Sigma'_3 \cup \Sigma'_4$. Avec ces notations, la direction avant est pour $\theta = 0^o$ et la direction arrière pour $\theta = 180^o$. On a alors :

$$\begin{aligned} E_z(\vec{r}) &= -\frac{\omega\mu}{4}\sum_{\Sigma'_T} J_z(\vec{r}')H_0^2(k|\vec{r}-\vec{r}'|)\Delta x \\ &+ \frac{\eta\omega\epsilon}{4}\sum_{\Sigma''_T}(\vec{\Phi}\cdot\vec{t}'')M_t(\vec{r}'')H_0^2(k|\vec{r}-\vec{r}''|)\Delta x \end{aligned} \tag{2.50}$$

En coordonnées cylindriques, on pose $\vec{r} = (r, \theta)$. Lorsque $|kr| \to \infty$, la fonction de Hankel H_0^2 tend vers :

$$H_0^2(kr) \sim \sqrt{\frac{2j}{\pi kr}}e^{-jkr} \tag{2.51}$$

En utilisant l'expression (2.51) dans l'équation (2.50), on trouve :

$$\begin{aligned} E_z(\vec{r}) &= -\frac{\omega\mu}{4}\sqrt{\frac{2j}{\pi kr}}e^{-jkr}\sum_{\Sigma'_T} J_z(\vec{r}')e^{jkr'}\Delta x \\ &+ \frac{\eta\omega\epsilon}{4}\sqrt{\frac{2j}{\pi kr}}e^{-jkr}\sum_{\Sigma''_T}(\vec{\Phi}\cdot\vec{t}'')M_t(\vec{r}'')e^{jkr''}\Delta x \end{aligned} \tag{2.52}$$

On définit $\bar{E}_z(\theta)$ par :

$$E_z(r,\theta) = \frac{e^{-jkr}}{\sqrt{r}}\bar{E}_z(\theta) \tag{2.53}$$

En coordonnées cartésiennes, on pose $\|\vec{r}\| = r = xcos(\theta) + ysin(\theta)$. On a alors pour la polarisation TM :

$$\begin{aligned} \bar{E}_z(\theta) &= -\frac{\omega\mu}{4}\sqrt{\frac{2j}{\pi k}}\left(\sum_{\Sigma'_1}(-H_y(r'))e^{jkr'}\Delta x + \sum_{\Sigma'_2}(H_x(r'))e^{jkr'}\Delta x\right. \\ &+ \left.\sum_{\Sigma'_3}(-H_x(r'))e^{jkr'}\Delta x + \sum_{\Sigma'_4}(H_y(r'))e^{jkr'}\Delta x\right) \\ &+ \frac{\eta\omega\epsilon}{4}\sqrt{\frac{2j}{\pi k}}\left(-cos(\theta)\sum_{\Sigma''_1}E_z(r'')e^{jkr''}\Delta x - sin(\theta)\sum_{\Sigma''_2}E_z(r'')e^{jkr''}\Delta x\right. \\ &+ \left.sin(\theta)\sum_{\Sigma''_3}E_z(r'')e^{jkr''}\Delta x + cos(\theta)\sum_{\Sigma''_4}E_z(r'')e^{jkr''}\Delta x\right) \end{aligned} \tag{2.54}$$

On montre de même que le champs lointain rayonné porté sur H_z en polarisation TE est :

$$\begin{aligned} \bar{H}_z(\theta) &= \frac{\omega\epsilon}{4}\sqrt{\frac{2j}{\pi k}}\left(\sum_{\Sigma'_1}(-E_y(r'))e^{jkr'}\Delta x + \sum_{\Sigma'_2}(E_x(r'))e^{jkr'}\Delta x\right. \\ &+ \left.\sum_{\Sigma'_3}(-E_x(r'))e^{jkr'}\Delta x + \sum_{\Sigma'_4}(E_y(r'))e^{jkr'}\Delta x\right) \\ &- \frac{\omega\mu}{4\eta}\sqrt{\frac{2j}{\pi k}}\left(-cos(\theta)\sum_{\Sigma''_1}H_z(r'')e^{jkr''}\Delta x - sin(\theta)\sum_{\Sigma''_2}H_z(r'')e^{jkr''}\Delta x\right. \\ &+ \left.sin(\theta)\sum_{\Sigma''_3}H_z(r'')e^{jkr''}\Delta x + cos(\theta)\sum_{\Sigma''_4}H_z(r'')e^{jkr''}\Delta x\right) \end{aligned} \tag{2.55}$$

2.2.10 Obtention des champs dans le domaine fréquentiel

Les champs calculés dans l'algorithme FDTD sont les champs proches réels obtenus à tous les pas de temps. Nous cherchons à pouvoir calculer la valeur des champs à certaines fréquences afin de déterminer le comportement du matériau en régime monochromatique. Ce calcul est de plus nécessaire pour la transformation champ proche / champ lointain. Nous utilisons pour cela la réponse temporelle diffusée par l'élément étudié. Nous pouvons accéder aux fréquences présentes dans l'impulsion incidente. Pour calculer la réponse spectrale, nous avons plusieurs possibilités :

- La première solution est d'enregistrer à tous les pas de temps les champs aux points du maillage d'intérêt. Les champs fréquentiels sont ensuite obtenus par une transformation de Fourier rapide (FFT). Cette méthode permet de remonter à l'ensemble du spectre mais la place mémoire requise est très importante (nombre de points x nombre de pas de temps x 3 champs).
- La seconde solution est de revenir à la définition de la transformation de Fourier et d'effectuer une transformée de Fourier discrète. En effet la transformée de Fourier d'une fonction F est :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt \tag{2.56}$$

Si on applique cette formule à un champ E et un pas de discrétisation temporel Δt pour N pas de temps (E est nul pour les $t < 0$ et supposé nul ou à valeur moyenne nulle pour $t > N\Delta t$) :

$$E(\omega) = \sum_{n<N} E(n\Delta t) e^{-j\omega n\Delta t} \Delta t \tag{2.57}$$

Cette formule permet de calculer la transformée de Fourier des champs pour un ensemble fini de fréquences. Ce calcul peut s'effectuer en même temps que le calcul FDTD et ne requiert donc qu'une place mémoire minime (le nombre de points x 3 champs). De plus, les calculs ne sont effectués qu'aux fréquences d'intérêt. Cette méthode est en général plus rapide et consomme nettement moins de mémoire que la première. C'est donc celle-ci que nous avons choisi d'intégrer dans notre code de calcul.

2.3 Étude et validation du calcul électromagnétique

Afin de tester les résultats de notre algorithme et pour déterminer les paramètres de calcul qu'il nous faudra utiliser dans la suite (comme le pas de discrétisation), nous avons comparé les résultats obtenus pour le calcul du champ lointain sur un cas canonique : la diffusion par des cylindres homogènes. Ces comparaisons ont lieu pour des différences d'indice faibles ou importantes et pour diverses tailles de particule. Le rayon de la particule est noté r et son indice n. La direction avant est pour $\theta = 0^o$ et la direction arrière pour

$\theta = 180^o$. Le calcul de la diffusion est complexe [57] puisque les surfaces à traiter sont courbes, représentées par des marches d'escalier et que les dimensions de l'objet sont dans le domaine résonant. On trouve de nombreuses applications de la FDTD pour le calcul de la diffusion par des particules de formes complexes [133, 32, 122, 31, 120].

Tous les essais effectués ne sont pas présentés dans ce manuscrit. Nous avons retenu ici deux tailles de particules représentatives des cas rencontrés dans le domaine optique et dans les études que nous ferons dans la suite. Nous présenterons tout d'abord l'influence du pas de discrétisation sur des "grosses" particules de rayon $r = 2\lambda_0$. Nous poursuivrons par l'étude de "petites" particules, de l'ordre du pas de discrétisation et nous nous intéresserons notamment à leur représentation.

2.3.1 Particule de rayon $r = 2\lambda_0$ et d'indice $n = 1.6$

Pour ce premier cas, nous allons étudier une particule fortement résonnante. Nous cherchons à vérifier si notre algorithme permet de suivre les variations de l'intensité diffusée sur tout le domaine angulaire. En effet, la diffusion ici est complexe et suffisamment forte pour masquer les bruits numériques.

Les champs proches en TE et en TM sont représentés Figure 2.9. La particule est située au centre du domaine de calcul et ses limites sont matérialisées par un fin trait blanc. Cette figure permet d'observer la structure complexe du champ rayonné. La séparation entre les zones de champ total et de champ diffracté est située entre les points d'indice 100 et 300 dans les deux directions du maillage. La décroissance du champ dans les conditions absorbantes est visible sur les bords du domaine de calcul (dans les 30 dernières mailles).

Les particules de cette taille présentent de nombreuses réflexions internes. Le calcul numérique par FDTD de leur diagramme de diffusion est donc complexe. Un capteur positionné dans la direction de rétro-diffusion relevant les valeurs du champ électrique en fonction du temps permet d'observer les battements de l'onde dans la particule (Figure 2.10).

Nous allons comparer les résultats en champ lointain avec la matrice de diffusion $S(\theta)$ [70, 33] (c.f Annexe A). Tout d'abord, la Figure 2.11 présente les résultats obtenus pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$. Le diagramme obtenu par FDTD présente des erreurs significatives par rapport au résultat analytique. Cette différence est très importante en polarisation TE notamment dans la direction de rétro-diffusion où elle atteint plus de 5 dB.

Le raffinement du pas de maillage permet d'obtenir une précision correcte avec l'algorithme FDTD, comme on peut le voir sur la Figure 2.12 avec un pas de discrétisation de $\lambda_0/40$. Ces résultats confirment la nécessité d'effectuer le calcul avec de bons paramètres pour traiter numériquement des particules de cette taille. De plus, les nombreux battements à l'intérieur de la particule augmentent les erreurs dues à la représentation de sa

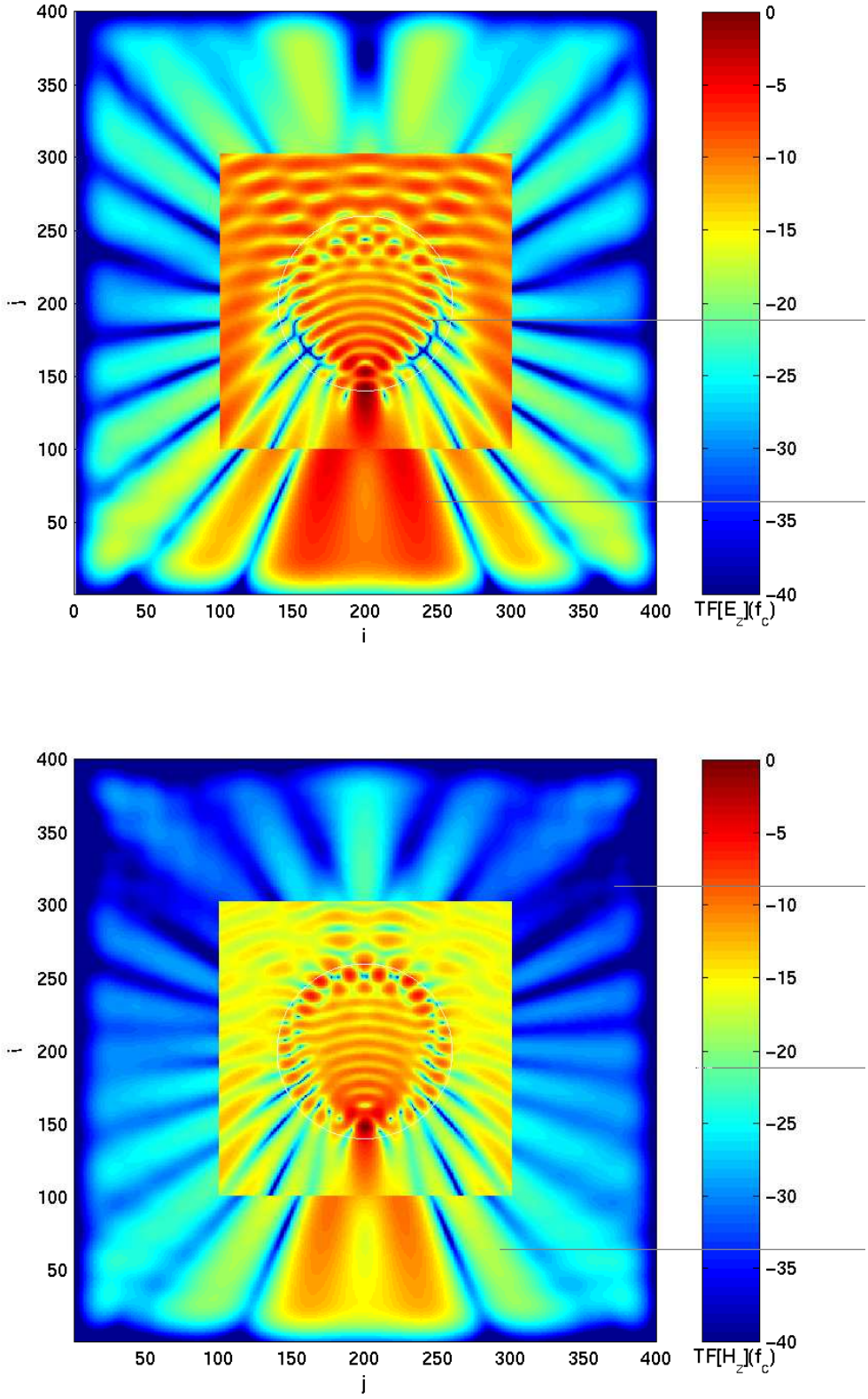


FIG. 2.9 – Champ proche diffusé par un cylindre de rayon $r = 2\lambda_0$ et d'indice $n = 1.6$ pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$ en polarisation TM (en haut) et TE (en bas) pour une incidence de 0^o.

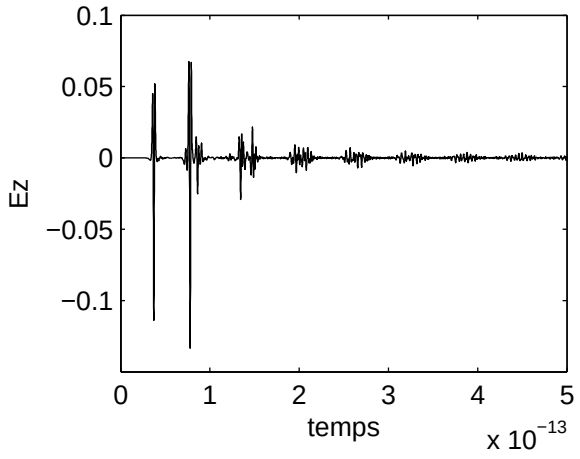


FIG. 2.10 – Évolution du champs E_z diffus dans la direction de rétro-diffusion en polarisation TM

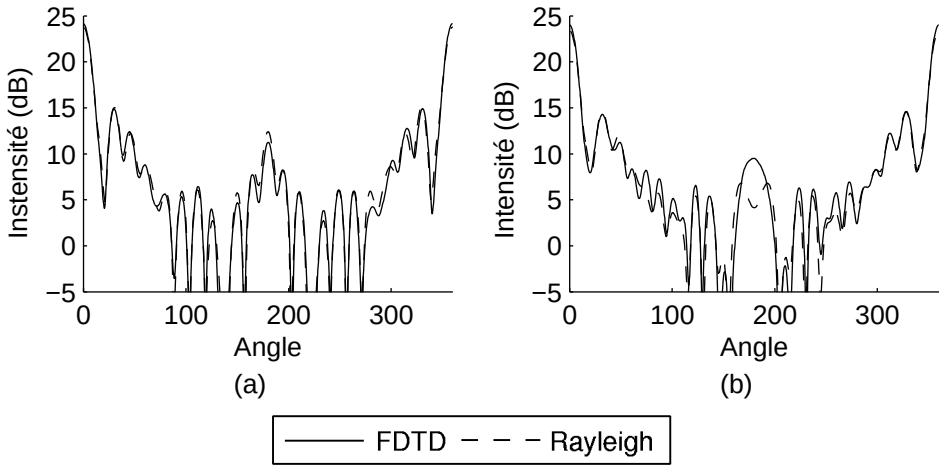


FIG. 2.11 – Comparaison entre $|S(\theta)|$ et le résultat du calcul FDTD pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$ en polarisation TM (gauche) et TE (droite) pour des particules de rayon $2\lambda_0$.

surface et l'effet de la dispersion numérique dû à l'allongement du trajet parcouru.

L'algorithme FDTD développé nous permet de calculer la phase à une constante près due à la phase initiale de l'onde incidente (Figure 2.13). L'origine des phases est prise à 0 dans la direction de propagation avant. Pour cette particule, nous arrivons parfaitement à calculer avec notre algorithme la phase diffusée.

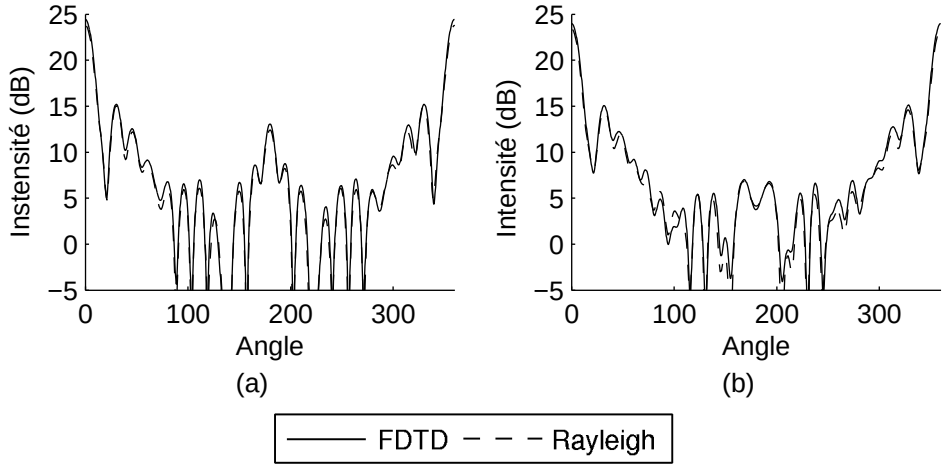


FIG. 2.12 – Comparaison entre $|S(\theta)|$ (traits pointillés) et le résultat du calcul FDTD (trait plein) pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/40$ en polarisation TM (gauche) et TE (droite) pour des particules de rayon $2\lambda_0$.

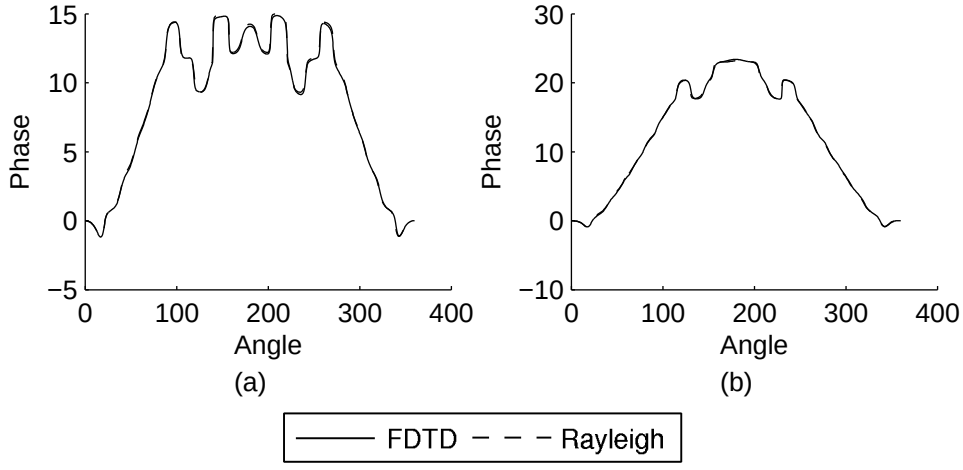


FIG. 2.13 – Comparaison entre la phase de $S(\theta)$ et le résultat du calcul FDTD pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/40$ en polarisation TM (gauche) et TE (droite) pour des particules de rayon $2\lambda_0$. La phase est exprimée en radians.

Nous avons donc pu remonter à la diffusion complète en champ lointain (intensité et phase) à partir des résultats FDTD. En résumé, afin de pouvoir représenter correctement la diffusion par la particule nous devons discrétiser le domaine de calcul avec un pas d'environ $\lambda/25$ où λ est la longueur d'onde dans le milieu d'indice $n = 1.6$ (la particule).

2.3.2 Particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n = 1.02$, $n = 1.6$ et $n = 4$

Ce sont les plus petites particules que nous traiterons. Le rayon est égal à la taille d'une maille du domaine de calcul. Elles sont donc représentées par des petits carrés pour la FDTD. Pour obtenir des résultats équivalents à ceux d'un cylindre, nous utiliserons un rayon effectif permettant d'avoir des particules de même surface. Le rayon r_{eff} effectif du cylindre équivalent est, en appelant r le demi coté du carré représentant une particule :

$$\pi r_{eff}^2 = (2r)^2 \tag{2.58}$$

soit :

$$r_{eff} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} r \tag{2.59}$$

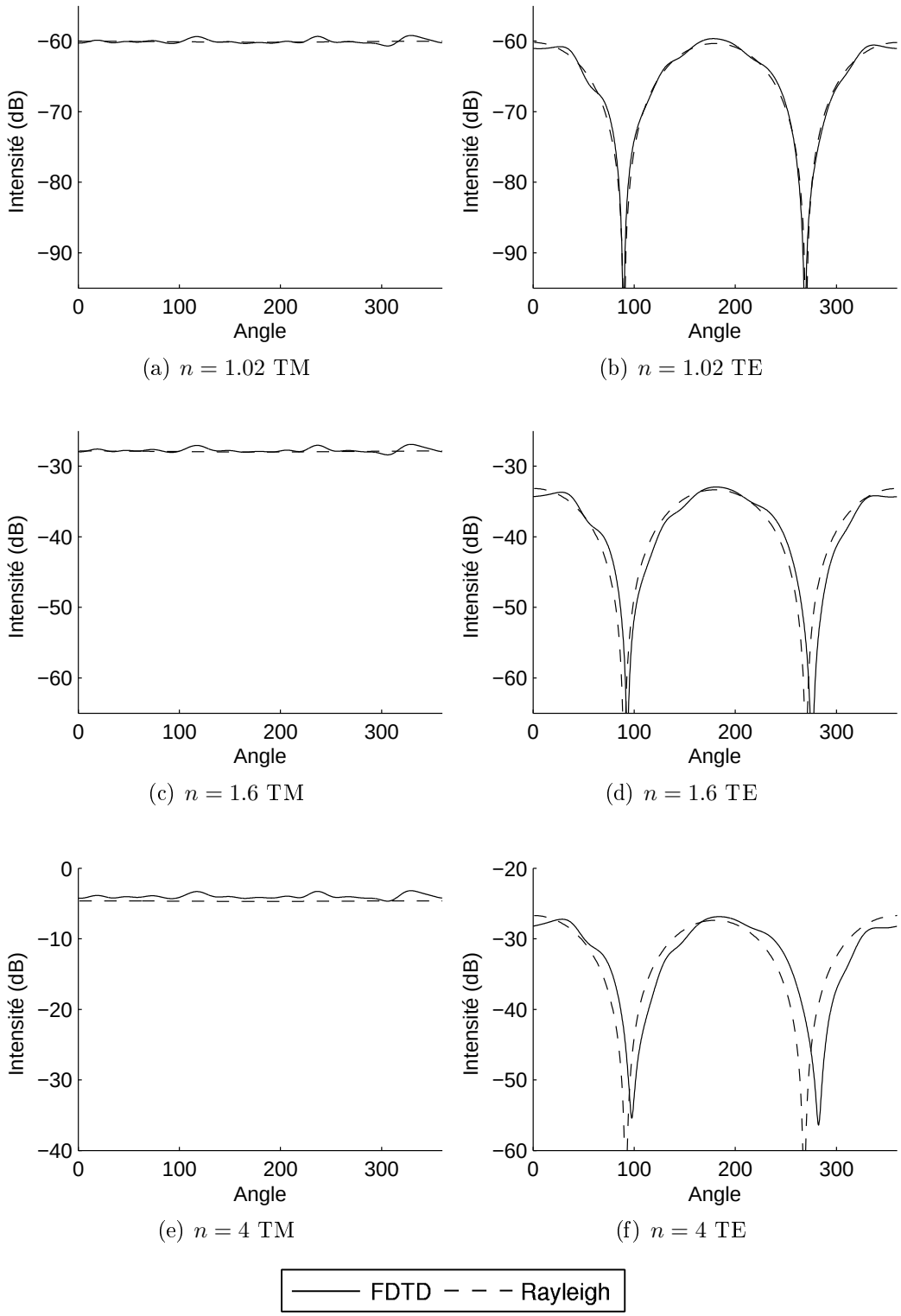
Les calculs analytiques sont effectués avec un rayon effectif $r_{eff} = \lambda_0/35.4$. Les résultats sont présentés sur la Figure 2.14 pour les mêmes indices que précédemment et pour le même pas de discrétisation.

Pour cette taille de particule, le diagramme de diffusion est particulièrement simple : la polarisation TM présente un comportement isotrope tandis que la polarisation TE présente deux lobes. Cette situation est uniquement due à la géométrie bidimensionnelle du problème. Comme précédemment, en polarisation TM, la différence entre les résultats FDTD et le modèle analytique est faible ($<$ 1dB). Le comportement isotrope est bien représenté et le niveau de diffusion est bon pour tous les cas considérés. On remarque que pour les particules d'indice très faible ($n = 1.02$), le niveau de diffusion est lui aussi très faible (-60dB) et le résultat FDTD reste correct. La pertinence de l'initialisation numérique est ainsi confirmée. La polarisation TE représente correctement la diffusion par la particule dans les cas d'indice $n = 1.02$ et $n = 1.6$. Pour le cas $n = 4$, un décalage angulaire apparaît, sans doute dû à la forme carrée de la particule et à la mauvaise représentation de la permittivité ϵ dans cette polarisation. Néanmoins la précision des résultats reste acceptable (inférieure à 1.5 dB). En effet, pour avoir des résultats plus précis, il faudrait mailler à $\lambda/25$ soit $\lambda_0/100$.

2.3.3 Deux particules de rayon $r = \lambda_0/2$ et d'indice $n = 2.25$ en polarisation TM

Nous avons commencé par étudier dans cette partie des paramètres de calcul FDTD pour l'étude d'objet en espace libre. Nous pouvons maintenant appliquer cette méthode pour l'étude de la diffusion par des objets complexes ou des agrégats.

Pour cette étude, nous utilisons deux particules donnant un diagramme de diffusion



(a) $n = 1.02$ TM (b) $n = 1.02$ TE

(c) $n = 1.6$ TM (d) $n = 1.6$ TE

(e) $n = 4$ TM (f) $n = 4$ TE

FIG. 2.14 – Comparaison entre $|S(\theta)|$ et le résultat du calcul FDTD pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/40$ en polarisation TM (gauche) et TE (droite) pour des particules de rayon $\lambda_0/40$.

non trivial ($r = \lambda_0/2$) avec un indice $n = 2.25$. La polarisation de l'onde incidente est TM. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/40$. Les deux particules sont positionnées dans le domaine de calcul à des distances inter-centres d croissantes ($d = 1\lambda_0$, $d = 2\lambda_0$, $d = 4\lambda_0$ et $d = 16\lambda_0$). Les résultats du calcul FDTD en champ lointain seront comparés avec le modèle de Rayleigh en négligeant leurs interactions. La FDTD est alors prise comme méthode de référence pour valider une hypothèse simplificatrice de couplage entre les particules.

Le résultat est donné sur la Figure 2.15 en champ proche et en champ lointain pour une distance inter-centres $d = 1\lambda_0$ (les particules se touchent).

Le modèle de diffusion indépendante est dans ce cas inefficace. Il ne permet pas de retrouver le comportement en champ lointain de la diffusion par l'ensemble des deux particules. Ainsi, l'agrégat doit être traité comme un ensemble de manière rigoureuse.

Sur la Figure 2.16, la distance entre les deux particules est progressivement augmentée. Ainsi, l'hypothèse négligeant l'interaction entre les particules est de plus en plus valide. Pour une distance entre les particules de $d = 2\lambda_0$, on observe encore une légère différence entre le résultat FDTD et le résultat analytique avec un léger décalage angulaire. Néanmoins négliger l'interaction entre les deux particules permet d'obtenir une bonne approximation de la diffusion par l'ensemble. Pour une distance centre à centre $d = 4\lambda_0$, les deux approches donnent pratiquement le même résultat. L'hypothèse négligeant l'interaction entre les particules est ici vérifiée.

Ce comportement se retrouve sur la Figure 2.17 où les particules sont situées à une distance inter-centre de $16\lambda_0$. Dans ce cas, tout le diagramme est précisément représenté en négligeant l'interaction entre les particules.

2.3.4 Conclusion

Nous avons présenté une application de la FDTD pour l'étude de la diffusion par des particules en espace libre représentative des particules qui seront immergées dans le milieu semi-infini par la suite. Nous avons pu vérifier la précision de notre implémentation de la FDTD dans les deux polarisations en comparant le résultat en champ lointain avec un modèle analytique exact. Nous avons pu déterminer que lorsque les dimensions sont de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde, un pas de maillage de $\lambda_0/25n$ est nécessaire (où n est l'indice dans le milieu de plus fort indice). Finalement, nous avons appliqué notre méthode pour montrer son utilisation en tant que méthode de référence pour la détermination de la validité de l'hypothèse négligeant l'interaction entre particules.

Cet algorithme peut donc être utilisé pour déterminer la matrice de diffusion complète d'une particule de forme complexe ou d'un agrégat de particules ainsi que pour valider des approximations comme celle de la diffusion indépendante.

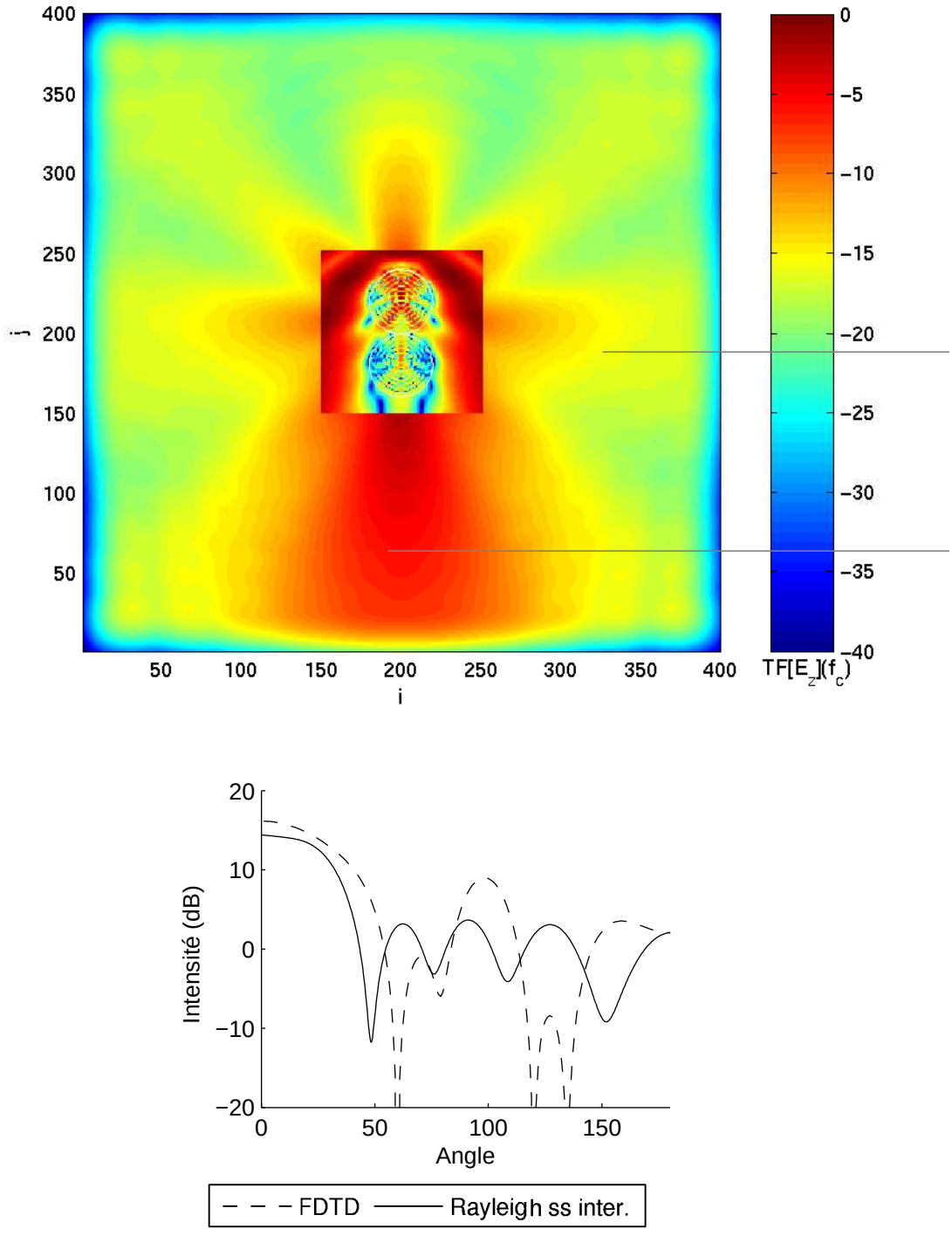
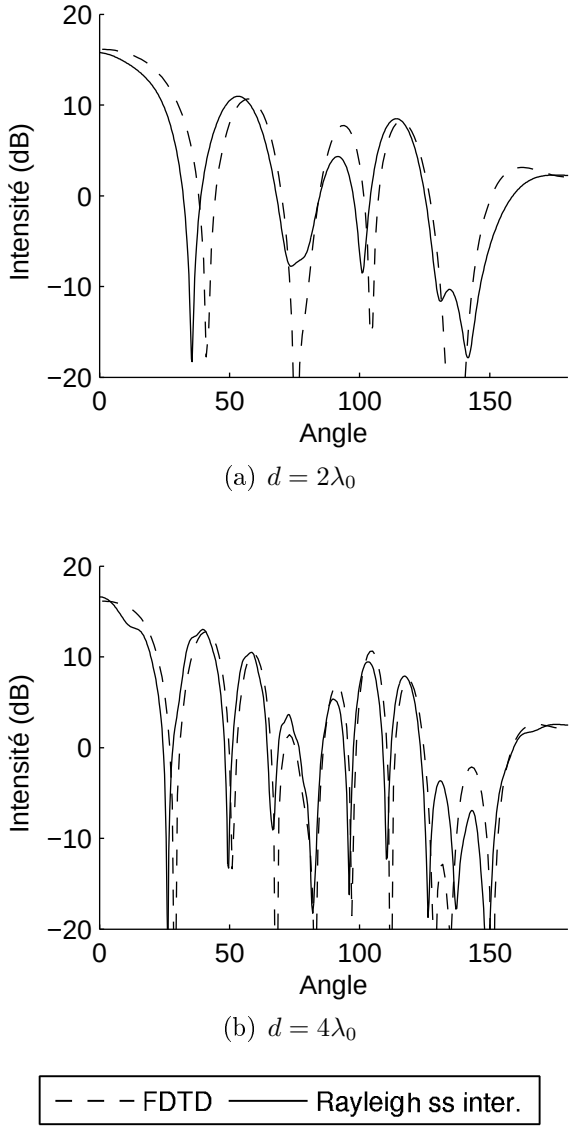


FIG. 2.15 – Champ proche (Figure du haut) et champ lointain (Figure du bas) diffusé par deux particules collées ($d = 1\lambda_0$)



(a) $d = 2\lambda_0$

(b) $d = 4\lambda_0$

FIG. 2.16 – Champ lointain diffusé par deux particules séparées d'une distance inter-centre $d = 2\lambda_0$ et $d = 4\lambda_0$

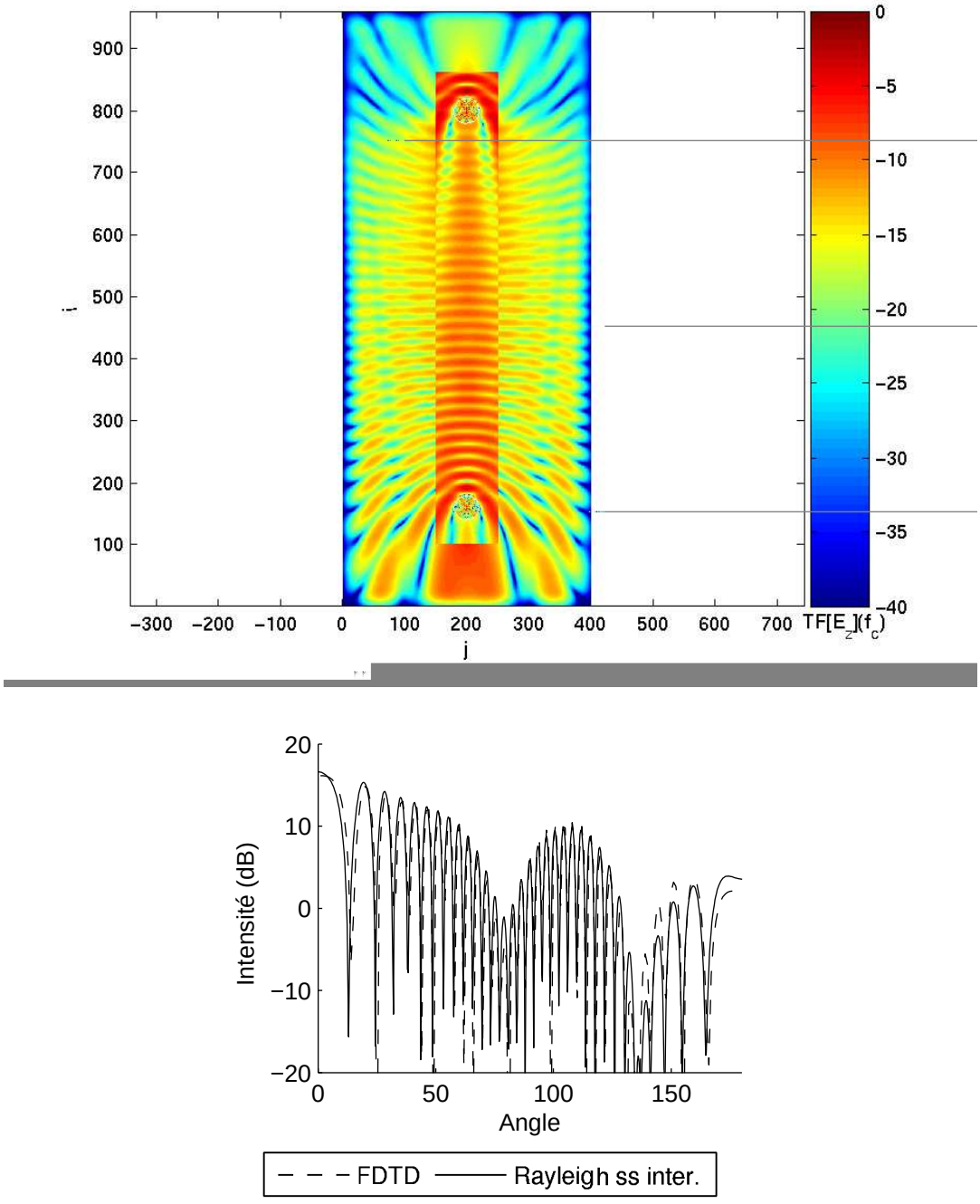


FIG. 2.17 – Champ proche (Figure du haut) et champ lointain (Figure du bas) pour deux particules situées à une distance $d = 16\lambda_0$

2.4 Milieu semi-infini

Dans le cas d'un milieu semi-infini, on ne peut pas en général utiliser la technique de la section 2.2.8.3 pour l'insertion du champ incident car le domaine de calcul est coupé en deux. C'est la principale difficulté pour traiter ce type de problème. Bachelier [3] a montré que le fait de tronquer la surface de Huygens utilisée pour le découpage champ total/champ diffracté conduisait à un certain nombre d'artefacts. Elle a proposé un calcul en deux étapes inspiré de l'initialisation numérique vue dans la section 2.2.8.4. Par ailleurs, Hastings [51, 50] et Fung [40] proposent l'utilisation d'un faisceau gaussien pour éclairer le milieu. Nous nous sommes inspirés de ces divers travaux pour proposer une nouvelle méthode qui permet de garder l'absence de fuites de la méthode en deux étapes sans en avoir la complexité de stockage avec la simplicité des deux dernières approches.

2.4.1 Onde incidente

2.4.1.1 Onde plane

La première idée que l'on peut avoir en voulant traiter le cas de matériaux semi-infinis est d'appliquer la méthode présentée précédemment pour des objets en espace libre. Comme il n'est pas aisé d'entourer un objet semi-infini par une surface de Huygens, on peut couper la surface de Huygens au dessus de la surface étudiée. Cette approche n'entraîne que peu de modifications sur l'algorithme précédent (suppression de la partie inférieure de la surface de Huygens).

Néanmoins, le rayonnement des extrémités au niveau de la coupure de la surface de Huygens est trop important dans le cadre de notre étude. Ce problème est bien visible sur la Figure 2.18 où l'on peut voir des interférences de forte amplitude entre le champ incident et le champ rayonné par la troncature. La structure d'onde plane de l'onde incidente est rapidement perdue et on observe des variations importantes de l'intensité à la fréquence étudiée.

Cette solution est donc à éviter pour notre étude. L'utilisation d'une onde plane pour éclairer un milieu semi-infini ne peut donc rigoureusement se faire qu'en utilisant l'approche de Demarest [26, 25]. Son application pour l'étude d'un milieu hétérogène reste à faire. Lorsque l'utilisation d'une onde plane n'est pas nécessaire, la seconde solution [3, 63, 51, 50] est d'avoir un champ incident nul au niveau de la troncature de la surface de Huygens. Cette approche utilise une fonction fenêtre de forme connue. Dans notre cas, il s'agit d'un faisceau gaussien.

2.4.1.2 Faisceau gaussien

Implémentation du faisceau gaussien Nous devons tout d'abord exprimer analytiquement le faisceau gaussien dans tout le domaine de calcul. Ainsi, nous pourrons calculer

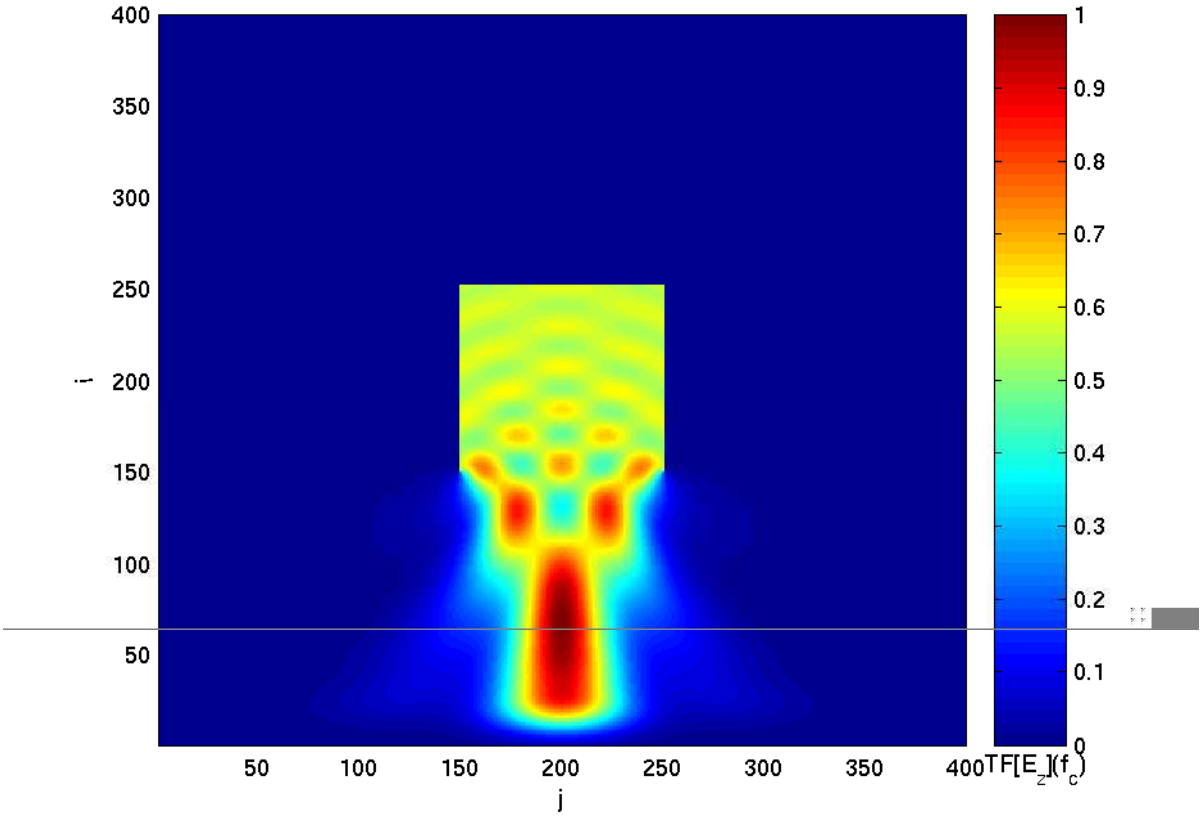


FIG. 2.18 – Initialisation par onde plane pour une surface de Huygens tronquée - la partie inférieure de la surface de Huygens a été enlevée

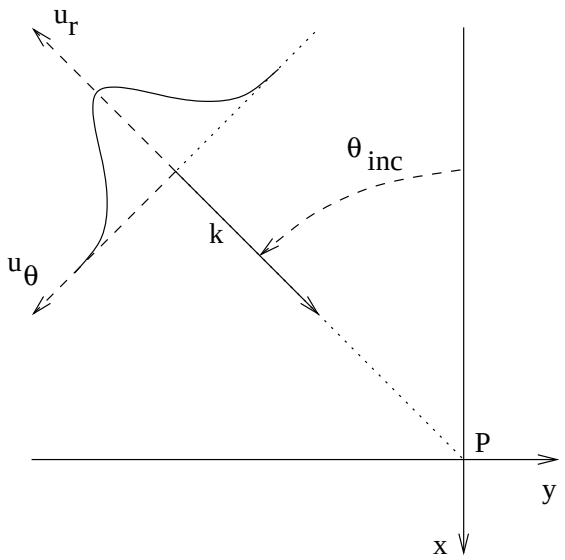


FIG. 2.19 – Géométrie pour le calcul du faisceau gaussien

sa forme en tout point de l'espace et plus particulièrement pour déterminer la fonction fenêtre nécessaire à l'introduction du champ incident. Pour ce faire nous allons exprimer le faisceau gaussien comme une somme d'ondes planes.

La géométrie de calcul du faisceau gaussien est présentée Figure 2.19. Afin de simplifier le calcul, une base $(P, \vec{u}_r, \vec{u}_\theta)$ pivotée d'un angle θ_{inc} est utilisée. Un point de coordonnées (x, y) de la base $(P, \vec{x}, \vec{y})$, aura donc pour coordonnées dans la base $(P, \vec{u}_r, \vec{u}_\theta)$:

$$\begin{pmatrix} x_r \\ x_\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -cos(\theta_{inc}) & sin(\theta_{inc}) \\ -sin(\theta_{inc}) & -cos(\theta_{inc}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{2.60}$$

Pour un point de coordonnées (x_r, x_θ) dans la base $(P, \vec{u}_r, \vec{u}_\theta)$, la somme des ondes planes composant le champ incident s'écrit :

$$F(x_r, x_\theta) = \int \psi(k_\theta) exp(-ik_r x_r) exp(-ik_\theta x_\theta) \tag{2.61}$$

avec :

$$k^2 = k_r^2 + k_\theta^2 \tag{2.62}$$

Dans le cas d'un faisceau gaussien d'écart type σ_θ, les coefficients $\psi(x_\theta)$ sont de la forme :

$$\psi(x_\theta) = exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_\theta}{\sigma_\theta}\right)^2\right\} \tag{2.63}$$

Une transformation de Fourier nous permet de calculer $\psi(k_\theta)$:

$$\psi(k_\theta) = \frac{\sigma_\theta}{2\pi} exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{k_\theta}{\sigma_{k_\theta}}\right)^2\right\} \tag{2.64}$$

où :

$$\sigma_{k_\theta} = \frac{1}{\sigma_\theta} \tag{2.65}$$

Il s'agit de prendre suffisamment d'ondes planes, typiquement une dizaine de valeurs pour k_θ, afin de représenter le faisceau. Pour un faisceau gaussien, les valeurs représentatives de k_θ sont dans l'intervalle :

$$k_\theta \in [-2\sigma_{k_\theta}, 2\sigma_{k_\theta}] \tag{2.66}$$

Afin de remonter à la forme du faisceau gaussien, on effectue une moyenne des intensités du faisceau sur les points d'intérêt pour un déphasage à l'origine de l'onde incidente compris entre 0 et 2π . La fonction fenêtre résultante est appliquée sur la partie supérieure de la surface de Huygens. Cette forme nous permet de faire tendre la valeur des champs sur les bords vers 0 et de limiter ainsi leur rayonnement.

Validation de l'approche faisceau gaussien La Figure 2.20 et la Figure 2.21 représentent la propagation dans le domaine de calcul du faisceau gaussien pour deux angles d'incidences (0^o et 30^o). La surface de Huygens est positionnée en $i = 300$.

Nous pouvons tout d'abord observer que le rayonnement introduit par la troncature de la surface de Huygens est supprimé. En effet, comme nous l'avons vu dans la section 2.4.1.1, ce phénomène se traduit par la présence d'ondes sphériques au niveau des extrémités. Elles ne sont pas visibles sur les deux figures présentées.

Ensuite, nous pouvons vérifier que les fuites introduites par l'insertion du champ incident sur la surface de Huygens sont très faibles. Elles ne sont ni visibles en incidence normale, ni pour une incidence de 30^o. Nous prenons donc exactement en compte la déformation du faisceau gaussien induite par l'incidence grâce à notre approche.

Finalement, nous pouvons étudier le comportement des conditions absorbantes. Pour une incidence normale, elles se comportent parfaitement et absorbent le champ incident sans réflexions. Lorsque le faisceau gaussien arrive avec une incidence de 30^o, elles ne sont plus adaptées. Ainsi, on observe des réflexions parasites sur les bords du domaine de calcul. Ce phénomène peut altérer la précision des résultats pour les calculs en incidence. Dans toutes les séries de calculs, nous avons donc vérifié que les bruits introduits étaient négligeables par rapport aux niveaux de diffusion mesurés. Nous verrons de plus que les effets parasites seront amoindris par le processus de Monte Carlo. En effet, ils sont en général cohérents et ils influeront peu sur le diagramme incohérent.

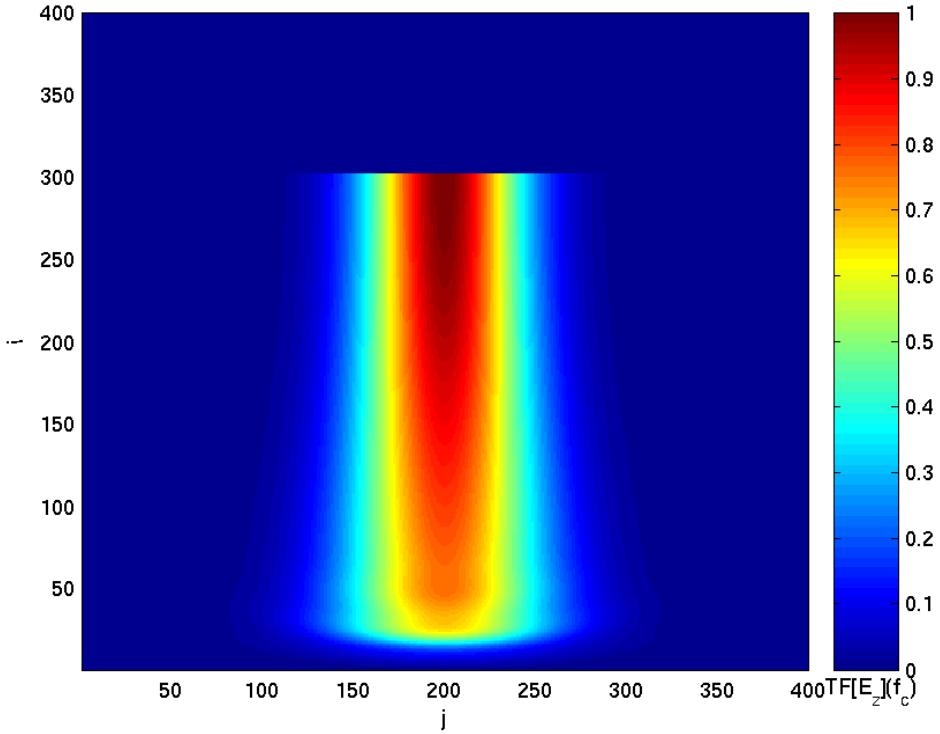


FIG. 2.20 – Propagation en espace libre du faisceau gaussien pour une incidence de 0^o et un pas de maillage de $\lambda_0/30$

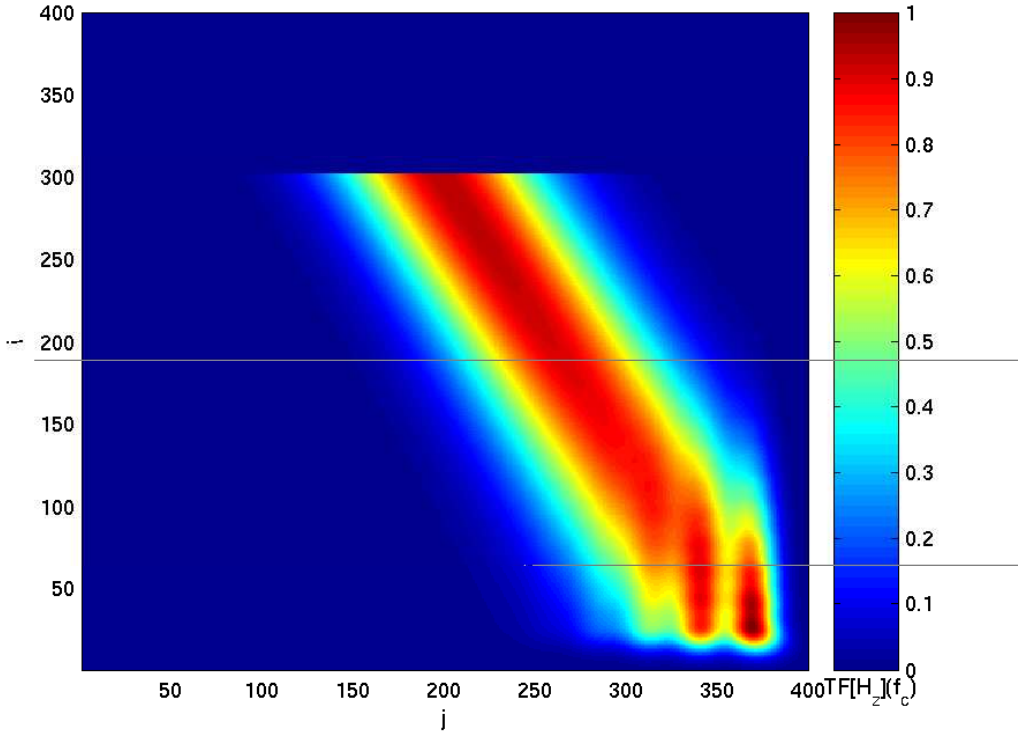


FIG. 2.21 – Propagation en espace libre du faisceau gaussien pour une incidence de 30^o et un pas de maillage de $\lambda_0/30$

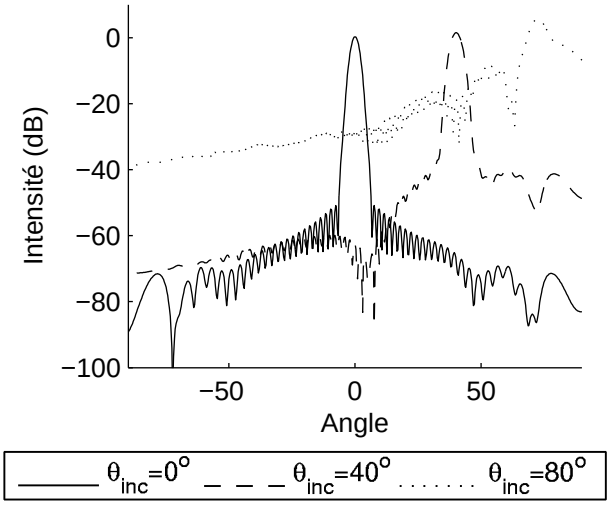


FIG. 2.22 – Champ lointain diffusé par un plan d'indice $n = 1.6$ pour un domaine de calcul de $30\lambda_0$ de large et un pas de maillage de $\lambda_0/30$ en polarisation TM

Validation du champ lointain De la même façon que l'insertion du champ incident ne se fait que sur la surface supérieure de la surface de Huygens, le calcul du champ rayonné n'utilise que la partie supérieure de la surface d'intégration. Cette troncature ne nous permettra donc pas de représenter correctement le champ lointain pour les forts angles de diffusion. Cet effet s'ajoute aux réflexions sur les conditions absorbantes. La Figure 2.22 présente le champ lointain diffusé par un plan éclairé par un faisceau gaussien. On observe que les résultats sont corrects pour une incidence de 0 et de 40^o (le bruit est de -40 dB à 40^o et -60 dB en incidence normale). Pour un angle d'incidence de 80^o, le faisceau gaussien est noyé dans le bruit numérique et les résultats ne sont plus exploitables.

Nous pouvons vérifier la précision de notre algorithme en calculant dans les deux polarisations les coefficients de réflexion en énergie. Les résultats sont comparés avec le résultat analytique pour la réflexion par un milieu semi-infini plan éclairé par une onde plane. Ainsi les deux coefficients ne pourront pas être parfaitement identiques puisque nous éclairons le milieu avec un faisceau gaussien dans notre algorithme FDTD. Pour une onde plane, en appelant α l'angle d'incidence et β l'angle de transmission, le coefficient de réflexion en énergie en polarisation TE s'écrit :

$$R_{TE} = \left(\frac{tan(\alpha - \beta)}{tan(\alpha + \beta)} \right)^2 \tag{2.67}$$

et en polarisation TM :

$$R_{TM} = \left(\frac{sin(\alpha - \beta)}{sin(\alpha + \beta)} \right)^2 \tag{2.68}$$

Les résultats du calcul du champ lointain FDTD sont normalisés par rapport à l'énergie du faisceau incident. En appelant F_z le champ E_z ou H_z suivant la polarisation, on calcule

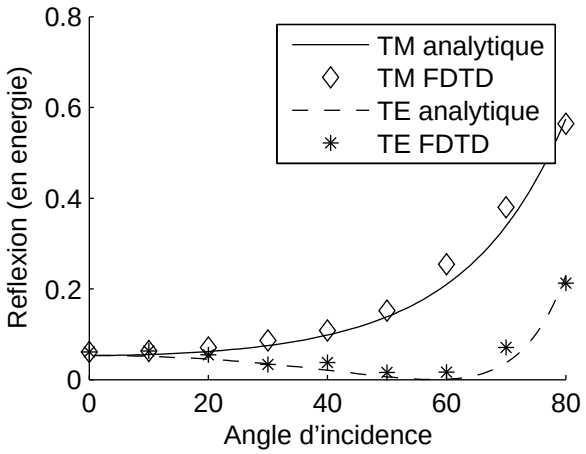


FIG. 2.23 – Coefficients de réflexion en énergie pour un plan d'indice $n = 1.6$ pour les deux polarisations et pour différents angles d'incidence

ici :

$$R_{FDTD} = \frac{\int |F_z^r|^2 d\theta}{\int |F_z^{inc}|^2 d\theta} \tag{2.69}$$

Le résultat est présenté Figure 2.23. On observe que l'on retrouve bien les coefficients de réflexion pour les deux polarisations pour tous les angles d'indices. Notamment, il est toujours bien déterminé pour des incidences fortes ($> 60^o$) où les bruits parasites sont forts.

Représentation des diagrammes de diffusion Nous présenterons, dans la suite de cette thèse, les diagrammes de diffusion pour un angle d'incidence θ_i et un angle de diffusion θ_r comme :

$$I(\theta_i, \theta_r) = \frac{|F_z^r(\theta_r)|^2}{\int |F_z^{inc}(\theta)|^2 d\theta} \tag{2.70}$$

ou encore en décibels :

$$I^{dB}(\theta_i, \theta_r) = 10 log_{10} \left(\frac{|F_z^r(\theta_r)|^2}{\int |F_z^{inc}(\theta)|^2 d\theta} \right) \tag{2.71}$$

Un tel choix est dicté par l'usage en électromagnétisme. En effet, nous pouvons retrouver les facteurs de réflexions en énergie par l'intégration simple du diagramme. En fait, la communauté optique utilise comme grandeur d'intérêt la BRDF. Nous verrons dans la prochaine partie de ce chapitre comment passer de cette grandeur à la BRDF.

2.5 Calcul de la BRDF

2.5.1 Expression de la BRDF

Comme nous l'avons vu dans ce chapitre, notre méthode nous permet de calculer la diffusion par un matériau hétérogène rugueux. Nous devons calculer la BRDF à partir du calcul du champ lointain défini dans les équations (2.54) et (2.55). On utilise pour cela le vecteur de Poynting, dont le module s'écrit pour une onde plane en polarisation TM :

$$|\Pi(\theta)| = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}|E_z(\theta, r)|^2 \tag{2.72}$$

En utilisant l'équation (2.54), il vient :

$$\begin{aligned} |\Pi(\theta)| &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}\left|\frac{e^{-jkr}}{\sqrt{r}}\bar{E}_z(\theta)\right|^2 & (2.73)\\ &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}\frac{1}{r}|\bar{E}_z(\theta)|^2 & (2.74) \end{aligned}$$

Nous considérons un angle solide $d\theta$ situé à une distance r. Le flux du vecteur de Poynting est alors :

$$\begin{aligned} \Phi(\Pi(\theta)) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}\frac{1}{r}|\bar{E}_z(\theta)|^2 r d\theta & (2.75)\\ &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}|\bar{E}_z(\theta)|^2 d\theta & (2.76) \end{aligned}$$

Le calcul du champ lointain a été fait pour un profil de longueur élémentaire dl, donc à partir de l'équation (1.3) on trouve :

$$L(\theta)cos(\theta)dld\theta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}|\bar{E}_z(\theta)|^2 d\theta \tag{2.77}$$

soit :

$$L(\theta) = \frac{1}{2dlcos(\theta)}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}|\bar{E}_z(\theta)|^2 \tag{2.78}$$

L'éclairement vaut donc :

$$\begin{aligned} E &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} L(\theta)cos(\theta)d\theta \\ &= \frac{1}{2dl}\sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}|\bar{E}_z(\theta)|^2 d\theta & (2.79) \end{aligned}$$

La BRDF s'écrit donc finalement, en notant par un indice i l'onde incidente et par un indice r l'onde réfléchie :

$$\sigma''(\theta_i, \theta_r) = \frac{|\bar{E}_z^r(\theta_r)|^2}{cos(\theta_r) \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\bar{E}_z^i(\theta)|^2 d\theta} \tag{2.80}$$

Le principal avantage de cette formulation est de ne pas faire apparaître la surface. En effet, le calcul du champ lointain que nous effectuons l'intègre directement. Ainsi un calcul de la BRDF fera intervenir deux calculs du champ lointain : une première fois pour l'onde incidente afin de déterminer le coefficient de normalisation et une seconde fois pour la diffusion par le milieu étudié. Néanmoins, cette formulation a été développée pour une onde plane (la surface dl d'éclairement élémentaire uniforme n'a pas de sens sinon). Notons que, en comparant l'équation (2.80) et l'équation (2.70), $\sigma''(\theta_i, \theta_r) = \frac{1}{cos(\theta_r)} I(\theta_i, \theta_r)$.

Dans le cas de l'illumination par un faisceau gaussien, à condition qu'il soit tubulaire, ces relations restent valables [51, 40]. Ainsi, nous pouvons faire le lien entre notre calcul électromagnétique et les grandeurs d'intérêt en optique.

2.5.2 Intensité cohérente et incohérente

Nous avons vu qu'il nous faut générer un grand nombre de milieux pour obtenir la BRDF, nous effectuons ensuite une moyenne sur l'ensemble des réalisations pour obtenir des grandeurs statistiquement représentatives. On note $\langle E \rangle$ la valeur moyenne du champ électrique sur l'ensemble des réalisations et δE ses fluctuations. On peut alors décomposer pour chaque réalisation le champ électrique au point r en :

$$E(r) = \langle E \rangle (r) + \delta E(r) \tag{2.81}$$

L'intensité moyenne est alors définie comme :

$$\langle I(r) \rangle = \left\langle |E(r)|^2 \right\rangle \tag{2.82}$$

$$= \left\langle |\langle E \rangle (r) + \delta E(r)|^2 \right\rangle \tag{2.83}$$

Comme, par définition $\langle \delta E(r) \rangle = 0$, on trouve :

$$\langle I(r) \rangle = |\langle E \rangle (r)|^2 + \left\langle |\delta E(r)|^2 \right\rangle \tag{2.84}$$

On définit alors l'intensité cohérente comme :

$$I_{coh}(r) = |\langle E \rangle (r)|^2 \tag{2.85}$$

Comme nous faisons le calcul sur un nombre limité de réalisations N, nous utilisons :

$$I_{coh}(r) \approx \frac{1}{N^2}\left|\sum_{n<N} E_n(r)E_n^*(r)\right| \tag{2.86}$$

Où $E_n(r)$ est la valeur du champ électrique pour la réalisation n au point r. On définit alors l'intensité incohérente comme :

$$\begin{aligned} I_{incoh} &= \left\langle |\delta E(r)|^2 \right\rangle && (2.87)\\ &= \left\langle |E(r)|^2 \right\rangle - |\langle E\rangle(r)|^2 && (2.88)\\ &\approx \frac{1}{N}\sum_{i<N}|E_iE_i^*| - \frac{1}{N^2}\left|\sum_{i<N} E_iE_i^*\right| && (2.89) \end{aligned}$$

La diffusion est cohérente lorsque la phase du champ diffusé est corrélée entre chaque réalisation et incohérente lorsqu'elle n'est pas corrélée. Ainsi, la diffusion par un ensemble de particules ou par une surface rugueuse présentera en moyenne une part cohérente et une part incohérente.

2.5.3 Exemples de BRDF

La Figure 2.24 présente deux calculs de BRDF en incidence pour deux milieux hétérogènes composés de particules de rayon $\lambda_0/10$ pour une fraction volumique de 10% et de 20%. La remontée de la BRDF pour les angles rasants n'est pas physique et caractérise les problèmes numériques rencontrés précédemment pour les angles rasants. Dans le premier cas ($f_v = 10\%$), la diffusion par les particules est assez faible et le diagramme de diffusion fait surtout apparaître la réflexion par le plan. On observe alors une légère composante incohérente et un cohérent fort. Lorsque la fraction volumique augmente ($f_v = 20\%$), la diffusion par les particules augmente significativement. Ceci se traduit par une augmentation de la composante incohérente du champ diffracté. Dans ce cas, on note l'apparition d'un second pic dans la direction de rétro-diffusion ($\theta_r = 20^o$). C'est un phénomène connu caractéristique de la diffusion multiple. En effet, dans la direction de rétro-diffusion le chemin direct et le chemin inverse s'additionnent en phase. Ce phénomène porte le nom de rétro-diffusion cohérente ou de rétro-diffusion exaltée.

2.5.4 Conclusion

Nous avons présenté notre implémentation de l'algorithme FDTD pour l'étude de la diffusion par des matériaux hétérogènes rugueux en géométrie bidimensionnelle. Notamment, nous avons étudié l'insertion du champ incident et une méthode de calcul du champ lointain fréquentiel rayonné à partir des résultats obtenus dans le domaine de calcul.

Nous avons alors étudié la diffusion en espace libre de cylindres afin de déterminer

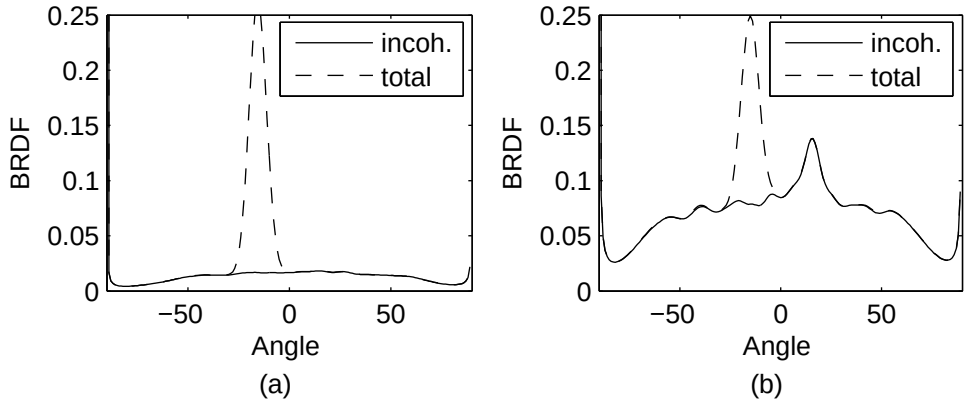


FIG. 2.24 – Exemples de BRDF pour des milieux hétérogènes avec des particules de rayon $\lambda_0/10$ pour une fraction volumique de 10% (a) et de 20% (b) pour une incidence $\theta_{inc} = 20^o$.

les paramètres de calculs pour la suite de nos travaux et s'assurer qu'ils sont correctement représentés. Nous avons vu qu'un pas de discrétisation de $\lambda/20$ dans le milieu de plus fort indice était nécessaire pour s'assurer d'une précision suffisante. Compte tenu du domaine étudié (indices compris entre 1 et 4), nous utiliserons le plus souvent un pas de discrétisation de $\lambda_0/40$ pour l'étude de matériaux hétérogène.

Afin de pouvoir utiliser l'algorithme présenté pour l'étude de milieux semi-infinis, nous avons présenté une implémentation originale du faisceau gaussien dans la FDTD. Cette approche permet de réduire fortement les artefacts d'origine numérique. De plus, ces propriétés restent valable jusqu'à des fortes incidences et permettent de garder des résultats précis avec un niveau de bruit faible. Ainsi, les principales sources d'erreurs restent les conditions absorbantes et la troncature de la surface d'intégration.

Nous avons ensuite présenté une formulation de la BRDF adaptée à la FDTD bidimensionnelle et nous l'avons appliquée à un exemple de milieu hétérogène. Nous avons séparé le champ cohérent du champ incohérent dû aux diffusions par la surface rugueuse ou par les particules. Notre algorithme nous permet de modéliser les phénomènes complexes de diffusion comme le pic de rétro-diffusion exaltée.

Nous disposons, dès lors, d'un outil performant d'étude des matériaux hétérogènes rugueux. Celui-ci nous permet de calculer sans hypothèses la diffusion par l'ensemble des éléments constituant le milieu. Cette méthode peut être utilisée :

- directement pour le calcul de la diffusion d'un matériau hétérogène rugueux surtout lorsque les méthodes approchées ne s'appliquent pas ;
- pour tester le domaine de validité de méthodes approchées.

Nous verrons trois applications de cette démarche dans les chapitres 4, 5 et 6.

Chapitre 3

Génération de milieux aléatoires

3.1 Génération de la surface aléatoire

3.1.1 Présentation

Les milieux que nous modélisons comportent une surface aléatoire et un ensemble de particules. Les deux ne sont pas générés simultanément. En effet, dans cette première partie, la forme de la surface rugueuse est indépendante de la position des particules. Nous disposerons alors des frontières du milieu hôte qui constitueront les limites du domaine de génération utilisé pour le positionnement des particules. Ainsi, nous commencerons logiquement par la présentation de l'algorithme de génération des surfaces aléatoires à partir de paramètres statistiques.

Nous décrirons tout d'abord les paramètres descriptifs utilisés afin de caractériser les surfaces générées. Nous verrons ensuite les bases de l'algorithme de génération et le passage des fonctions statistiques à un ensemble de surfaces rugueuses. Finalement, nous étudierons des exemples de surfaces générées et les effets de la discrétisation de la FDTD sur la fonction d'auto-corrélation.

3.1.2 Description des surfaces

Les échelles seront données en fonction de la longueur d'onde dans le vide λ_0.

Nous supposons que la surface est décrite par une fonction s dépendant de la position y (c.f. Figure 3.1).

La génération de la surface utilise deux paramètres statistiques représentatifs : la distribution des hauteurs et la fonction d'auto-corrélation. Nous utiliserons ensuite ces deux fonctions pour caractériser les surfaces générées. La distribution des hauteurs nous permet d'étudier le comportement de la surface autour du plan moyen. Nous générerons des surfaces de distribution des hauteurs P gaussienne, c'est-à-dire que les hauteurs suivent une loi de la forme :

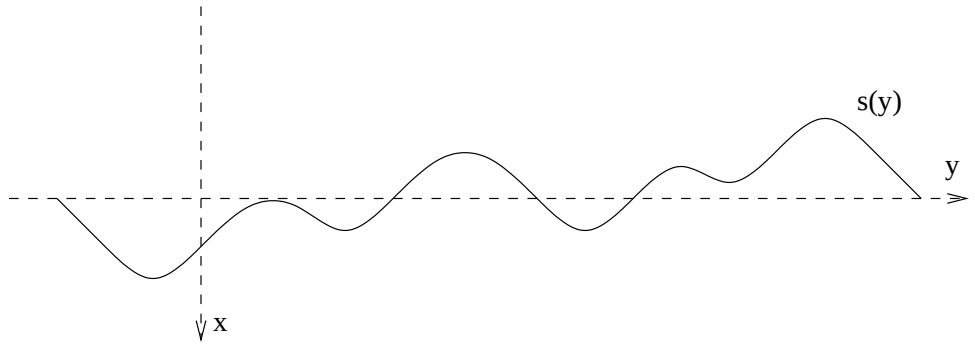


FIG. 3.1 – Géométrie de la surface aléatoire

$$P(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h_{rms}}} exp\left(\frac{(y - h_{moy})^2}{2h_{rms}^2}\right) \tag{3.1}$$

La fonction d'auto-corrélation C pourra prendre n'importe quelle forme. Pour une surface stationnaire, elle se déduit de la variation des hauteurs de la surface s par :

$$C(x) = \int_{-\infty}^{\infty} s(\chi)s(x - \chi)d\chi \tag{3.2}$$

Les variations de C dépendent de la nature de la surface rugueuse. Nous présentons ici la génération des deux types de surfaces les plus étudiées : les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne et les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Nous verrons qu'elles ont un comportement différent notamment sur la forme des rugosités présentes.

3.1.3 Génération

Dans cette partie, nous cherchons à obtenir une surface aléatoire respectant une fonction d'auto-corrélation C connue et une distribution des hauteurs gaussienne. L'équation (3.2) peut se mettre sous la forme d'une convolution (notée $\star$) de s avec elle-même, soit :

$$C(y) = s(y) \star s(y) \tag{3.3}$$

En utilisant une transformation de Fourier, notée TF et en appelant S la transformée de Fourier de s et S^* sa transformée de Fourier conjuguée, cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} TF[C](R) &= S(R)S^*(R) & (3.4)\\ &= PSD(R) & (3.5) \end{aligned}$$

On retrouve l'expression du spectre de puissance (PSD) de la surface. Celui-ci nous

permet d'étudier les fréquences présentes dans les variations des hauteurs (il s'agit de la transformée de Fourier de la surface). L'équation (3.4) montre que la fonction d'auto-corrélation et le spectre de puissance contiennent la même information. Il est donc possible de l'utiliser de la même façon pour caractériser ou générer la surface rugueuse.

L'équation (3.4) montre que la fonction $TF[C]$ est indépendante de la phase de S. Ainsi toute multiplication par une fonction de phase ϕ donnera une surface s de fonction d'auto-corrélation C et de spectre de puissance PSD. La transformée de Fourier de la surface peut donc s'écrire :

$$S(R) = \sqrt{TF[C](R)}e^{i\phi(R)} \tag{3.6}$$

Nous voulons générer une surface discrète à partir de l'équation (3.6). Le pas de discrétisation est noté Δx et est égal au pas de discrétisation FDTD. La transformée de Fourier de la surface pour le j^{eme} point est alors :

$$S(j) = \sqrt{TF[C](j)}e^{i\phi(j)} \tag{3.7}$$

ϕ est un ensemble de nombres aléatoires, décorrélés entre eux, uniformément répartis entre $[0, 2\pi]$. Ce choix de $\phi(j)$ permet d'avoir une distribution des hauteurs gaussienne de hauteur quadratique moyenne h_{rms}. Finalement, en effectuant une transformation de Fourier inverse TF^{-1}, on a dans l'espace réel :

$$s(j) \quad = \quad TF^{-1}[\sqrt{TF[C]}e^{i\phi}](j) \tag{3.8}$$

3.1.4 Étude de surfaces aléatoires

3.1.4.1 Caractéristiques statistiques des surfaces

Nous allons utiliser dans l'algorithme de génération deux fonctions d'auto-corrélation différentes : gaussienne et exponentielle. Ces fonctions d'auto-corrélation se ressemblent mais aboutissent à des résultats très différents. La fonction d'auto-corrélation gaussienne est :

$$C(r) = h_{rms}^2 exp\left(-\frac{r^2}{l_c^2}\right) \tag{3.9}$$

où h_{rms} est la hauteur quadratique moyenne et l_c la longueur de corrélation. La fonction d'auto-corrélation exponentielle est :

$$C(r) = h_{rms}^2 exp\left(-\frac{|r|}{l_c}\right) \tag{3.10}$$

La différence entre les deux fonctions d'auto-corrélation vient donc de la puissance

de r dans l'exponentielle (1 dans le cas exponentiel et 2 dans le cas gaussien). Elles sont représentées Figure 3.2.

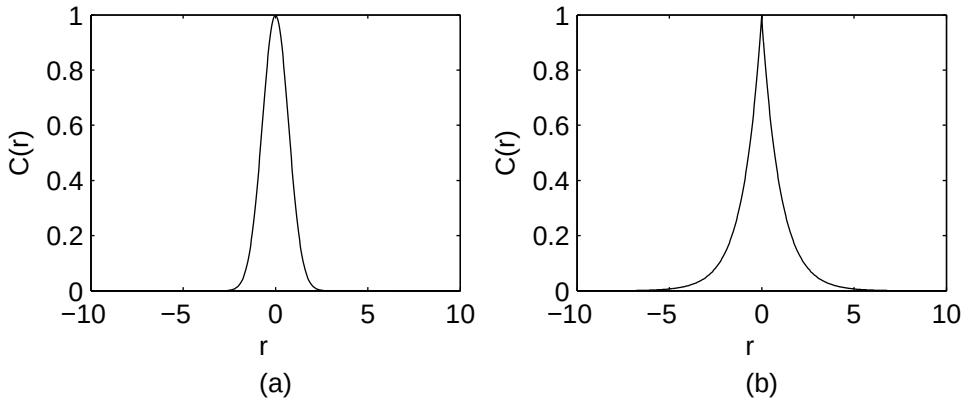


FIG. 3.2 – Fonctions d'auto-corrélation théoriques gaussienne (a) et exponentielle (b) pour $h_{rms} = \lambda_0$ et $l_c = \lambda_0$

On remarque que la fonction d'auto-corrélation exponentielle présente une singularité en 0 où elle n'est pas dérivable. On peut observer sur la Figure 3.3 représentant des surfaces générées avec la même graine pour le générateur de nombres aléatoires, l'apparition de hautes fréquences spatiales pour la fonction d'auto-corrélation exponentielle. Ces variations extrêmement rapides sont particulièrement difficiles à prendre en compte avec une méthode discrétisant l'espace, comme nous allons le voir par la suite.

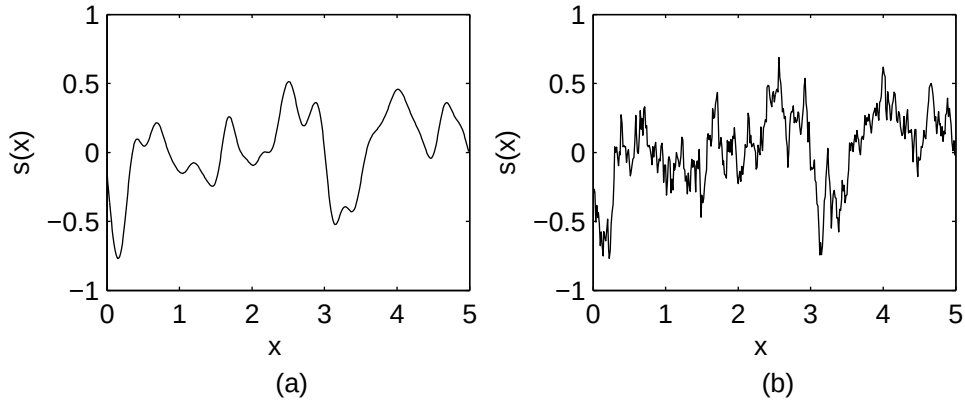


FIG. 3.3 – Surfaces d'auto-corrélation gaussienne (a) et exponentielle (b)

Si les fonctions d'auto-corrélation sont semblables, il n'en est rien des spectres de puissance. En effet, en utilisant l'équation (3.4), celui d'une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne est :

$$PSD(R) = h_{rms}^2 \sqrt{\pi} l_c exp\left(-\frac{R^2 l_c^2}{4}\right) \tag{3.11}$$

alors que pour une auto-corrélation exponentielle, on trouve :

$$PSD(R) = \frac{2h_{rms}^2 l_c}{1 + (l_c R)^2} \tag{3.12}$$

La décroissance du spectre de puissance dans les deux cas est différente. En effet, pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne, la décroissance est exponentielle et rapide. Le spectre d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle décroît en loi de puissance R^{-2}. Sa décroissance est donc bien plus lente et les surfaces résultantes ne sont pas dérivables. On ne peut pas normalement définir de pente moyenne pour une surface d'auto-corrélation exponentielle car $\int R^2 PSD(R)$ diverge.

La discrétisation altère les propriétés de la surface, notamment en coupant ses hautes fréquences spatiales. La Figure 3.4 montre l'effet de la discrétisation sur la représentation des pentes et de la fonction d'auto-corrélation. Deux pas de discrétisation ($\lambda_0/100$ et $\lambda_0/1000$) sont utilisés pour générer la surface. Dans les deux cas, la fonction d'auto-corrélation est bien représentée puisque les deux courbes (pointillés et trait plein) sont confondues.

La distribution des pentes présente un comportement différent (Figure 3.4(b et d)). Dans le cas des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussiennes, celle-ci n'évolue pas avec la discrétisation : la surface est donc correctement représentée dans les deux cas. De plus, les pentes restent contenue dans l'intervalle $[-1, 1]$. On retrouve ici le comportement lisse de la fonction d'auto-corrélation gaussienne. La distribution des pentes pour les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle ne reste pas stable avec l'évolution de la discrétisation. Dans le cas d'un pas de $p_1 = \lambda_0/100$, les pentes sont contenues dans l'intervalle $[-10, 10]$. Lorsque le pas est divisé par 10 ($p_2 = \lambda_0/1000$), de nouvelles échelles de rugosités apparaissent et les pentes sont contenues dans l'intervalle $[-30, 30]$. Comme attendu, elles n'ont pas convergé et elles ne convergeront jamais. On remarque de plus que les pentes sont très importantes et croissent avec le pas de discrétisation. Pour étudier ce type de surface il faut donc savoir quand les petites oscillations rapides peuvent être négligées pour le calcul électromagnétique. Nous verrons par la suite que ce problème nous limitera fortement pour leur étude.

3.1.4.2 Effet de la discrétisation

L'algorithme FDTD utilisé introduit une discrétisation spatiale. Nous allons séparer l'effet des discrétisations horizontale (sur l'axe y de la figure 3.1) et verticale (sur l'axe x) pour des surfaces d'auto-corrélation gaussienne. Les effets sont différents et doivent donc être étudiés séparément.

Nous commencerons cette étude par la discrétisation horizontale. Celle-ci introduit un nombre plus restreint de $\phi(j)$ ainsi qu'un pas plus grand pour la génération. La Figure 3.5 présente la fonction d'auto-corrélation de la surface pour deux pas différents : $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/4$. Comme attendu, la discrétisation horizontale réduite induit une discrétisation

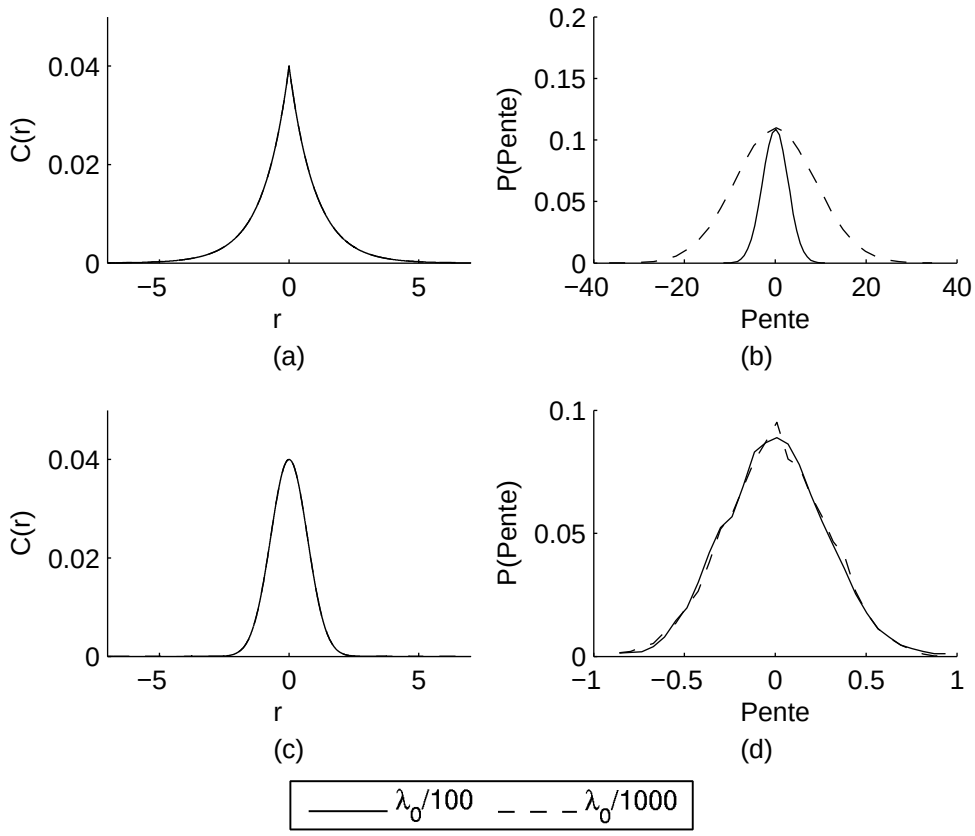


FIG. 3.4 – Comparaisons de la fonction d'auto-corrélation (a et c) et de la densité de probabilité des pentes (b et d) pour deux pas de discrétisation différents ($p_1 = \lambda_0/100$ et $p_2 = \lambda_0/1000$) pour des surfaces d'auto-corrélation exponentielle (a et b) et gaussienne (c et d) avec $h_{rms} = 0.2\lambda_0$ et $l_c = \lambda_0$ (échelles pour l'auto-corrélation en λ_0).

plus faible de la fonction d'auto-corrélation. Néanmoins, cet effet est peu visible pour une surface gaussienne. En effet, la fonction d'auto-corrélation gaussienne est lisse et ne présente pas de variation rapide. Elle est donc peu sensible à une discrétisation plus réduite et reste correctement représentée. La forme de la fonction d'auto-corrélation idéale utilisée pour la génération n'est pas modifiée puisque ce pas de discrétisation est directement introduit dans l'algorithme utilisé.

La FDTD discrétise l'espace dans les deux dimensions. La seconde direction de discrétisation, sur l'axe y, modifie la position des points de la surface par rapport à leur position idéale générée par l'algorithme pour se placer sur une maille de la FDTD. Ainsi, la fonction d'auto-corrélation sera d'autant plus altérée que le pas du maillage est faible et la position des points modifiée. Ceci est nettement visible sur la Figure 3.6(a). La fonction d'auto-corrélation présente des oscillations autour de la fonction d'auto-corrélation idéale présentée en trait plein. Une discrétisation plus importante de la surface ($\lambda_0/40$) permet d'améliorer la concordance entre les deux courbes.

Ces deux exemples montrent l'importance du traitement effectué sur la surface par

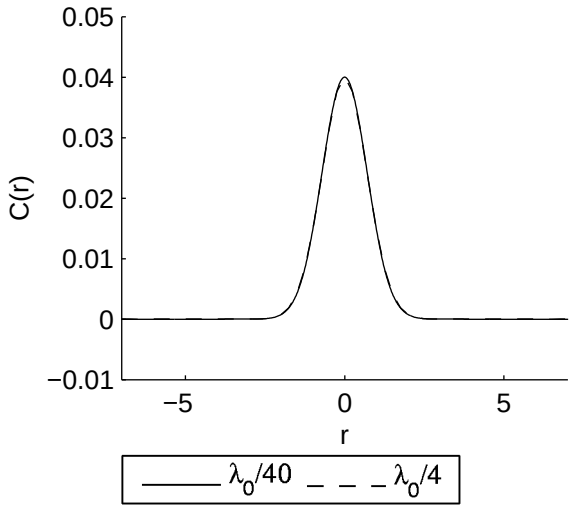


FIG. 3.5 – Effet de la discrétisation horizontale de la surface pour une surface de $h_{rms} = 0.2\lambda_0$ et $l_c = 1\lambda_0$. Le pas de discrétisation est de $\lambda_0/40$ et de $\lambda_0/4$ (échelles en λ_0).

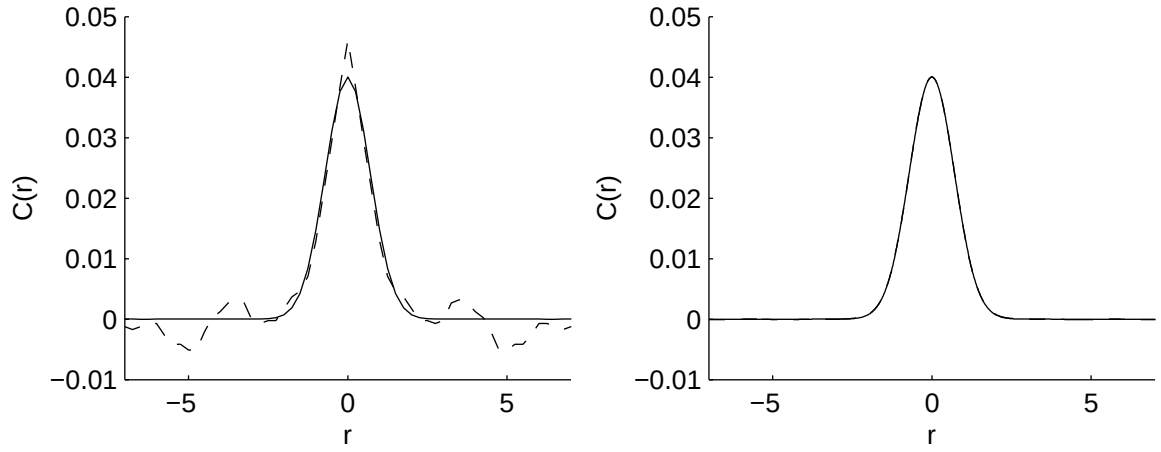
l'algorithme pour représenter les caractéristiques désirées. Ainsi un algorithme maillant uniquement la surface ou restant conforme aux points discrétisés suivant sa direction naturelle fera moins d'erreur qu'un algorithme maillant tout l'espace avec des mailles carrées (comme la FDTD). Ces variations peuvent introduire des différences sur le résultat du calcul électromagnétique entre ces méthodes.

3.1.5 Conclusion

Nous avons présenté un algorithme qui nous permet de générer des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle et de distribution de hauteurs gaussienne à partir de la fonction d'auto-corrélation. Nous avons étudié les différences entres les deux types de surfaces et notamment, nous avons vu que les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielles présentaient des rugosités de très petites échelles. Son spectre de puissance décroît lentement et ces surfaces ne sont pas dérivables. Ensuite, nous avons étudié les paramètres statistiques des milieux générés après l'étape de discrétisation et nous avons remarqué l'introduction d'erreurs numériques supplémentaires. En effet :

- Nous ne pouvons pas traiter rigoureusement les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle, les oscillations rapides de faibles amplitudes étant coupées par le maillage ;
- La discrétisation de la surface altère ses propriétés statistiques pour des pas de maillage grands devant h_{rms} et l_c.

Ainsi, les traitements effectués par l'algorithme pour pouvoir calculer la diffusion par la surface rugueuse introduisent des erreurs de représentation d'autant plus grandes que le pas de discrétisation est important. Nous en verrons les conséquences dans la partie



(a) $\lambda_0/4$ (b) $\lambda_0/40$

FIG. 3.6 – Effet de la discrétisation verticale de la surface pour une surface de $h_{rms} = 0.2\lambda_0$ et $l_c = 1\lambda_0$. La pas de discrétisation est de $\lambda_0/40$ à droite et de $\lambda_0/4$ à gauche. Le trait plein représente la fonction d'auto-corrélation utilisée en entrée de l'algorithme de génération et les traits pointilles représentent la fonction d'auto-corrélation obtenue (échelles en λ_0).

portant sur l'étude de la diffusion par une surface rugueuse.

3.2 Génération de milieux hétérogènes

3.2.1 Présentation

Nous cherchons à générer un milieu aléatoire comportant plusieurs types et tailles de particules. Cette génération doit prendre en compte les contraintes physiques suivantes :

- La distribution de la taille des particules ;
- La fraction volumique (i.e. le rapport entre la partie occupée par les particules et le tout) ;
- Le modèle d'interaction entre les particules : les particules peuvent être libres de se positionner (modèle gaz), libre mais sans pouvoir s'interpénétrer (modèle des sphères dures), ou tout autre choix (attractions, répulsions...) ;
- Le type de matériaux de chaque particule.

Ces paramètres sont les entrées d'un générateur de milieux aléatoires basé sur l'algorithme de Metropolis [89]. Nous l'avons choisi car il permet de prendre en compte des contraintes physiques pour le positionnement des particules (forces d'interactions) et il peut atteindre de fortes fractions volumiques en un temps de calcul raisonnable. Nous étudierons ici uniquement des cylindres ou des sphères mais cet algorithme a déjà été appliqué pour des particules plus complexes comme des sphéroïdes [2, 102].

Chaque particule P_i est décrite par les coordonnées de son centre $\vec{p}_i = (x_i, y_i)$, son rayon r_i et son indice optique n_i (Figure 3.7). La zone de génération est limitée dans

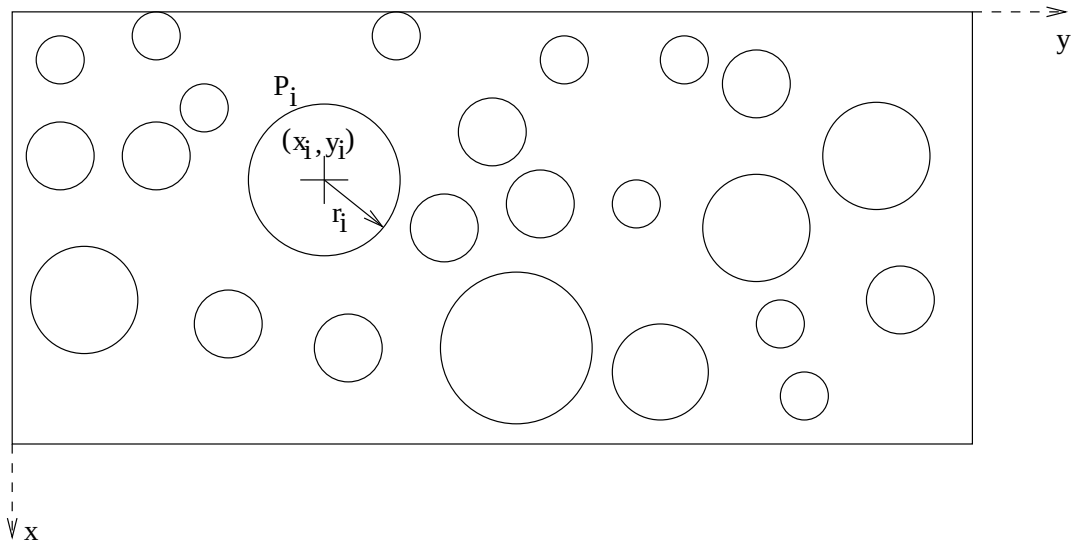


FIG. 3.7 – Géométrie utilisée pour le milieu hétérogène

l'espace. Nous montrerons ici le cas de limites rectangulaires, mais nous l'appliquerons par la suite également aux cas d'interfaces rugueuses (surfaces aléatoires).

Dans une première partie, nous allons décrire le déroulement de l'algorithme de Metropolis. Nous verrons comment il permet de prendre en compte des contraintes physiques et nous l'appliquerons dans le cas particulier des sphères dures. Nous verrons, dans une seconde partie, une fonction statistique d'étude des milieux hétérogènes très utilisée dans les théories de diffusions multiples : la fonction de corrélation de paires.

3.2.2 L'algorithme de Metropolis [89]

3.2.2.1 Initialisation

Nous générons un ensemble de N_p particules par une méthode de Monte Carlo respectant la distribution désirée en taille et en type. Ces particules sont ensuite positionnées régulièrement dans l'espace. Il s'agit d'avoir à l'étape initiale une configuration possible sans toutefois être optimale, c'est-à-dire que l'énergie potentielle du système dans l'état initial ne doit pas être infinie mais n'est pas forcément minimale. Dans le cas particulier des sphères dures, il faut et il suffit de s'assurer que les particules ne s'interpénètrent pas. Ainsi, dans l'initialisation de l'algorithme, nous ne cherchons pas à obtenir un milieu aléatoire mais un milieu possible. Ce second aspect sera pris en compte par le mouvement aléatoire. Ainsi, les deux problèmes de génération sont séparés. C'est ce découpage qui permet à cet algorithme de générer des milieux fortement chargés en un temps raisonnable. En effet, nous aurions pu générer un milieu respectant le modèle des sphères dures en déterminant directement la position du centre des particules grâce à des nombres aléatoires uniformément répartis. Cette méthode est très efficace lorsque la fraction volumique

est faible mais son temps de génération croît très rapidement rendant difficile la création de milieux chargés à plus de 20% et elle ne permet pas de prendre en compte un modèle physique évolué.

Afin de générer des milieux aléatoires, l'algorithme de Metropolis utilise la variation d'énergie potentielle du système. Par exemple, le potentiel d'interaction entre deux particules pour les sphères dures est :

$$V_{ij} = \begin{cases} \infty \; si \; ||\vec{p_i} - \vec{p_j}|| < r_i + r_j \\ 0 \; sinon \end{cases} \tag{3.13}$$

Ainsi, l'énergie initiale E_0 du système peut s'exprimer comme :

$$\begin{aligned} E_0 &= \sum_{i=1}^{N_p} \sum_{j=1, j\neq i}^{N_p} V_{ij} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Dans le cas des sphères dures, cette somme est triviale. Pour un modèle physique plus complexe, elle représente la valeur initiale que nous allons chercher à minimiser. Elle dépend fortement du modèle d'interaction choisi. Par exemple, elle est soit nulle soit infinie dans le cas des sphères dures.

3.2.2.2 Déplacement des particules

Chaque particule positionnée précédemment est maintenant aléatoirement déplacée. Pour cela, pour une particule P_i, on génère deux nombres aléatoires ν_1 et ν_2 dont la distribution est uniforme sur l'intervalle [-1,1], La particule est ensuite déplacée :

$$(x_i, y_i) \Leftarrow (x_i, y_i) + \Delta \cdot (\nu_1, \nu_2) \tag{3.15}$$

où Δ est un réel donnant la distance maximale de déplacement puisque $\|\nu_1\| \leq 1$ et $\|\nu_2\| \leq 1$. Sa valeur est optimale lorsque le taux de refus des déplacements est de l'ordre de 50% [2].

Après chaque déplacement, on calcule la nouvelle énergie potentielle du système :

$$E^i = \sum_{i=1}^{N_p} \sum_{j=1, j\neq i}^{N_p} V_{ij} \tag{3.16}$$

On calcule ensuite la variation d'énergie du système :

$$\delta E = e^{E^{i-1} - E^i} \tag{3.17}$$

On effectue les opérations suivantes en fonction de la valeur de δE :

- Si $\delta E \geq 1$ (ce qui signifie que $E^i \leq E^{i-1}$), l'énergie potentielle du système a décru, le mouvement de la particule est alors accepté ;
- Si $\delta E \leq 1$ (ce qui signifie que $E^i \geq E^{i-1}$), la nouvelle énergie du système a augmenté, un nouveau nombre aléatoire ν_a est tiré. Si $\nu_a \geq \delta E$ le mouvement est accepté sinon il est refusé.

On passe ensuite à la particule suivante.

Le cas des sphères dures est plus simple. En effet, seulement deux cas sont possibles :

- Soit $\delta E = 0$ lorsque deux particules s'interpénètrent, et le mouvement est refusé quel que soit le nombre aléatoire ν_a (il n'est donc pas tiré) ;
- Soit $\delta E = 1$ et il est accepté.

Cette étape peut être considérablement accélérée en ne calculant la somme (3.16) que pour des particules susceptibles d'interagir ensemble. Dans notre code de calcul, nous avons utilisé un espace discrétisé pour représenter les domaines d'interaction de chaque particule. Le domaine de calcul total est alors découpé en plusieurs sous domaines plus petits et le calcul n'est alors effectué que sur des particules recouvrant les mêmes mailles. Cette optimisation permet de traiter rapidement un grand nombre de particules.

3.2.2.3 Fin de l'algorithme

L'algorithme se termine quand E^i atteint un minimum. Dans les cas des sphères dures, ce critère n'est pas pertinent puisque E^i est toujours nul quel que soit l'état du système. Nous effectuerons donc un certain nombre de déplacements jusqu'à ce que nous ayons suffisamment déplacé les particules et que nous puissions considérer le milieu comme aléatoire. La convergence de l'algorithme est prouvée mathématiquement [27].

3.2.2.4 Exemples de milieux générés

Nous allons utiliser cet algorithme avec deux modèles physiques différents : le modèle des sphères dures et un modèle avec une attraction en r^{-2}. Pour les deux cas, nous utiliserons une distribution en taille suivant une loi de Weibull. Le potentiel d'interaction pour le modèle des sphères dures a déjà été défini, pour le modèle attractif les particules ne peuvent s'interpénétrer et le potentiel V_{ij} est de la forme :

$$V_{ij} = \begin{cases} 1/(\ ||\vec{p_i} - \vec{p_j}||)^2 \ si\ ||\vec{p_i} - \vec{p_j}|| > r_i + r_j \\ \infty\ sinon \end{cases} \tag{3.18}$$

La Figure 3.8 présente les milieux générés. Pour le modèle attractif, les particules s'agrègent pour diminuer l'énergie potentielle totale du système. On remarque que les particules ont tendance à former tout d'abord des petits amas puis de plus grosses structures lorsque la fraction volumique augmente. Le modèle des sphères dures conduit à une répartition plus homogène des particules dans l'espace.

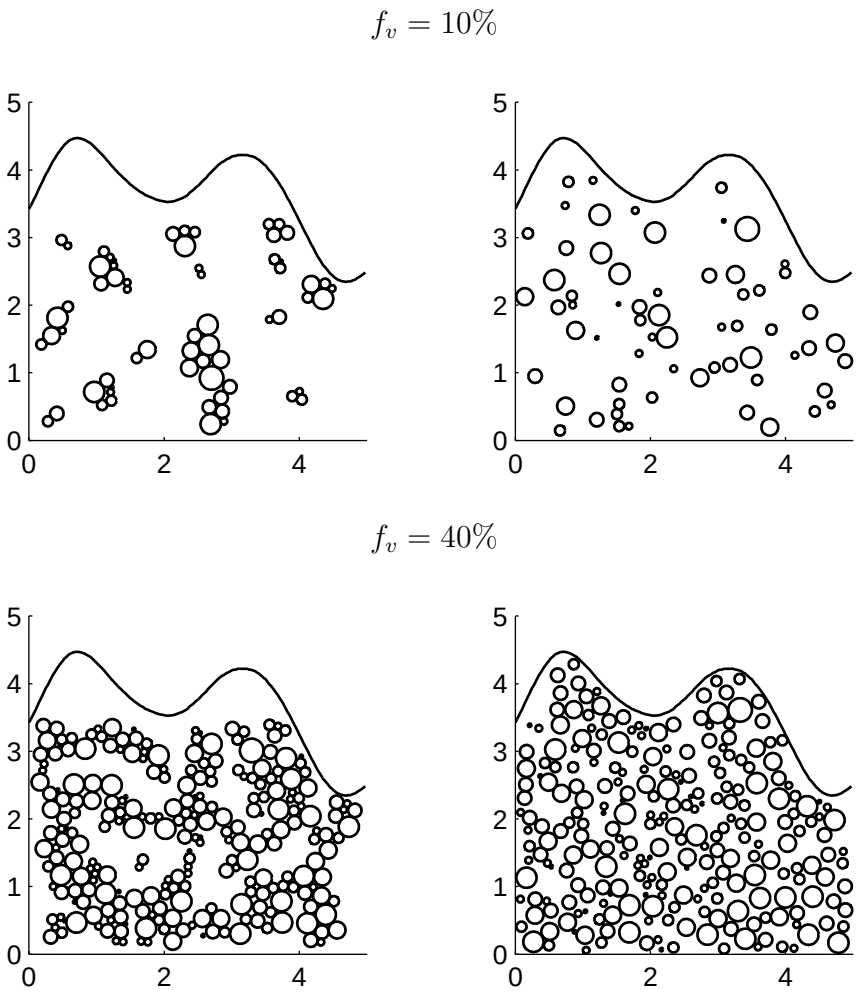


FIG. 3.8 – Milieux hétérogènes rugueux générés avec l'algorithme de Metropolis pour deux fractions volumiques différentes (10% et 40%) et pour deux modèles physiques différents (attraction en $1/r^2$ à gauche et sphères dures à droite)

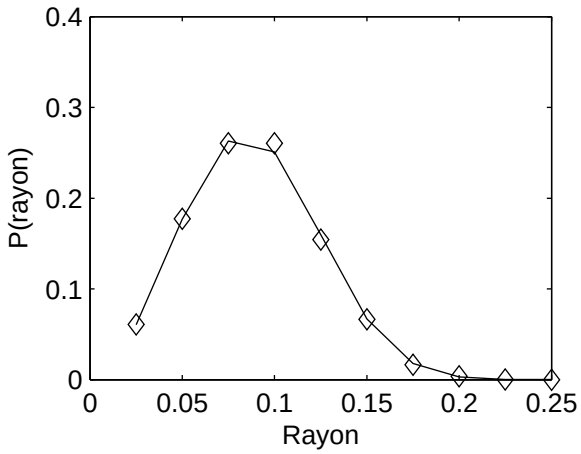


FIG. 3.9 – Distribution utilisée pour la génération (Weibull) : la courbe en trait plein représente l'entrée du générateur et les losanges les quantités réellement obtenues pour un milieu comportant 2000 particules

Les milieux générés suivant les deux méthodes auront sans doute une réponse différente à une impulsion électromagnétique. En effet, on voit notamment l'apparition de trous dans la matrice de taille comparable à la longueur d'onde dans le cas des agrégats pour de fortes fractions volumiques. La Figure 3.9 représente la distribution de Weibull utilisée en entrée et la distribution réellement obtenue après le processus de Monte Carlo. La différence entre les deux s'estompe avec le nombre de milieux générés.

Nous avons donc un algorithme de génération qui répond efficacement aux contraintes physique et statistique que nous nous étions fixées.

3.2.3 Fonction de corrélation de paires

3.2.3.1 Calcul de la fonction de corrélation de paires

La fonction de corrélation de paires (PCF) est une donnée importante pour de nombreuses méthodes de calcul de la diffusion multiple. En effet, elle donne la densité de probabilité de trouver une particule à une distance r du centre d'une autre particule.

Nous allons chercher à estimer cette fonction par une approche de Monte Carlo. Nous disposons pour cela de N_m milieux m générés par l'approche précédente comportant chacun $N_p(m)$ particules.

On appelle Γ l'ensemble des centres des particules d'un milieu aléatoire. L'ensemble des positions possibles pour les centres est noté Γ_{ref}. La covariance $C(\vec{r})$ est la probabilité que deux points de Γ_{ref} séparés par le vecteur $\vec{r}$ soient des éléments de Γ. On a donc $\Gamma \subset \Gamma_{ref}$. La covariance C s'écrit [84] :

$$C(\vec{r}) = P[\{x \in \Gamma\} \cap \{(x + \vec{r}) \in \Gamma\} \tag{3.19}$$

Nous la supposerons isotrope. $C(\vec{r})$ est alors uniquement dépendante de la distance r et sera notée $C(r)$. Nous notons N_{11} le nombre de particules dont les centres sont situés à une distance r. Les deux indices 1 signifient que l'on travaille avec deux particules identiques (de type 1). En effet, d'autres fonctions (comme la fonction de corrélation de paire croisée) utilisent deux types différents de particules et on utilise alors N_{12} ou N_{21} suivant la référence choisie. Nous notons N_{ref} la surface incluse dans Γ_{ref} située à une distance r du centre d'une particule. N_{ref} est un cercle de rayon r en géométrie bidimensionnelle et une sphère en géométrie tridimensionnelle. La covariance $C(r)$ peut être estimée sans biais en calculant le rapport entre le nombre de centres N_{11} sur N_{ref} . Nous avons donc, en appelant $\hat{C}(r)$ cette estimation :

$$\hat{C}(r) = \frac{N_{11}(r)}{N_{ref}(r)} \tag{3.20}$$

N_{11} est évalué en comptant les centres dans les milieux générés moyennés sur une petite distance Δr, soit :

$$N_{11}(r) = \frac{1}{\Delta r} \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{i=1}^{N_p(m)} \sum_{j=1, j\neq i}^{N_p(m)} \delta(r - \Delta r/2 \leq ||\vec{r_i} - \vec{r_j}|| \leq r + \Delta r/2) \tag{3.21}$$

où $\vec{r_i}$ et $\vec{r_j}$ sont les positions des particules, et $\delta(C)$ une fonction qui vaut 1 si la condition C est vérifiée et 0 sinon.

N_{ref} est connu analytiquement et dépend de la géométrie de l'étude. En géométrie bidimensionnelle, l'espace Γ_{ref} est un rectangle et en géométrie tridimensionnelle un parallélépipède rectangle de taille finie. Ainsi, le domaine de calcul de la PCF est limité, et N_{ref} doit être corrigé en utilisant le covariogramme géométrique $\gamma(r)$. Celui-ci permet de calculer une surface équivalente afin de prendre en compte la forme du domaine de calcul. Finalement, en géométrie bidimensionnelle, N_{ref} s'écrit [104] :

$$N_{ref} = N_m 2\pi r \gamma(r) \tag{3.22}$$

Le calcul de $\gamma(r)$ se fait en calculant la surface moyenne d'intersection entre le rectangle et sa translation d'un vecteur $\vec{r}$ pour tous les vecteurs $\vec{r}$ tel que $\|\vec{r}\| = r$ [104]. La géométrie de calcul est présentée Figure 3.10. Le rectangle a pour dimensions $a \times b$.

Nous cherchons à calculer $\gamma(r)$ pour $r < min(a, b)$. On a alors :

$$\gamma(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (a - r\,|cos\theta|)(b - r\,|sin\theta|) d\theta \tag{3.23}$$

$$= ab - \frac{2}{\pi}(a + b)r + \frac{1}{\pi}r^2 \tag{3.24}$$

Dans le cas du parallélépipède rectangle, nous avons donc :

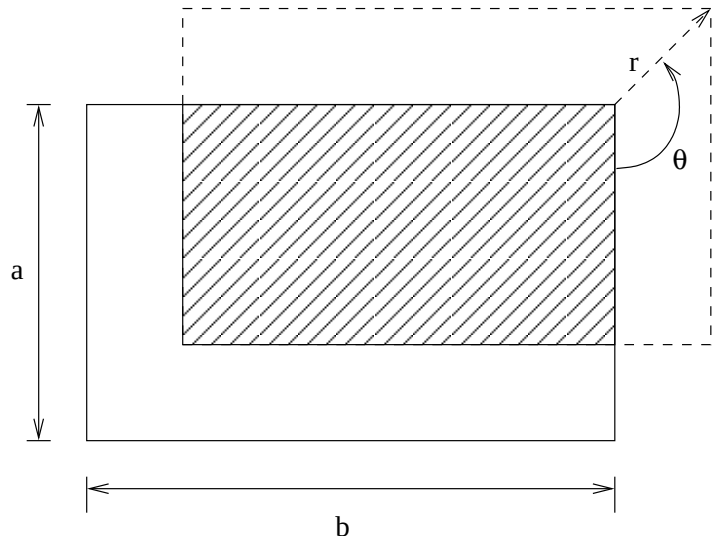


FIG. 3.10 – Géométrie pour le calcul du covariogramme géométrique

$$N_{ref} = N_m \frac{4}{3}\pi r^2 \gamma(r) \tag{3.25}$$

avec, si les dimensions du parallélépipède rectangle sont $a \times b \times c$:

$$\begin{aligned} \gamma(r) &= \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} (a - r\,|cos\theta|)(b - r\,|sin\theta sin\phi|)(c - r\,|sin\theta cos\phi|)sin\theta d\theta d\phi \\ &= abc - \frac{1}{2}(ab + bc + ca)r + \frac{2}{3\pi}(a + b + c)r^2 - \frac{1}{4\pi}r^3 \end{aligned} \tag{3.26}$$

A partir d'un estimateur de $C(r)$, la fonction de corrélation de paires peut être estimée par :

$$\hat{g}(r) = \frac{\hat{C}(r)}{\hat{p}^2} \tag{3.27}$$

où $\hat{p}$ est l'estimateur naturel du nombre de centre de particule par unité de volume de l'espace de référence. On a donc :

$$\hat{p} = \frac{\sum_m^{N_m} N_p(m)}{N_m V} \tag{3.28}$$

où V représente l'aire ou le volume de l'espace de référence. On a $V = ab$ dans le cas du rectangle et $V = abc$ dans celui du pavé. Nous avons dès lors toutes les équations requises pour déterminer la fonction de corrélation de paire. Il faut néanmoins faire attention lors de son calcul ; l'espace de référence n'est pas forcément l'espace de génération. En effet, le centre des particules ne peut pas forcément atteindre toutes les positions possibles dans l'espace de génération. Dans notre cas, nous devons enlever le rayon des particules.

La fonction de corrélation de paires g peut donc être estimée par la fonction suivante en géométrie bidimensionnelle :

$$\hat{g}(r) = \frac{1}{2\pi\Delta r\gamma(r)\hat{p}^2}\frac{1}{\Delta r}\sum_{m=1}^{N_m}\sum_{i=1}^{N_p(m)}\sum_{j=1,j\neq i}^{N_p(m)}\frac{\delta(r-\Delta r/2 \leq ||\vec{r_i}-\vec{r_j}|| \leq r+\Delta r/2)}{||\vec{r_i}-\vec{r_j}||} \tag{3.29}$$

La fonction de corrélation de paires, bien que ne travaillant que sur les centres des particules, n'est théoriquement définie que pour un ensemble monodisperse de particules. En effet, elle considère la corrélation entre deux particules de même type. Lorsque les deux types sont différents, on parle de fonction de corrélation de paires croisées (PCCF).

Par homothétie, la fonction de corrélation de paire ne dépend pas de la taille des particules si elle est exprimée en fonction de $r/2r_i$ où r_i est le rayon des particules.

3.2.3.2 Exemples de fonctions de corrélation de paires

A partir du générateur précédent, nous avons engendré un ensemble de milieux bidimensionnels monodisperses. Les particules ont un rayon r_i. Nous avons calculé la PCF pour des fractions volumiques variant de 0 à 50% par l'algorithme de Metropolis présenter pour le modèle des sphères dures.

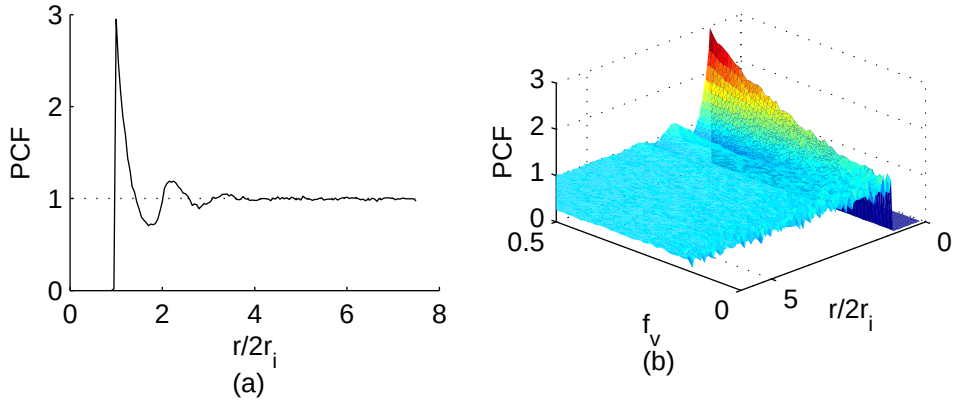
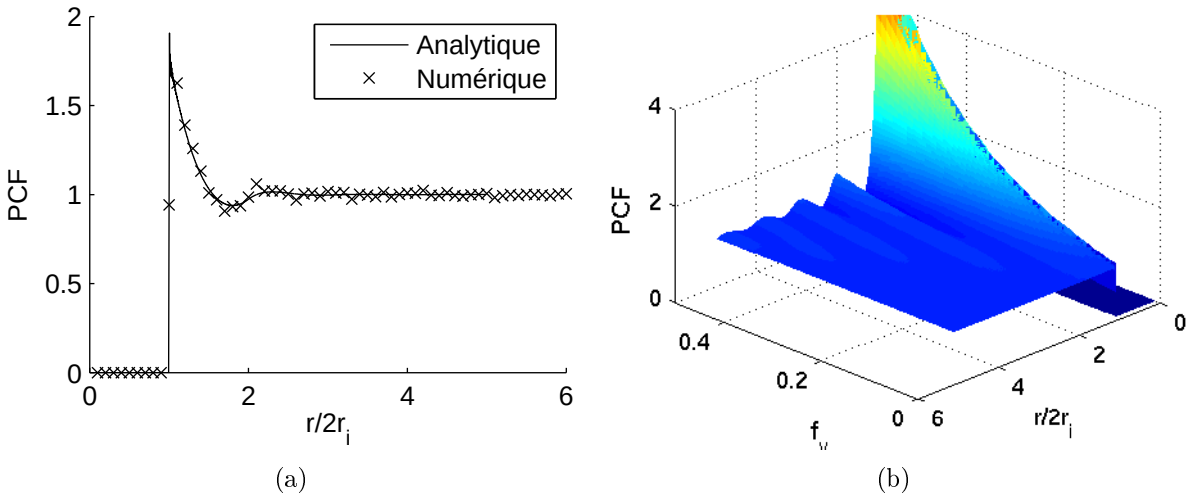


FIG. 3.11 – Fonctions de corrélation de paire bidimensionnelles numériques. (a) pour une fraction volumique $f_v = 50\%$, (b) pour une fraction volumique de 0 à 50 %. Les particules ont un rayon r_i.

La figure 3.11 présente l'évolution de la PCF en fonction de la fraction volumique f_v. On observe que cette fonction présente des oscillations de plus en plus importantes à mesure que f_v augmente. En effet, les particules interagissent d'autant plus qu'elles occupent une part importante du volume disponible. De plus, en fonction des valeurs de g, nous pouvons déterminer certaines caractéristiques du positionnement pour le modèle des sphères dures :



(a) (b)

FIG. 3.12 – Fonctions de corrélation de paire tridimensionnelles (a) pour une fraction volumique $f_v = 20\%$ calculé numériquement et par le modèle de Percus-Yevick, (b) pour une fraction volumique de 0 à 50 % avec le modèle de Percus-Yevick. Les particules ont un rayon r_i.

- Lorsque $g(r) = 0$, il n'y a aucune particule située à distance r. Pour le modèle des sphères dures on retrouve bien le fait que les particules ne peuvent s'interpénétrer ($g(r) = 0$ pour $0 < r < 2r_i$).
- Lorsque $g(r) > 1$, cela signifie qu'il y a un surplus de particules à distance r. Pour le modèle des sphères dures les particules ont donc tendance à se coller.
- Lorsque $g(r) = 1$, la position des particules n'est pas corrélée.

Ainsi, la PCF tend vers 1 pour un milieu aléatoire à mesure que la distance r augmente. Le comportement entre l'origine et cette limite dépend des caractéristiques du milieu. Dans le cas des sphères dures, on observe une zone d'interaction entre les particules de plus en plus grande à mesure que la fraction volumique augmente et que les particules sont plus serrées.

Dans le cas tridimensionnel, on dispose d'une forme analytique de la fonction de corrélation de paire : la fonction de Percus-Yevick [100, 101]. Nous avons développé l'algorithme présenté dans la section 3.2.2 en 3D pour cette étude. Le principe de fonctionnement est identique, les particules ont en plus la possibilité de se mouvoir dans les trois dimensions. La Figure 3.12(a) présente tout d'abord une comparaison entre la fonction de corrélation de paire calculée numériquement et le modèle de Percus-Yevick. Les deux approches donnent des résultats identiques. Nous représentons donc correctement le modèle des sphères dures avec l'algorithme de Metropolis tel que nous l'avons implémenté. De plus, cette méthode de calcul numérique de la fonction de corrélation de paire permet de la calculer quels que soient les potentiels d'interaction entre les particules. La seconde partie de la Figure 3.12, montre l'évolution de la fonction de corrélation de paire calculée par la relation de Percus-Yevick en fonction de la fraction volumique. On observe le même

comportement dans le cas bidimensionnel : les fortes fractions volumiques favorisent l'apparition d'interactions entre les particules. Néanmoins, elles sont beaucoup plus fortes et sur des distances plus longues à fractions volumiques égales que dans le cas précédent.

3.3 Génération d'une surface élastique

3.3.1 Présentation

Nous avons présenté, dans les deux premières parties de ce chapitre, une surface indépendante de la position des particules. Son algorithme de génération utilise uniquement la fonction d'auto-corrélation et la distribution des hauteurs.

Nous allons étudier ici une surface dont la géométrie dépend de la position des particules. L'algorithme de Metropolis est alors utilisé avant la génération de la surface : le processus est inversé. Cette partie de ce chapitre présente une solution de génération de surface corrélée à la position des particules basée sur une méthode d'optimisation.

3.3.2 Algorithme de génération

Nous commençons par générer un milieu comportant des particules sous un plan par l'algorithme de Metropolis présenté précédemment. Nous cherchons ensuite à déterminer la surface s'appuyant sur celles-ci. La surface est décrite par les points x_i. Nous modélisons les forces sur un petit morceau de surface de projection Δy sur l'axe y par :

- La gravité, de potentiel $E_g = x_i$;
- La tension de surface, de potentiel E_e.

E_e se calcule à partir de l'élongation. La géométrie utilisée pour le calcul est présentée Figure 3.13. ds est la longueur d'un élément de surface compris entre x_i et x_{i+1} et dx sa projection.

Le théorème de Pythagore nous donne la relation suivante :

$$ds^2 = dx^2 + (x_{i+1} - x_i)^2 \tag{3.30}$$

Un élément de surface ds entre x_i et x_{i+1} a donc pour longueur :

$$ds = dx\sqrt{1 + \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{dx}\right)^2} \tag{3.31}$$

On peut alors exprimer l'allongement de la surface, c'est-à-dire la différence entre sa longueur initiale (dx) et sa longueur actuelle (ds) par l'approximation suivante :

$$ds - dx = \frac{1}{2}\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{dx}\right)^2 \tag{3.32}$$

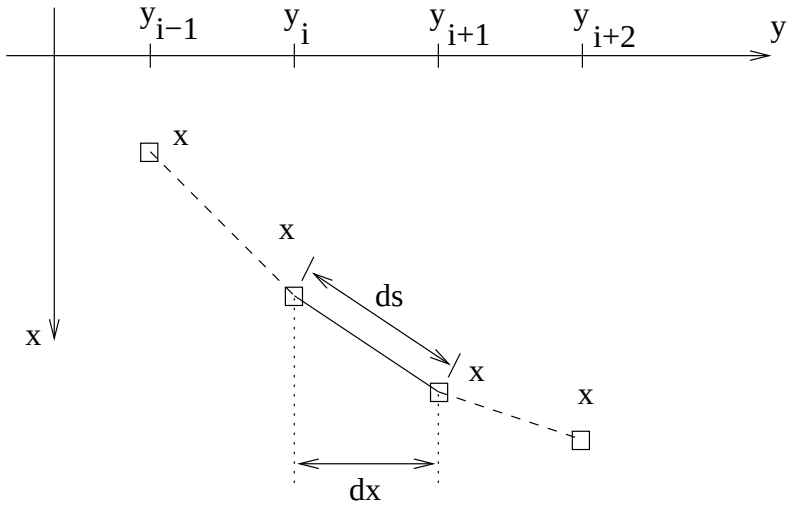


FIG. 3.13 – Géométrie de calcul du potentiel de la tension de surface

La force élastique est proportionnelle à l'allongement de la surface. L'énergie potentielle associée est alors :

$$E'_e = \frac{1}{2ldx^2}\left(x_{i+1} - x_i\right)^2 \tag{3.33}$$

où l est une constante représentant l'élasticité de la surface.

Si l'on considère les deux segments de surface autour de x_i et en prenant $dx = \Delta x$ (pas de maillage de l'algorithme FDTD), on a l'énergie potentielle totale élastique :

$$\begin{aligned} E_e &= \frac{1}{2l\Delta x^2}\left(\left(x_i - x_{i-1}\right)^2 + \left(x_{i+1} - x_i\right)^2\right) && (3.34)\\ &= \frac{1}{2l\Delta x^2}\left(2x_i^2 - 2x_i x_{i-1} + x_{i-1}^2 - 2x_i x_{i+1} + x_{i+1}^2\right) && (3.35) \end{aligned}$$

L'énergie potentielle totale du point d'abscisse x_i est donc :

$$E_t(x_i) = x_i + \frac{1}{2l\Delta x^2}\left(2x_i^2 - 2x_i x_{i-1} + x_{i-1}^2 - 2x_i x_{i+1} + x_{i+1}^2\right) \tag{3.36}$$

On pose :

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \tag{3.37}$$

$$H = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & & \cdots & & -1 & 2 \end{pmatrix} \tag{3.38}$$

et :

$$C = \Delta x^2 l \tag{3.39}$$

On peut alors mettre l'équation (3.36) sous la forme :

$$CE_t(x) = Cx + \frac{1}{2}x^T Hx \tag{3.40}$$

De plus, la surface doit reposer sur les particules. Si l'on note x_p les abscisses maximales des particules, cette condition s'écrit $x > x_p$. Nous cherchons donc à déterminer l'ensemble x des points de la surface minimisant l'énergie potentielle E_t tout étant supérieurs à x_p. Le problème que nous avons à résoudre est donc :

$$\begin{cases} min_x \ \left(Cx + \frac{1}{2}x^T Hx\right) \\ \qquad x > x_p \end{cases} \tag{3.41}$$

On reconnaît ici un problème de programmation quadratique sous contraintes. Nous le résolvons en utilisant la méthode de Gill et al. implémentée dans la librairie scientifique NAG [1].

3.3.3 Exemple de surfaces générées

Cet algorithme de génération lie fortement la rugosité de la surface à la présence des particules en ajoutant un paramètre supplémentaire que nous avons nommé élasticité. Lorsque la position et la taille des particules sont fixées, comme par exemple sur la Figure 3.14, la valeur de ce paramètre permet de contrôler la surface. Pour la valeur la plus faible, on retrouve un quasi-plan reposant sur quelques particules. A mesure que l'élasticité augmente, la surface interagit avec un nombre croissant de particules et sa forme devient de plus en plus complexe. Nous allons, dans les prochains paragraphes étudier la fonction d'auto-corrélation et la distribution des hauteurs pour tenter de comprendre l'évolution de la surface en fonction des paramètres de génération.

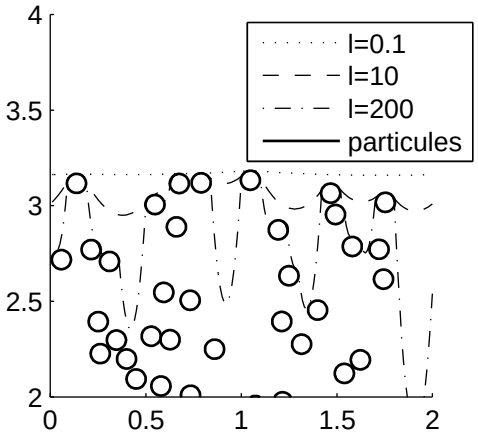


FIG. 3.14 – Génération d'un surface conforme

3.3.4 Caractéristique des surfaces

3.3.4.1 Changement d'échelle

Nous allons étudier les paramètres statistiques des surfaces générées avec un rayon des particules r_i fixe. Afin de pouvoir appliquer les résultats calculés dans ce cas pour des particules de rayon r'_i, nous allons effectuer un changement d'échelle sur l'équation (3.36) d'un facteur γ définit par :

$$\gamma = \frac{r'_i}{r_i} \tag{3.42}$$

L'équation (3.36) s'écrit alors :

$$E_t(x_i) = \frac{x_i}{\gamma} + \frac{\gamma^2}{2l\Delta x^2}\left(2\frac{x_i^2}{\gamma^2} - 2\frac{x_i x_{i-1}}{\gamma^2} + \frac{x_{i-1}^2}{\gamma^2} - 2\frac{x_i x_{i+1}}{\gamma^2} + \frac{x_{i+1}^2}{\gamma^2}\right) \tag{3.43}$$

$$= \frac{x_i}{\gamma} + \frac{1}{2l\Delta x^2}\left(2x_i^2 - 2x_i x_{i-1} + x_{i-1}^2 - 2x_i x_{i+1} + x_{i+1}^2\right) \tag{3.44}$$

Ainsi, si on pose $l' = \gamma l$, on trouve :

$$\gamma E_t(x_i) = x_i + \frac{1}{2l'\Delta x^2}\left(2x_i^2 - 2x_i x_{i-1} + x_{i-1}^2 - 2x_i x_{i+1} + x_{i+1}^2\right) \tag{3.45}$$

On retrouve la même équation à minimiser que l'équation (3.36), et donc la même surface générée avec une homothétie d'un facteur γ. Ce résultat permet de ne faire l'étude des propriétés statistiques que pour une taille de particules et de pouvoir transposer ces résultats pour toutes les tailles possibles.

3.3.4.2 Distribution des hauteurs

La première caractéristique que nous allons étudier est la distribution des hauteurs des surfaces générées. Pour cela, nous fixons la taille des particules à $\lambda_0/20$, la fraction volumique à 10% et nous faisons varier l'élasticité l. Nous pouvons voir, sur la Figure 3.15, que la distribution des hauteurs semble suivre une loi de Weibull avec une augmentation très forte au départ suivi d'une décroissance beaucoup plus lente. Nous allons donc chercher à la modéliser avec la fonction suivante :

$$P(h) = \alpha\beta^{-\alpha}h^{\alpha-1}\exp\left(-\frac{h}{\beta}\right)^{\alpha} \tag{3.46}$$

où α est le paramètre de forme et β le paramètre d'échelle de la distribution de Weibull. On peut vérifier, sur la Figure 3.15 que l'on représente parfaitement la répartition des hauteurs quelque soit le paramètre d'élasticité utilisé. Ce résultat est très important : pour ce type de surface on ne peut donc pas faire l'hypothèse fréquemment utilisée d'une distribution des hauteurs gaussiennes.

Les paramètres α et β ne sont pas très explicites pour permettre l'étude de la surface. Nous allons utiliser la valeur moyenne et la variance plus simple pour la compréhension de l'évolution de la rugosité. Ils s'écrivent :

$$\mu = \beta\Gamma(1+\alpha^{-1}) \tag{3.47}$$

$$\sigma^2 = \beta^2[\Gamma(1+2\alpha^{-1}) - \Gamma^2(1+\alpha^{-1})] \tag{3.48}$$

La Figure 3.16 représente l'évolution de la hauteur moyenne μ et de la variance σ en fonction de l'élasticité pour trois fractions volumiques de particules. On observe, tout d'abord, que la fraction volumique à une influence très importante sur la rugosité de la surface générée. Ainsi, son augmentation réduira drastiquement les hauteurs des rugosités de la surfaces. En effet, on augmente alors le nombre de particules sur lesquelles la surface repose. L'élasticité permet de contrôler la hauteur des rugosités. Tout d'abord, la croissance de μ et de σ en fonction de l'élasticité est très rapide (pour $l < 50$) et croit ensuite beaucoup plus lentement. En effet, cette augmentation permet à la surface de reposer sur des particules plus nombreuses et de la stabiliser. La transition est d'autant plus rapide que la fraction volumique est élevée. Ainsi, pour une fraction volumique de 30%, les paramètres μ et σ deviennent presque constants lorsque l'élasticité est supérieure à 50.

3.3.4.3 Fonction d'auto-corrélation

Nous allons, de même que pour la distribution des hauteurs, commencer par étudier la fonction d'auto-corrélation pour un rayon des particules à $\lambda_0/20$, une fraction volumique

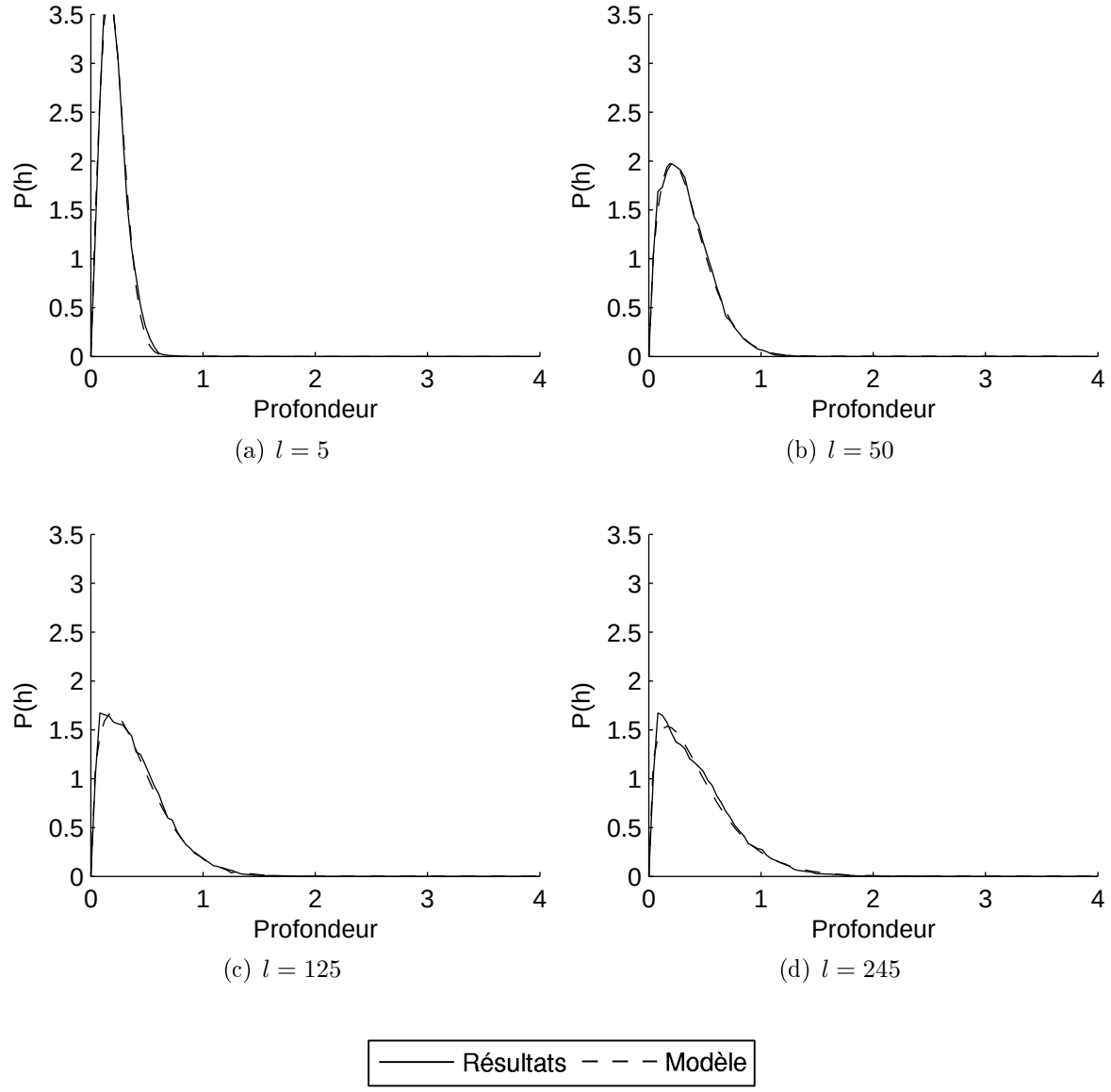
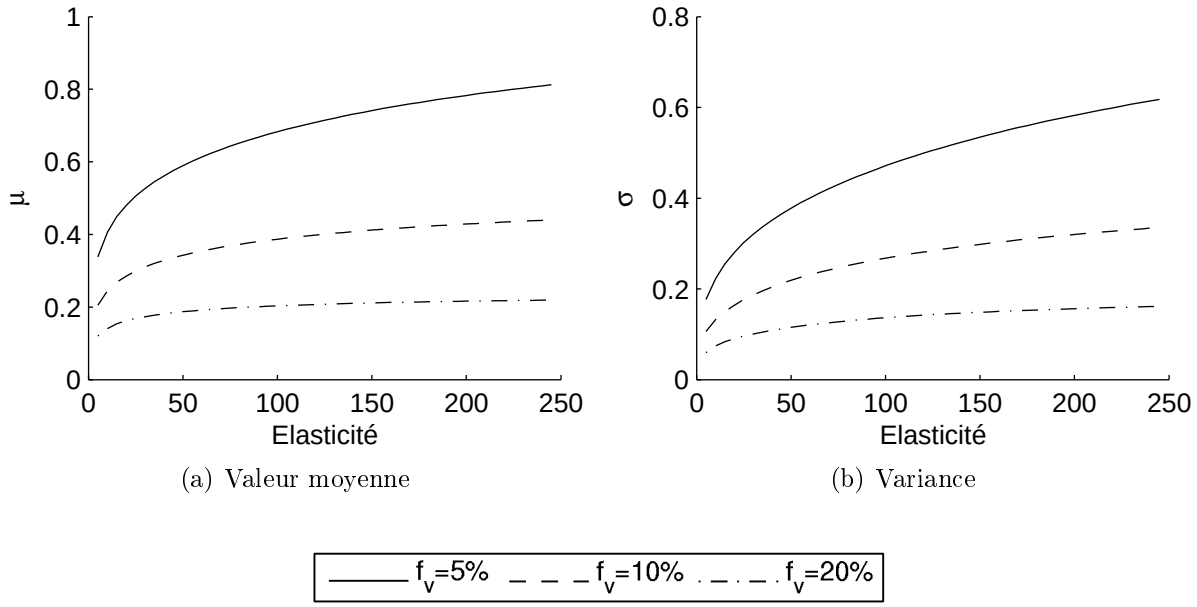


FIG. 3.15 – Distribution des hauteurs calculée numériquement pour différentes valeurs de l'élasticité ($l = 5$, $l = 50$, $l = 125$ et $l = 245$) pour des particules de taille $\lambda_0/20$ et une fraction volumique de 10%.



(a) Valeur moyenne (b) Variance

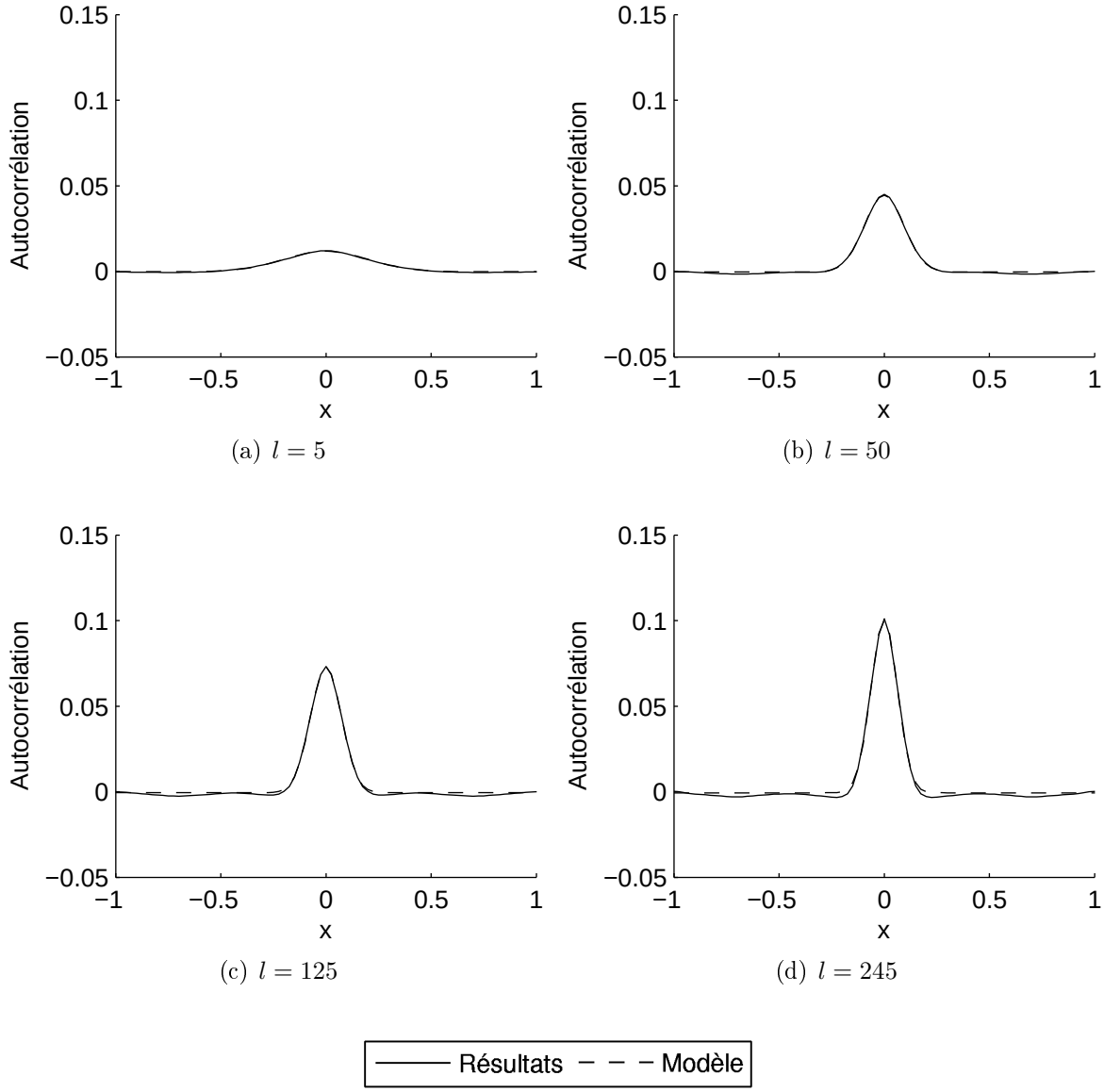
FIG. 3.16 – Valeur moyenne μ et variance σ pour des surfaces générées avec des particules de rayon $\lambda_0/20$ et différentes fractions volumiques (5%, 10% et 20%) en fonction de l'élasticité.

à 10% et nous faisons varier l'élasticité l. Nous pouvons voir, sur la Figure 3.17, que la fonction d'auto-corrélation est gaussienne pour toutes les élasticités testées. Nous allons donc la modéliser par :

$$C(x) = h_{rms}^2 exp\left(-\frac{x^2}{l_c^2}\right) \tag{3.49}$$

La Figure 3.18 présente l'évolution de la hauteur quadratique moyenne h_{rms} et de la longueur de corrélation l_c pour plusieurs fractions volumique en fonction de l'élasticité. On observe que la hauteur quadratique moyenne h_{rms} a le même comportement que la hauteur moyenne μ déterminée précédemment bien qu'elle reste constamment plus faible. Ainsi, on observe qu'elle diminue avec la fraction volumique et qu'elle augmente avec l'élasticité. La longueur de corrélation présente un comportement inverse. En effet, elle commence par diminuer fortement avec l'élasticité. Car plus l'élasticité est faible, plus les particules sur lesquelles reposent la surface sont éloignées ce qui augmente la longueur de corrélation. De même on observe une diminution des longueurs de corrélation avec la fraction volumique. Les deux effets jouent donc en sens contraire, et un accroissement de h_{rms} est toujours combiné avec une diminution de la longueur de corrélation l_c. Les surfaces résultantes sont donc de plus en plus difficiles à traiter à mesure que l'élasticité augmente.

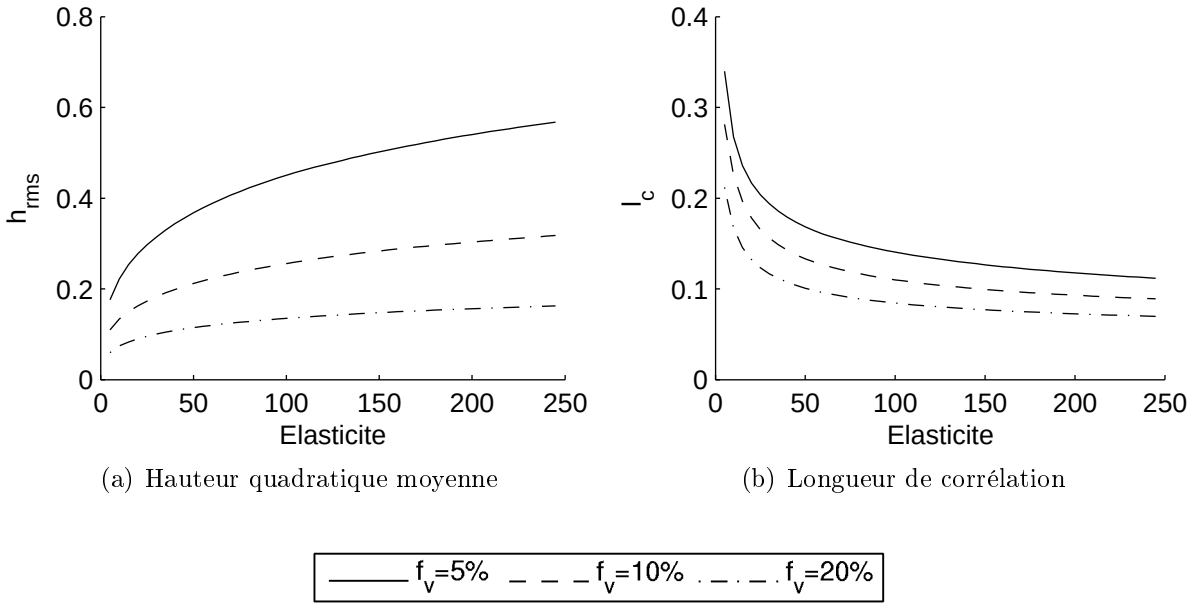
On remarque que, comme attendu, h_{rms} et σ sont identiques pour une élasticité fixée.



(a) $l = 5$ (b) $l = 50$

(c) $l = 125$ (d) $l = 245$

FIG. 3.17 – Fonction d'auto-corrélation pour différentes valeurs de l'élasticité ($l = 5$, $l = 50$, $l = 125$ et $l = 245$) pour des particules de taille $\lambda_0/20$ et une fraction volumique de 10%.



(a) Hauteur quadratique moyenne (b) Longueur de corrélation

FIG. 3.18 – Hauteur quadratique moyenne h_{rms} et longueur de corrélation l_c pour des surfaces générées avec des particules de rayon $\lambda_0/20$ et différentes fractions volumiques (5%, 10% et 20%) en fonction de l'élasticité.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons commencé par décrire l'algorithme de génération de surface de distribution de hauteur gaussienne à partir de leur fonction d'auto-corrélation. Nous avons présenté les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle. Nous avons ensuite étudié l'effet de la discrétisation utilisée dans l'algorithme FDTD. Nous avons montré que nous ne pouvions représenter exactement les variations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle car la discrétisation coupe les hautes fréquences spatiales.

Puis, nous avons ensuite décrit l'algorithme de Metropolis pour la génération des positions des particules. Nous avons présenté le modèle des sphères dures et un modèle physique plus complexe (attraction en $1/r^2$). Nous avons présenté un outil de représentation statistique pour l'étude du positionnement des particules : la fonction de corrélation de paires. Nous avons validé cette approche en comparant le résultat du calcul numérique de cette fonction avec le modèle analytique de Percus-Yevick en géométrie tridimensionnelle.

Finalement, nous avons présenté l'algorithme utilisé pour générer des surfaces originales corrélées à la position des particules. Elles seront utilisées dans l'étude du couplage surface volume effectuée chapitre 6.

Deuxième partie

Étude de la diffusion optique par des matériaux hétérogènes rugueux

Chapitre 4

Diffusion par une surface rugueuse

4.1 Introduction

L'étude de milieu homogène rugueux est souvent effectuée en considérant deux modèles de surfaces ayant des distributions de hauteur gaussiennes :

- les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne ;
- les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle.

Elles permettent de couvrir un large domaine d'applications de l'optique à la télédétection radar. D'autres modèles de surfaces sont parfois utilisés, comme les surfaces fractales (dont les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle sont un cas particulier) ou bien les modèles à deux échelles.

L'étude de la diffusion surfacique est particulièrement importante pour notre approche de modélisation de la diffusion par des matériaux hétérogènes rugueux. En effet, notre méthode permet de traiter sans distinction la surface et le volume et chacun de ces deux aspects doit être validé séparément. Pour cela, nous allons comparer les résultats obtenus avec l'algorithme FDTD aux résultats d'une autre méthode numérique : la Méthode des Moments (MoM). Nous nous limiterons aux surfaces de fonctions d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle. Le cas exponentiel n'a jamais été traité à notre connaissance.

Dans la première partie de ce chapitre, nous commencerons par confronter les résultats obtenus pour le calcul de la diffusion par une surface déterministe par les deux méthodes. Puis, nous continuerons sur la moyenne de l'intensité diffusée par un ensemble de réalisations. Cette partie nous permettra de nous assurer de la validité de l'ensemble de notre chaîne de modélisation et comparer les résultats obtenus par les deux approches dans des cas difficiles.

Dans la seconde partie de ce chapitre, nous étudierons le comportement de la diffusion surfacique. Notamment, nous examinerons l'influence des différents paramètres statistiques représentatifs des rugosités de la surface comme la hauteur quadratique moyenne h_{rms}, la longueur de corrélation l_c ou nature de la fonction d'auto-corrélation.

4.2 Géométrie du problème

Nous cherchons à calculer le diagramme de diffusion en champ lointain par un milieu homogène semi-infini. La Figure 4.1 présente la géométrie de calcul utilisée. Nous considérons une interface rugueuse (2) séparant le milieu hôte homogène (1) d'indice n_h de l'environnement extérieur (espace libre). Le milieu est éclairé par un faisceau gaussien polarisé d'angle d'incidence θ_i par rapport à la normale.

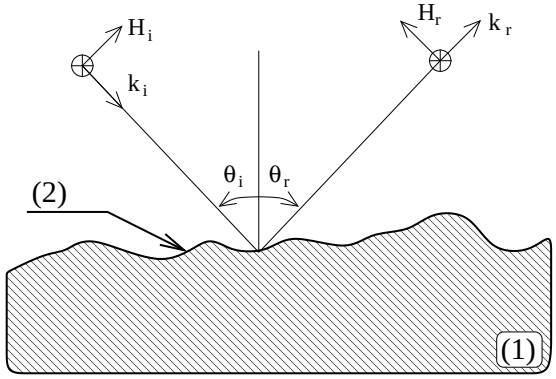


FIG. 4.1 – Géométrie du problème pour la diffusion par une surface rugueuse. (1) représente le milieu hôte homogène, (2) la surface rugueuse, k_i représente le vecteur d'onde incident et k_r le vecteur d'onde réfléchi. L'angle d'incidence est θ_i et l'angle d'observation est θ_r.

La surface rugueuse pourra être décrite par une fonction d'auto-corrélation gaussienne ou exponentielle. Cette étude utilise un algorithme de Monte Carlo dont nous allons rappeler les principales étapes :
Étape 1 : Générer une surface rugueuse avec une fonction d'auto-corrélation gaussienne ou exponentielle ;
Étape 2 : Calculer le champ lointain rayonné par cet échantillon avec l'algorithme FDTD ;
Étape 3 : Répéter l'étape 1 et 2 afin d'obtenir suffisamment d'échantillons pour avoir la précision requise ;
Étape 4 : Faire une moyenne des résultats et séparer le champ cohérent du champ incohérent.

Dans la suite de ce manuscrit, nous utiliserons ks et kL afin d'exprimer les caractéristiques statistiques de la surface en fonction de la longueur d'onde λ. Ces grandeurs se déduisent de h_{rms} et l_c par :

$$ks = \frac{2\pi}{\lambda} h_{rms} \tag{4.1}$$

$$kL = \frac{2\pi}{\lambda} l_c \tag{4.2}$$

4.3 Introduction à la diffusion par une surface rugueuse

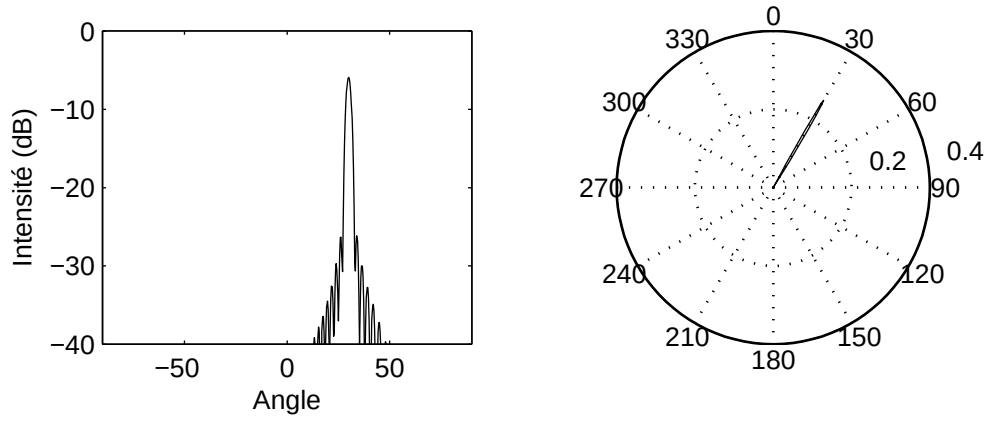
4.3.1 Généralités

La diffusion par une surface rugueuse de fonction d'auto-corrélation gaussienne ou exponentielle dépend des paramètres ks et kL. La Figure 4.2 présente le comportement du champ lointain rayonné en fonction de la rugosité pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle éclairées par un faisceau gaussien sous une incidence de $\theta_i = 30^o$ (les conventions angulaires sont données sur la Figure 4.1). Ainsi, la direction de réflexion spéculaire du faisceau est $\theta_r = 30^o$ et la direction de rétro-propagation $\theta_r = -30^o$. La Figure 4.2(a) présente les résultat de la réflexion par un plan : le champ incident est alors entièrement réfléchi dans la direction $\theta_r = 30^o$. Pour une rugosité relativement importante (Figure 4.2(b)), on observe une composante diffuse centrée sur la direction $\theta_r = 30^o$. Le cohérent (partie non diffusée) est toujours visible mais est devenu plus faible. Finalement, pour les surfaces les plus rugueuses (Figure 4.2(c)), la composante cohérente du champ diffusé a disparu. La diffusion n'est plus clairement orientée et couvre tout le domaine angulaire supérieur. Sur ces trois exemples, on peut remarquer que la diffusion par une surface rugueuse et sa couverture angulaire croissent à mesure que ks croît.

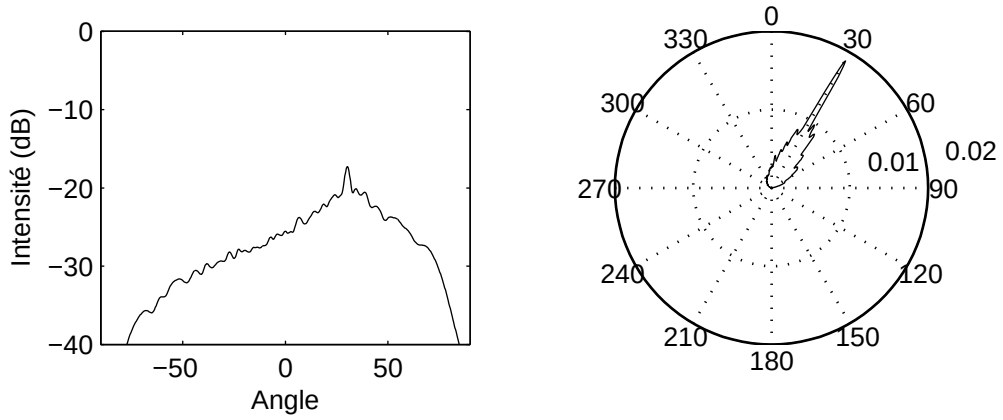
En plus des résultats en champ lointain, la FDTD nous permet d'accéder aux valeurs du champ dans le domaine de calcul. L'augmentation du champ incohérent avec le paramètre ks est visible sur la Figure 4.3. Le trait blanc représente le plan moyen et le trait blanc pointillé h_{rms}. On peut ainsi observer une augmentation du champ dans la zone comprise entre $-h_{rms}$ et h_{rms} traduisant un renforcement du aux diffusions. Il est d'autant plus fort et étendu que la rugosité est importante.

4.3.2 Algorithme de Monte Carlo

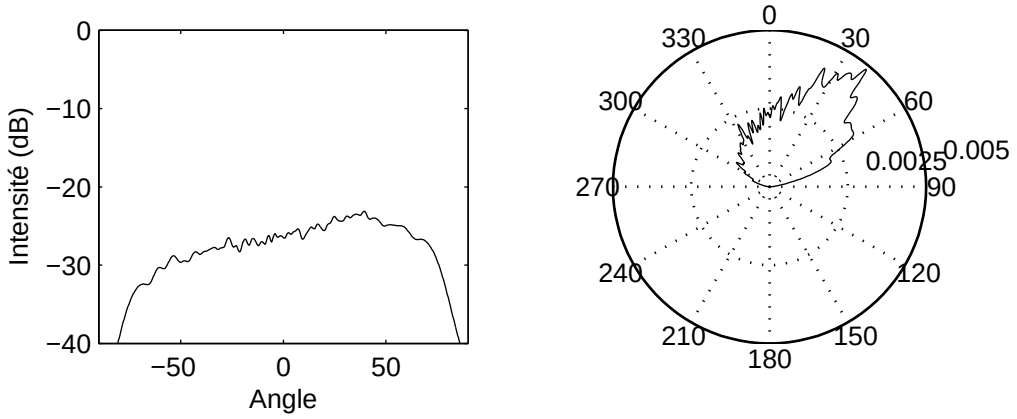
Nous avons vu que notre méthode est basée sur un algorithme de Monte Carlo. Dans les premières étapes de cet algorithme, nous calculons le diagramme de diffusion pour de nombreux échantillons de la surface rugueuse. La Figure 4.4 représente chaque résultat du champ lointain rayonné en fonction de l'angle de diffraction et un angle d'incidence de 30^o par chacune des 100 réalisations utilisée pour générer la Figure (b). La surface est de fonction d'auto-corrélation exponentielle avec des paramètres de génération $ks = 1$ et $kL = 2\pi$. Chaque réalisation de la surface rugueuse donne une figure de tavelure différente due aux interférences constructives et destructives du champ rayonné. Ainsi, on observe de fortes variations de l'intensité en fonction de l'angle d'observation sauf dans la direction de réflexion ($\theta = -30^o$) où la présence du pic spéculaire permet de garder une valeur stable. La dernière étape de l'algorithme moyenne l'ensemble de ces résultats pour obtenir un diagramme de diffusion représentatif du comportement du matériau (comme sur la Figure 4.2).



(a) $ks = 0$ et $kL = 2\pi$



(b) $ks = 1$ et $kL = 2\pi$



(c) $ks = 1.5$ et $kL = 2\pi$

FIG. 4.2 – Diffusion par une surface rugueuse pour trois échelles de rugosités ($ks = 0,\ 1,\ 1.5$ et $kL = 2\pi$) pour une fonction d'auto-corrélation exponentielle et une incidence de 30^o. La courbe de gauche représente la diffusion avec une échelle logarithmique et la figure de droite la diffusion en échelle linéaire en coordonnées polaires.

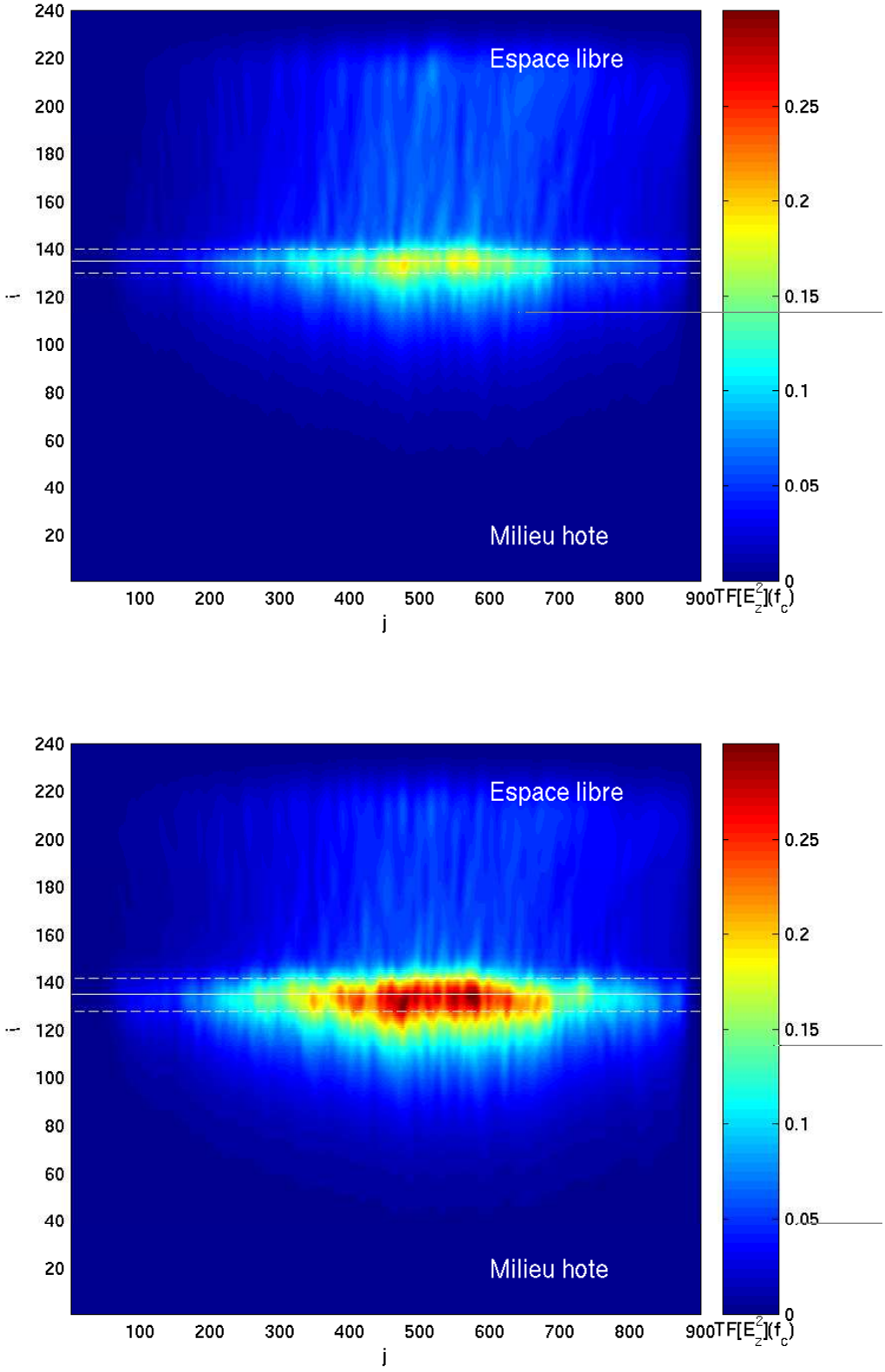


FIG. 4.3 – Champ proche pour une surface rugueuse de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour deux échelles de rugosités ($ks = 1$ et $ks = 1.5$) en polarisation TM. Les échelles sont en mailles.

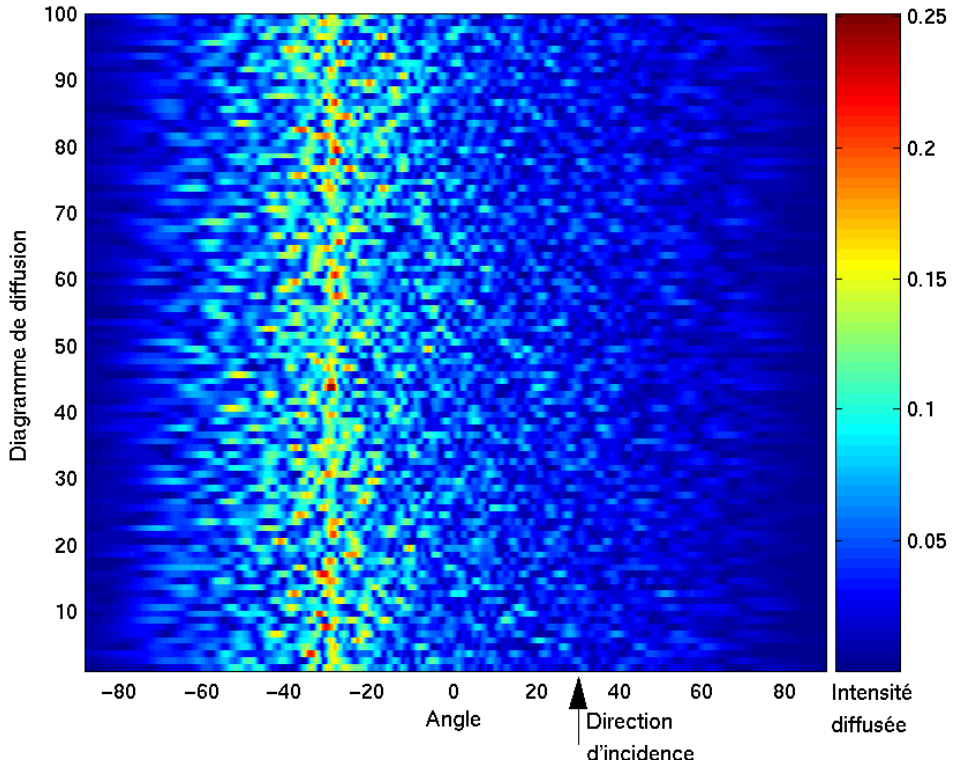


FIG. 4.4 – Amplitude diffusée pour chacune des réalisations pour le cas $ks = 1$ pour une surface rugueuse de fonction d'auto-corrélation exponentielle

Ainsi, pour chaque angle de diffusion θ_r, nous avons l'ensemble des valeurs de l'intensité rayonnée par chaque surface utilisée. Ogilvy *et al* [97] montrent que, lorsque le champ diffusé est purement incohérent, le module de l'amplitude diffusée suit une distribution de Rayleigh pour toutes les directions de diffusion. La probabilité que l'amplitude $I(\theta)$ soit située entre une valeur quelconque réelle S et $S + dS$ est donnée par :

$$p(S)dS = \frac{S}{\delta_S^2} exp(-S^2/2\delta_S^2)dS \tag{4.3}$$

Cette relation dépend uniquement du paramètre δ_S donnant la valeur S pour laquelle la distribution est maximale. La moyenne de la distribution est alors donnée par :

$$\langle I(\theta) \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \delta_s \tag{4.4}$$

Ces relations restent valables pour des surfaces faiblement rugueuses dans toutes les directions de diffusion incohérente et sont fausses pour le champ cohérent. En effet, la phase doit pouvoir prendre des valeurs aléatoires entre 0 et 2π. La Figure 4.5 présente la distribution des amplitudes diffusées pour un des angles de diffusion (60^o) et la loi de Rayleigh correspondante.

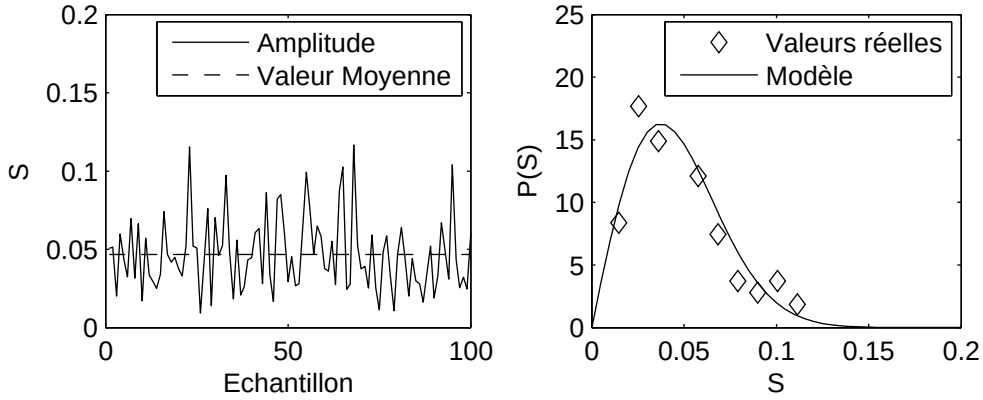


FIG. 4.5 – Amplitude diffusée dans la direction $\theta = 60^o$ pour une surface de paramètres $ks = 1$ et $kL = 2\pi$ en fonction de l'échantillon (à gauche) et densité de probabilité des amplitudes diffusées pour cet angle (à droite)

Cette loi nous donne la distribution des points autour de la valeur finale. Nous allons maintenant chercher à caractériser la convergence de la moyenne vers sa limite. Nous définissons $I_N(\theta)$ comme la valeur de l'intensité moyennée pour la N^{eme} réalisation. C'est-à-dire, en appelant $I(n, \theta)$ l'intensité diffractée par l'échantillon numéro n dans la direction θ :

$$I_N(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} I(n, \theta) \tag{4.5}$$

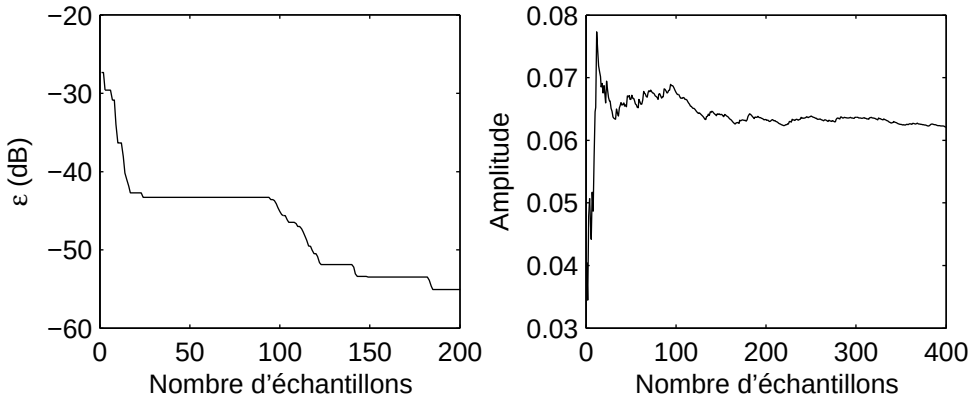


FIG. 4.6 – Valeurs de ϵ (erreur absolue) en fonction du nombre d'échantillons considérés à gauche et évolution de la valeur de la moyenne en fonction du nombre d'échantillons à droite pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle de paramètre $ks = 1.5$ et $kL = 2\pi$ et un angle d'observation de 50^o.

La limite de la suite I_N est appelée I. Nous ne pouvons pas directement calculer l'évolution de $|I_N - I|$ car I ne sera jamais connue mais seulement approchée. Il s'agit d'une limite non atteinte par l'algorithme de Monte Carlo. Nous devons donc définir un autre critère pour mesurer la vitesse de convergence de la suite. Nous savons que si une suite I_n converge dans $\mathbb{R}$ alors (suite de Cauchy) :

$$\forall \epsilon \in \mathbb{R}, \exists N \in \mathbb{N}, \forall p, q > N, |I_p - I_q| < \epsilon \tag{4.6}$$

Notre critère est basé sur cette définition. En effet, elle permet de s'affranchir de la limite I de la suite que nous cherchons à caractériser. Nous allons supposer que la suite I_n converge, alors pour une valeur N fixée représentant le nombre d'échantillons utilisés pour la moyenne, nous définissons la précision de notre calcul ϵ par :

$$\epsilon = \max_{p,q>N} |I_p - I_q| \tag{4.7}$$

La Figure 4.6 présente les variations de ϵ définies dans l'équation (4.7) en fonction du nombre d'échantillons utilisés dans le calcul de la moyenne pour une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Ce critère suppose que l'on dispose de beaucoup plus de N échantillons pour pouvoir connaître l'erreur. Ainsi, sur la Figure 4.6, 400 échantillons sont utilisés pour représenter l'évolution de l'erreur absolue ϵ sur 200 échantillons.

On observe que la précision augmente très rapidement au début du processus puis devient de plus en plus difficile à obtenir. Ainsi, si 5 échantillons sont nécessaires pour gagner 5 dB de précision au départ, 70 échantillons sont nécessaires pour passer d'une précision de -43 dB à -46 dB. La précision des calculs a un coût numérique rapidement important avec un processus de Monte Carlo. On retrouve la vitesse de convergence obtenue avec le théorème central limite $(1/\sqrt{N})$.

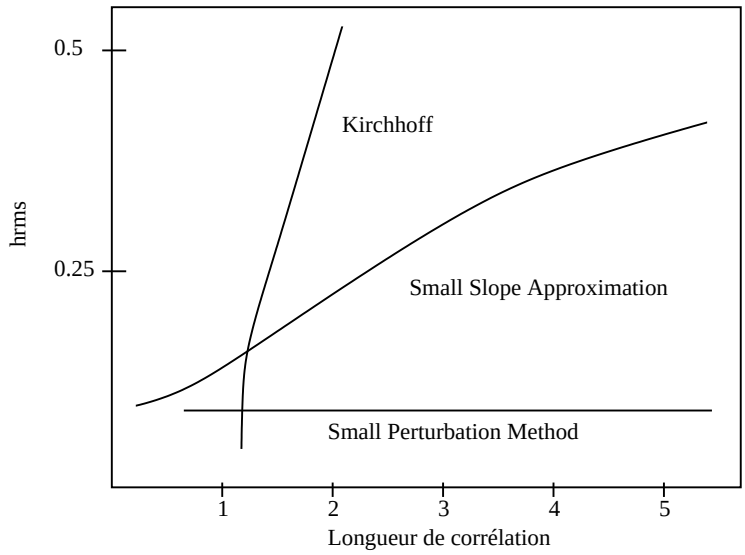


FIG. 4.7 – Domaine de validité de la Small Slope Approximation (SSA), Small Perturbation Method (SPM) et Kirchhoff pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne en fonction de la longueur de corrélation et de h_{rms}.

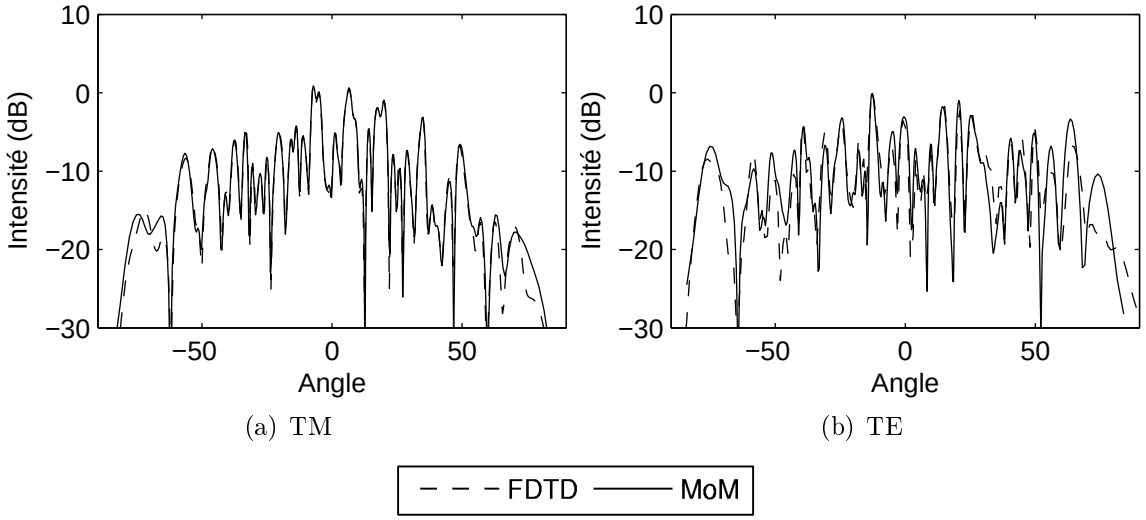
On observe des plateaux durant lesquels la précision des calculs ne s'améliore pas en fonction du nombre d'échantillons utilisés, par exemple entre les échantillons 25 et 94. Il s'agit d'un phénomène local et un autre angle d'observation donnerait des plateaux différents. L'augmentation de la précision mesurée par cette méthode n'est donc pas continue sur l'ensemble du diagramme de diffusion.

4.4 Résultats et comparaisons

4.4.1 Comparaisons entre la Méthode des Moments et la FDTD

4.4.1.1 Résultats

Il s'agit, dans un premier temps, de valider notre algorithme sur des cas tests. La géométrie bidimensionnelle et les dimensions des rugosités (domaine optique) rendent difficile une validation expérimentale. Ainsi, nous allons comparer nos résultats avec une autre méthode numérique : la Méthode des Moments (MoM). Cette comparaison est effectuée pour des surfaces de fonctions d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle et pour des tailles de rugosités qui peuvent sortir du domaine de validité des méthodes asymptotiques (par exemple pour $ks > 0.5$ avec $kL = 2\pi$ pour la fonction d'auto-corrélation exponentielle). Le domaine de validité des trois principales méthodes asymptotiques est précisé Figure 4.7.



(a) TM (b) TE

FIG. 4.8 – Comparaison entre la MoM et la FDTD sur la diffusion par une réalisation de surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne pour $ks = 2$ et $kL = 2\pi$. Le milieu est d'indice $n_h = 1.63$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.

Comparaisons relatives à une réalisation de la surface rugueuse Dans une première étape, les deux méthodes sont confrontées sur le calcul de la diffusion par une surface déterministe. Pour cela, le traitement effectué par le deux codes pour la résolution du problème ne doit pas présenter de différences importantes.

Il faut tout d'abord un faisceau gaussien identique afin d'avoir la même zone éclairée sur la surface rugueuse. En effet, c'est cette zone qui va fortement interagir. Les interférences résultantes vont former la figure de tavelure. Cette condition est donc très importante. Or, les méthodes d'insertion du champ incident ne sont pas identiques. En effet le faisceau gaussien n'est pas inséré au même endroit et diverge légèrement : la FDTD utilise une surface d'insertion du champ incident située au dessus de la surface rugueuse tandis qu'il est inséré au niveau de celle-ci pour la MoM.

De plus, la représentation de la surface doit être la même dans les deux méthodes. Or la FDTD utilise une approximation en marche d'escalier alors que la MoM utilise des segments de droite pour représenter la surface.

Nous chercherons, dans cette partie, un domaine de validation croisé au delà duquel les différences de traitements effectués par les deux algorithmes aboutiront à des résultats différents. Pour cette étude les surfaces utilisées sont suffisamment grandes (80λ) pour avoir une figure de tavelure fine. Celle-ci est donc le résultat de nombreuses interactions entre les champs diffusés et est difficile à modéliser.

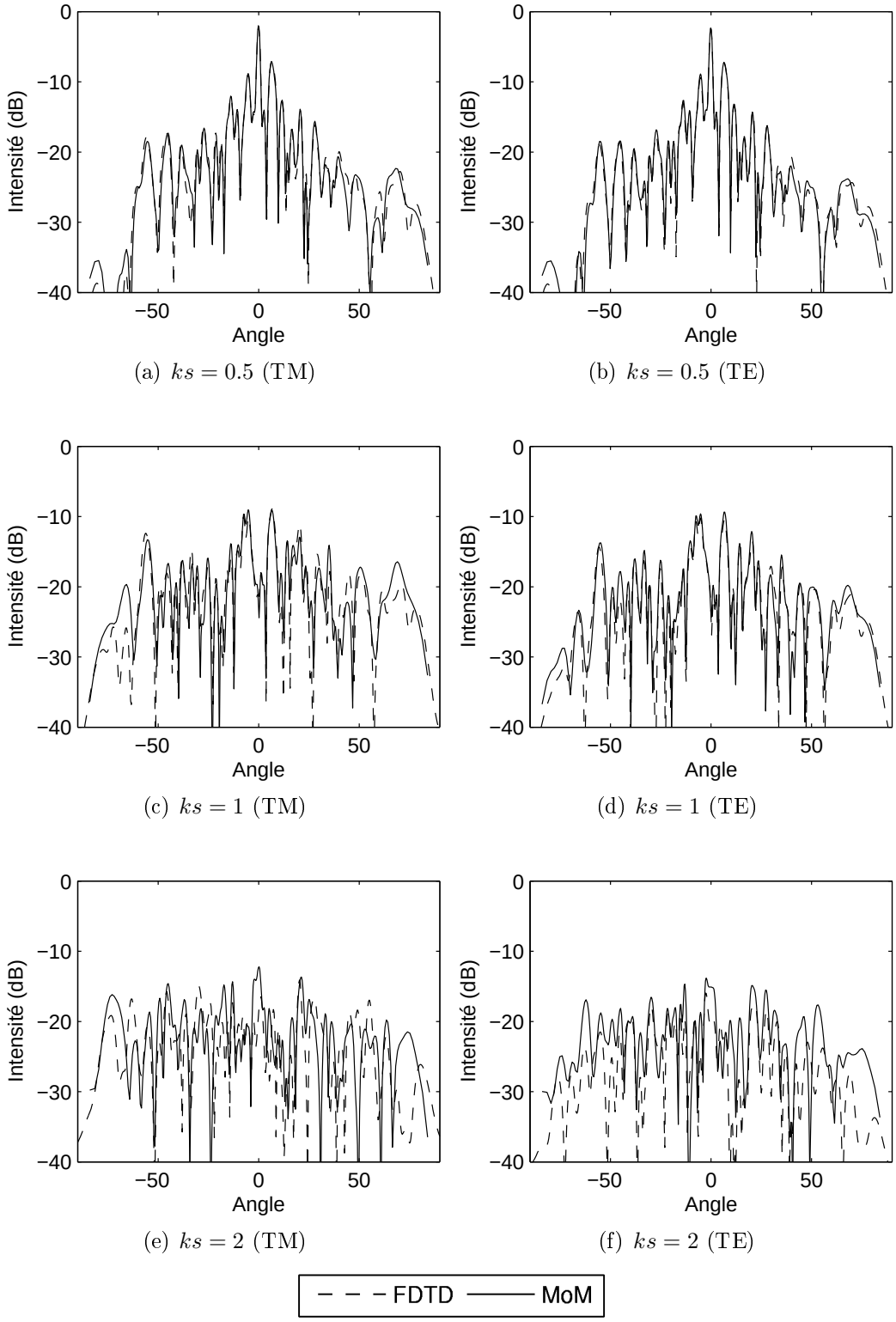
Nous commençons par la diffusion par des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètre $ks = 2$ et $kL = 2\pi$. Le milieu est maillé à $\lambda_0/30$ et est éclairé en incidence normale ($\theta_i = 0^o$). Ce calcul est en dehors du domaine de validité des méthodes asymptotiques les plus habituelles. Dans ce cas, les variations de la hauteur de la sur-

face sont assez lentes par rapport au maillage et les deux méthodes donnent des résultats très proches dans les deux polarisations (Figure 4.8). On remarque de légères différences pour les angles de diffusion les plus forts qui peuvent être attribuées à une plus grande sensibilité du calcul aux problèmes numériques déjà évoqués (fuites sur la surface de Huygens, réflexions parasites en FDTD par exemple). Globalement, la figure de tavelure est parfaitement représentée avec la FDTD et la Méthode des Moments. Ces deux méthodes peuvent donc être utilisées comme méthodes de référence pour ce type de problème.

Nous poursuivons notre étude avec des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle (Figure 4.9). Celles-ci font apparaître des oscillations de petite échelle et sont donc très difficiles à modéliser. Le pas de maillage est toujours $\lambda_0/30$ et l'incidence normale. Lorsque les rugosités sont faibles ($ks = 0.5$), les deux méthodes donnent un résultat identique dans les deux polarisations. Le spéculaire est encore présent et important. Lorsque la rugosité augmente ($ks = 1$), de légères différences apparaissent entre les méthodes notamment pour les grands angles. Les deux polarisations commencent à présenter un comportement différent. Finalement, pour des surfaces très rugueuses ($ks = 2$), les résultats donnés par les deux méthodes sont différents sur l'ensemble du domaine angulaire. Les intensités diffusées n'ont ni les mêmes amplitudes ni les mêmes variations.

Ce comportement spécifique à la diffusion par des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle est sans doute dû à la représentation différente de la surface par les deux méthodes. Ainsi, la FDTD utilise une approximation en marche d'escalier et les petites rugosités sont modélisées par des sauts de plusieurs mailles. La surface est alors une succession de cheminées étroites. La MoM utilise une approximation différente dans laquelle les points de la surfaces sont reliés par des segments. Afin de pouvoir mieux visualiser le problème traité par les deux méthodes, nous avons représenté sur la Figure 4.10 et sur la Figure 4.11 le maillage FDTD et la surface sous forme de segment pour deux ks différents et pour des surfaces de fonctions d'auto-corrélation gaussienne ou exponentielle. Dans le premier cas ($ks = 0.5$), les deux approches donnent des surfaces semblables et le calcul de la diffusion donne des résultats identiques. Néanmoins, pour un $ks = 2$, on observe des différences dans le traitement de la surface pour la fonction d'auto-corrélation exponentielle alors que les surfaces restent semblables pour une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne. Ainsi, les résultats obtenus en diffusion présentent des différences significatives pour les surfaces d'auto-corrélation exponentielle mais restent identiques pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne.

Stabilité des résultats Lorsque nous doublons le pas de discrétisation en FDTD en effectuant une interpolation linéaire sur les points de la surface rugueuse, le résultat reste inchangé comme on peut le voir sur la Figure 4.12. On observe néanmoins localement (par exemple à 41^o) des différences supérieures à 2 dB entre les deux courbes. Cependant, on peut considérer que le résultat obtenu par FDTD est donc stable en fonction du pas

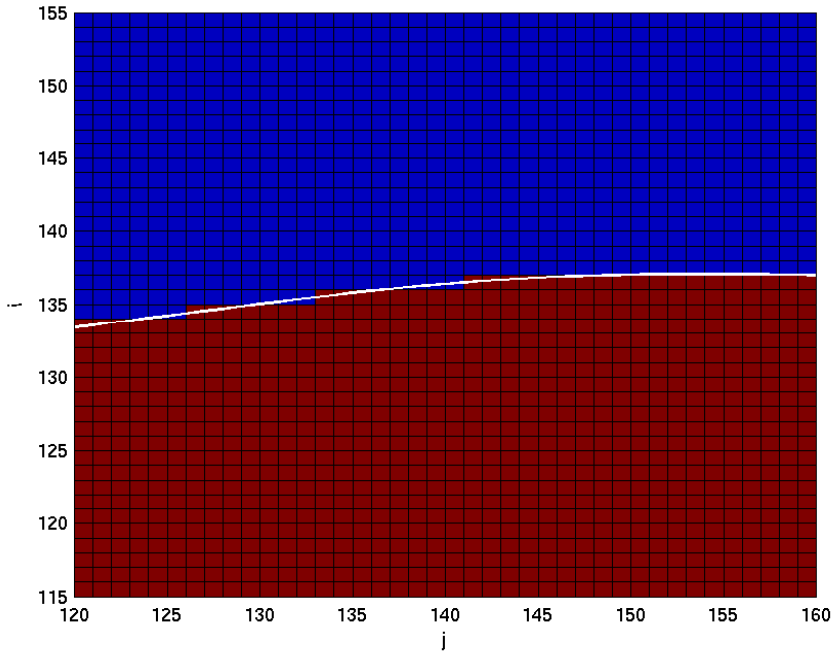


(a) $ks = 0.5$ (TM) (b) $ks = 0.5$ (TE)

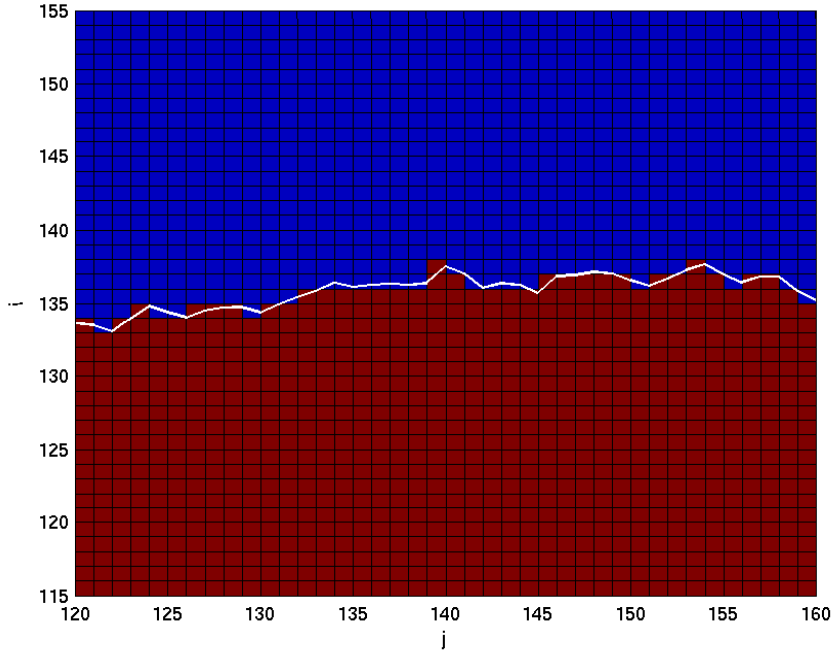
(c) $ks = 1$ (TM) (d) $ks = 1$ (TE)

(e) $ks = 2$ (TM) (f) $ks = 2$ (TE)

FIG. 4.9 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur la diffusion par une réalisation d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 0.5$ (a et b), $ks = 1$ (c et d), $ks = 2$ (e et f) et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM (figures de gauche) et TE (figures de droite). Le milieu est d'indice $n_h = 1.63$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.

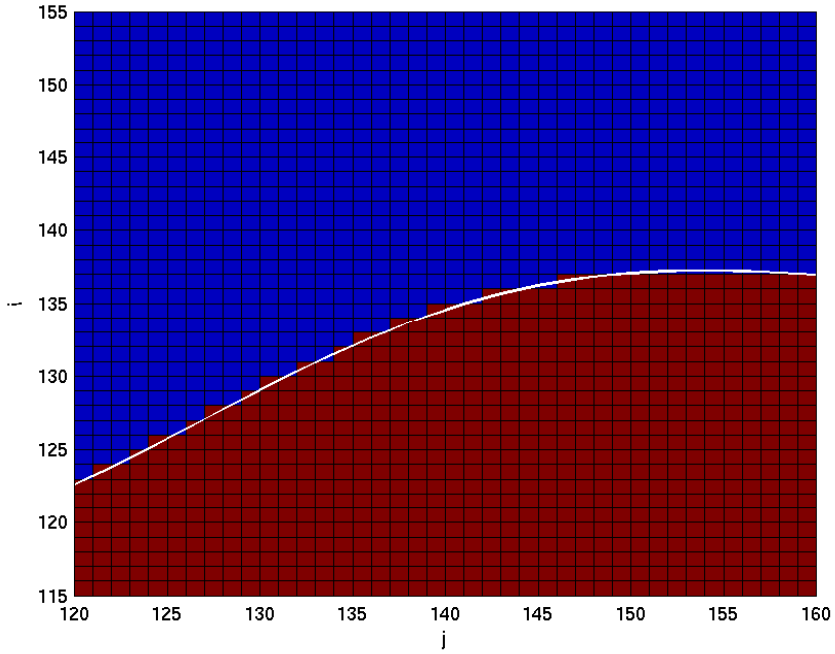


(a) Autocorrélation gaussienne

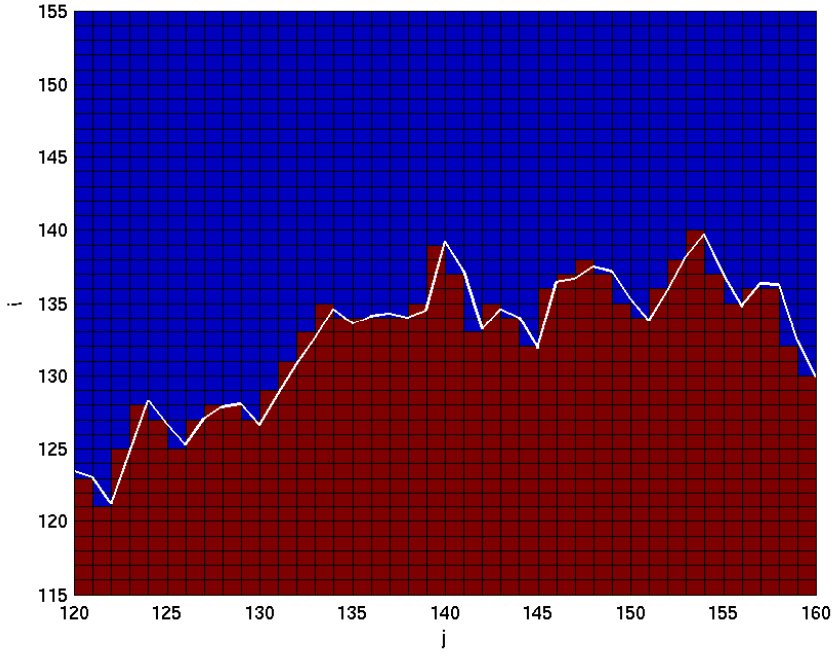


(b) Autocorrélation exponentielle

FIG. 4.10 – Traitement de la surface en FDTD (couleur rouge pour le milieu hôte et bleue pour l'espace libre) et avec la MoM (fin trait blanc) pour une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle pour $ks = 0.5$ et $kl = 2\pi$ et pour un pas de maillage de $\lambda_0/30$. Les échelles sont en mailles.



(a) Autocorrélation gaussienne



(b) Autocorrélation exponentielle

FIG. 4.11 – Traitement de la surface en FDTD (couleur rouge pour le milieu hôte et bleue pour l'espace libre) et avec la MoM (fin trait blanc) pour une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle pour $ks = 2$ et $kl = 2\pi$ et pour un pas de maillage de $\lambda_0/30$. Les échelles sont en mailles.

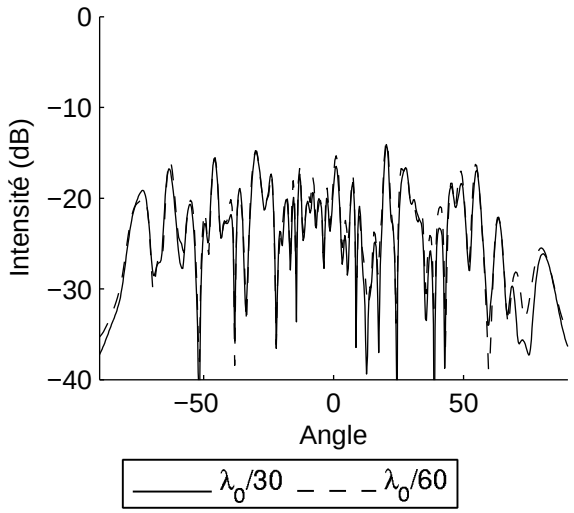


FIG. 4.12 – Diffusion par une surface exponentielle de paramètre $ks = 2$ et $kL = 2\pi$ éclairée en incidence normale par la FDTD pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$ et de $\lambda_0/60$.

de discrétisation lorsque la surface reste identique.

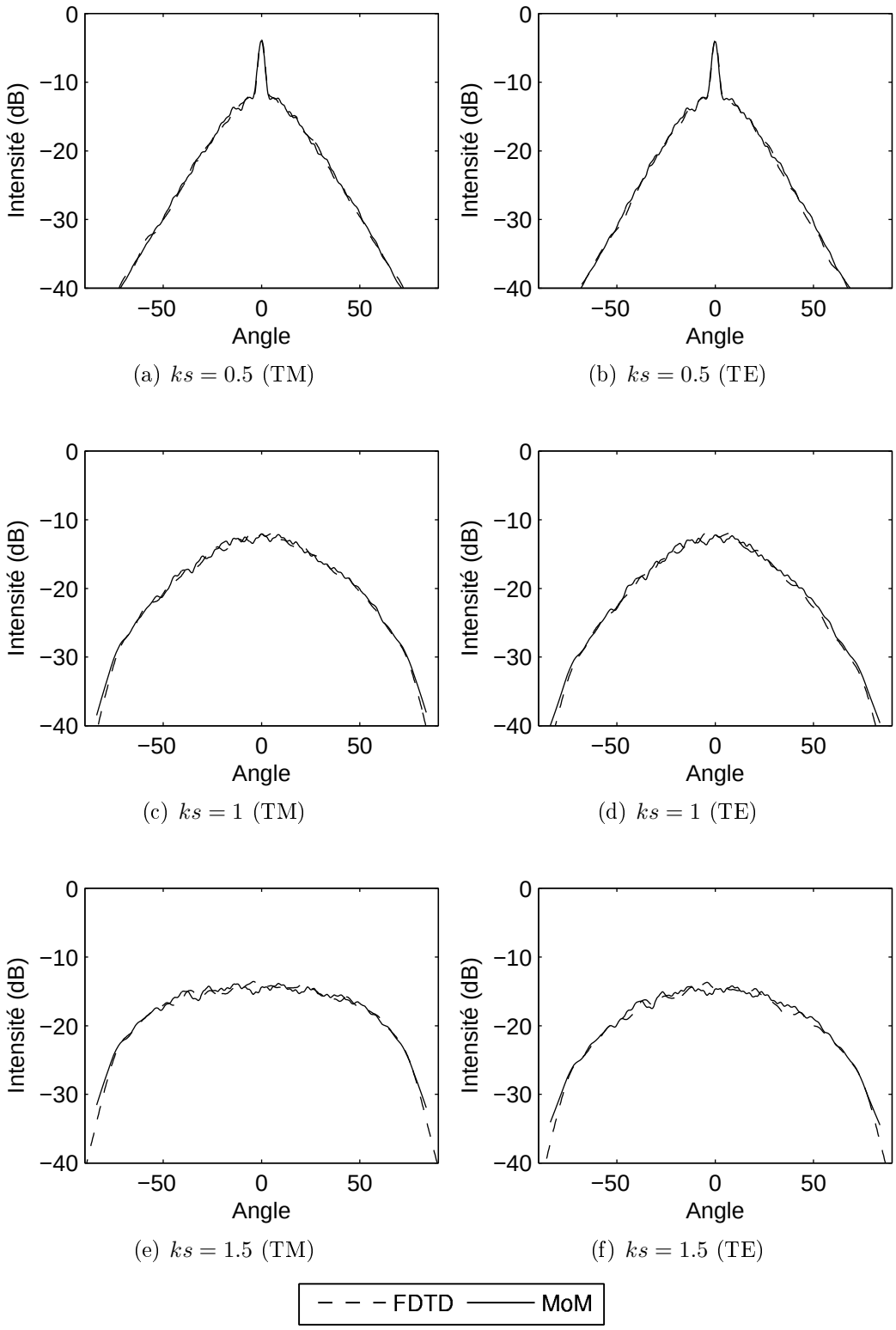
Conclusion Nous avons vu que nous avions un résultat identique entre la méthode des moments et la FDTD dans le cas de surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne fortement rugueuses ($ks = 2$ et $kL = 2\pi$). Par contre, lorsque nous avons étudié des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle, nous avons pu observer des différences entre les deux résultats à mesure que la rugosité augmentait. Nous avons lié ces différences au traitement de la surface.

Nous pouvons donc, a priori, étudier par les deux méthodes des surfaces déterministes de fonction d'auto-corrélation exponentielles lorsque $ks < 2$.

Comparaisons sur des résultats moyens

Surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussiennes La première partie de cette étude a permis de comparer la Méthode des Moments et la FDTD sur une réalisation de surface aléatoire. Nous avons pu déterminer une zone de validité croisée dans ce cas. Afin de continuer cette analyse, nous allons poursuivre ces comparaisons pour la moyenne de l'intensité diffusée par un ensemble de réalisations.

Comme les résultats sur une seule réalisation pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne sont identiques, les résultats restent identiques pour un ensemble de réalisations (Figure 4.13). Il s'agit en effet d'un problème moins complexe puisque la position du faisceau sur la surface ne joue plus directement sur le résultat car la figure de tavelure disparaît au profit du comportement moyen du matériau. On ne cherche donc

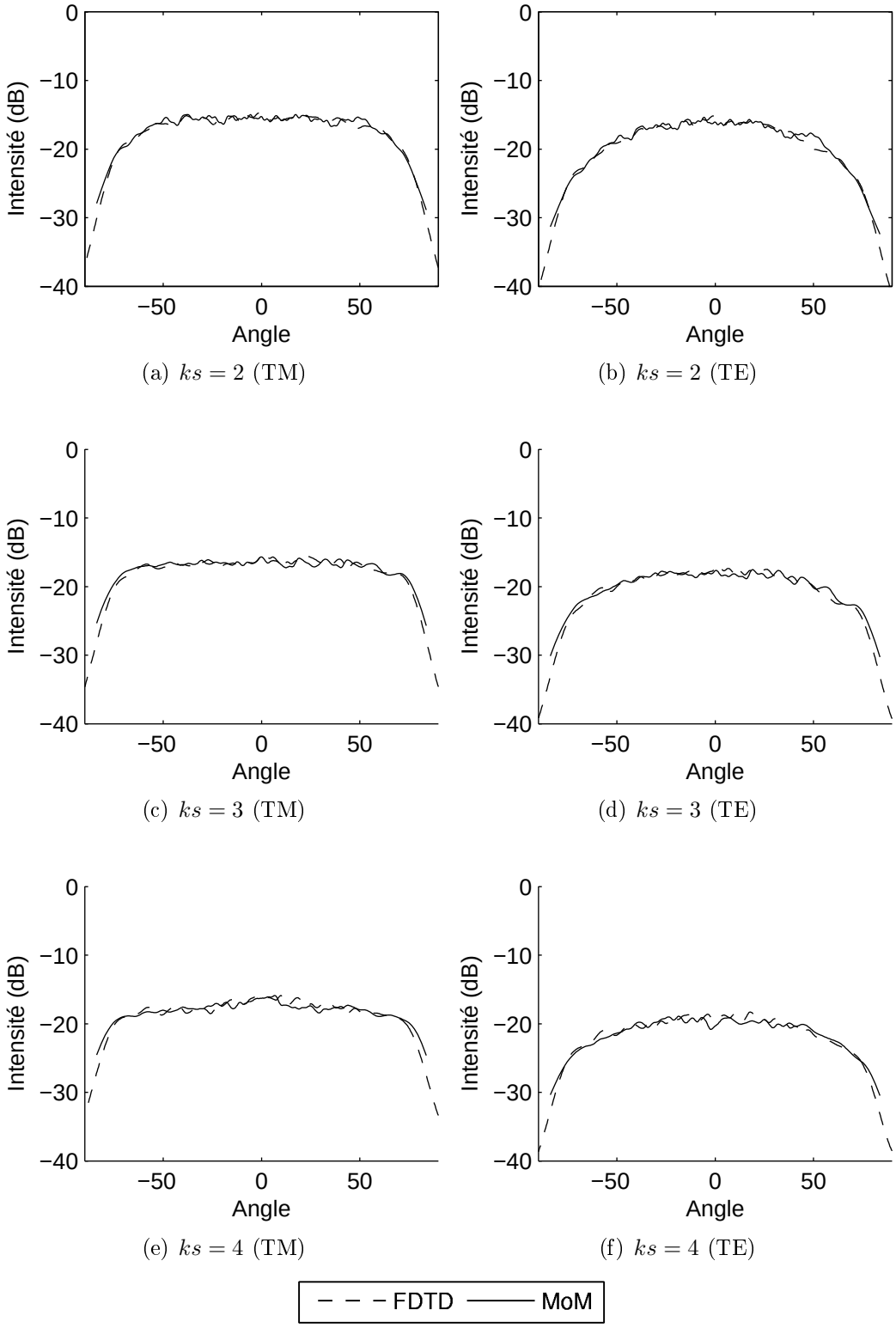


(a) $ks = 0.5$ (TM) (b) $ks = 0.5$ (TE)

(c) $ks = 1$ (TM) (d) $ks = 1$ (TE)

(e) $ks = 1.5$ (TM) (f) $ks = 1.5$ (TE)

FIG. 4.13 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne pour $ks = 0.5$ (a et b), $ks = 1$ (c et d), $ks = 1.5$ (e et f) et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM et TE. L'indice du milieu est $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.



(a) $ks = 2$ (TM) (b) $ks = 2$ (TE)

(c) $ks = 3$ (TM) (d) $ks = 3$ (TE)

(e) $ks = 4$ (TM) (f) $ks = 4$ (TE)

FIG. 4.14 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne pour $ks = 2$ (a et b), $ks = 3$ (c et d) et $ks = 4$ (e et f) et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM (figures de gauche) et TE (figures de droite). L'indice du milieu est $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.

plus, comme dans le cas précédent, à reproduire le comportement complet des variations de l'intensité mais une valeur moyenne. Les fluctuations restantes sont différentes dans les résultats fournis par les deux méthodes puisque les surfaces utilisées pour le calcul sont différentes. Dans le premier cas ($ks = 0.5$), on observe un spéculaire fort. Le niveau du diffus est situé environ 10 dB en dessous. On a ici une surface de faible rugosité faiblement diffusante. Lorsque la rugosité augmente ($ks = 1$), le spéculaire a complètement disparu et les deux polarisations donnent toujours des résultats identiques. Les deux rugosités les plus élevées ($ks = 1.5$ et $ks = 2$) présentent toujours des résultats identiques pour les deux méthodes.

La Figure 4.14 présente les résultats pour des surfaces plus rugueuses ($ks = 2$ et $ks = 4$). Ces cas sont en dehors du domaine de validité des méthodes asymptotiques usuelles. La MoM et la FDTD donnent toujours des résultats parfaitement identiques (aux fluctuations dues à la moyenne près). Pour $ks = 2$, la polarisation TM donne un diagramme de diffusion en intensité parfaitement plat tandis que la polarisation TE donne des résultats équivalents à une rugosité de $ks = 1.5$ en TM. Pour $ks = 3$ et $ks = 4$, le comportement reste isotrope en polarisation TM pour les deux types de rugosités étudiées. On remarque une baisse de l'énergie totale diffusée de 2,5 décibels dans les deux polarisations entre $ks = 3$ et $ks = 4$.

La diffusion par les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne peut être traitée par les deux méthodes pour toutes les échelles de rugosité considérées. En effet, la FDTD et la MoM ont donné des résultats identiques pour tous les cas étudiés (jusqu'à $ks = 4$ avec $kL = 2\pi$). Ainsi, la FDTD peut servir de méthode de référence pour traiter le problème de la diffusion par ces milieux ou être utilisée lorsque les méthodes approchées ne sont plus applicables. Elle peut, dans ce cas, être utilisée en toute confiance pour les études de couplage surface/volume.

Surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle Pour les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle (Figure 4.15), la différence entre les résultats obtenus par les deux méthodes s'accroît avec la rugosité. On retrouve un comportement similaire à l'étude effectuée sur une seule réalisation. Pour une rugosité faible ($ks = 0.5$ ou $ks = 1$), les deux méthodes donnent des résultats identiques. Le cohérent disparaît lorsque la rugosité est comprise entre $ks = 0.5$ et $ks = 1$ et le niveau du diffus s'accroît sur un large domaine angulaire. Pour $ks = 1.5$, les deux méthodes commencent à donner des résultats différents avec environ 1 dB d'écart. La forme générale reste néanmoins la même. Cet écart s'accroît entre 2 et 3 dB pour $ks = 2$ (Figure 4.16), le comportement en polarisation TM est devenu parfaitement isotrope et la polarisation TE diffuse moins. Néanmoins, par rapport au calcul effectué sur une seule réalisation, les différences sur le diagramme de diffusion ont été gommées. Si l'on compare ces résultats avec ceux de la Figure 4.13 (cas gaussien), on observe un comportement différent entre les deux types de surface : le niveau de la diffusion est plus faible dans le cas exponentiel mais il couvre

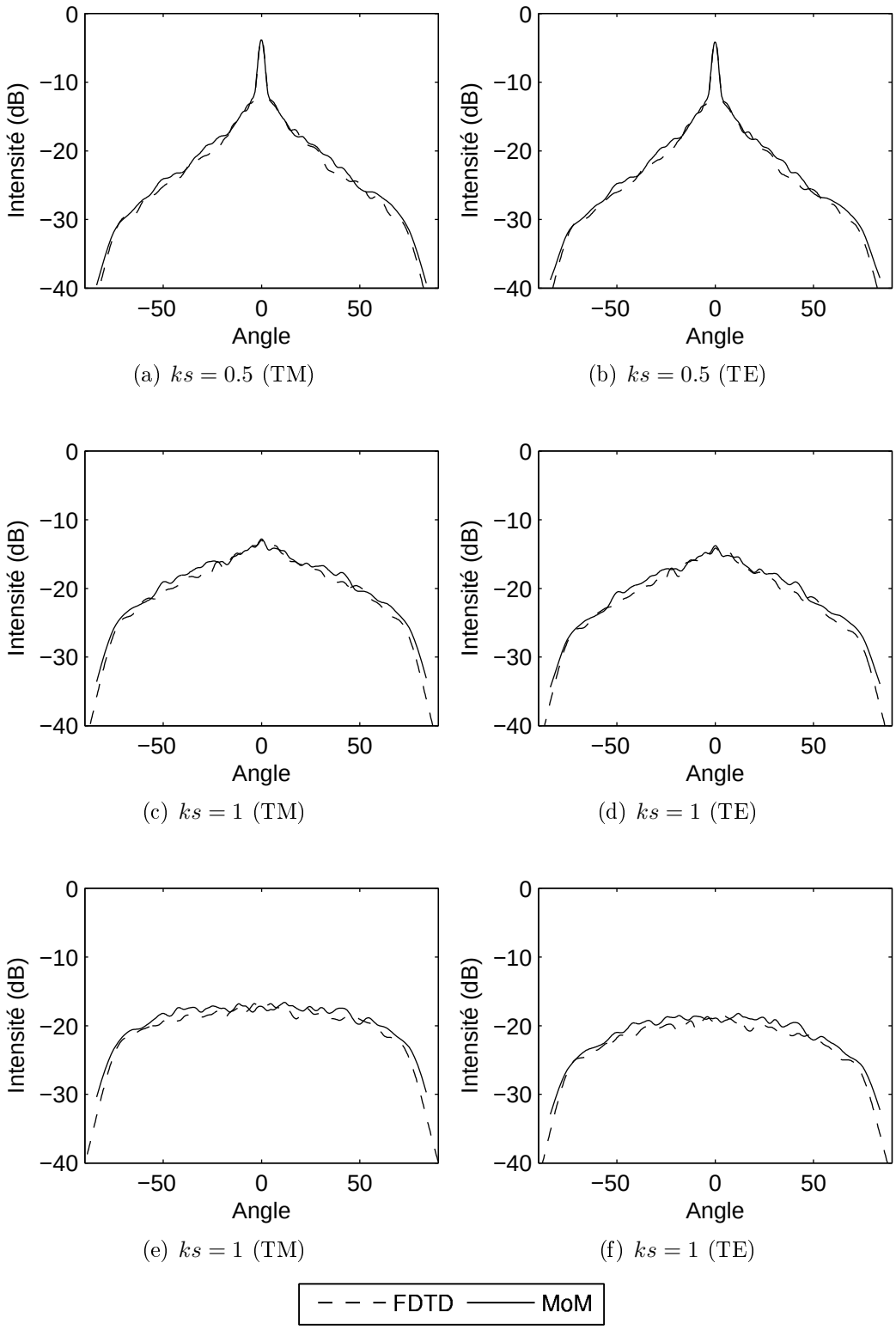
un domaine angulaire plus important. Ainsi, les rugosités de petite échelle jouent un rôle important dans la diffusion par une surface rugueuse.

Lorsque la rugosité est plus forte, la différence entre la MoM et la FDTD continue à croître. Nous ne pouvons alors plus savoir quelle méthode donne un résultat correct mais on retrouve des similitudes de comportement entre les deux diagrammes de diffusion. Pour $ks = 3$, la différence est de 3 dB en polarisation TM et en polarisation TE. La polarisation TE continue à moins diffuser que la polarisation TM. Le niveau global est très bas (-22 dB en TM et -25 dB en TE), la quasi-totalité de l'énergie est transmise. Pour la rugosité la plus élevée ($ks = 4$), la différence reste stable vers 3 dB d'écart et la réflexion continue à décroître dans les deux méthodes. On remarquera avec intérêt que les deux approches donnent un diagramme similaire dans les deux rugosités traitées et dans les deux polarisations. En effet, les courbes sont identiques dans leur comportement et semblent simplement translatées.

Stabilité des résultats Nous avons cherché à comprendre cette différence en vérifiant la stabilité de nos résultats. En premier, nous avons augmenté l'indice du milieu hôte en le faisant passer de $n = 1.63 + i0.1$ à $n = 4 + i0.04$ (Figure 4.17). En effet, l'énergie réfléchie, dans le cas exponentiel, pour $ks = 2$ est très faible. Néanmoins, on observe que la différence entre les résultats des deux méthodes a augmenté avec la rugosité. en effet, l'augmentation de l'indice a amplifié par la même occasion l'influence des rugosités de petites échelles. Le faible niveau de l'énergie diffusée n'est donc pas la cause de la différence entre les résultats FDTD et la MoM puisqu'elle augmente avec l'indice du milieu hôte. Par contre, ces résultats confirment l'influence des petites rugosités.

Nous avons ensuite essayé d'homogénéiser par une loi de mélange la permittivité sur les cellules de la FDTD traversées par la surface par la méthode présentée dans le chapitre 2. Nous avons comparé les résultats sur une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 2$ et $kL = 2\pi$ sur la Figure 4.18. Nous observons que ce traitement diminue légèrement le niveau moyen en TM et ne change pas les résultats en TE. Elle n'explique donc pas les différences entre les résultats obtenus par FDTD et par la MoM.

Finalement, nous avons doublé la discrétisation dans les deux méthodes pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle et pour $ks = 4$ et $kL = 2\pi$. Jusqu'alors nous avons utilisé un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$, les calculs présentés sur la Figure 4.19 utilisent un pas de discrétisation de $\lambda_0/60$. Les résultats obtenus par les deux méthodes sont modifiés et présentent un écart supérieur à celui d'une discrétisation plus faible. De plus le niveau global de la diffusion est diminué. Les nouvelles rugosités introduites par la discrétisation plus fine ont donc accentué les effets du traitement différent de la surface. De plus, celles-ci favorisent la transmission de l'énergie. Les deux méthodes convergent difficilement vers le résultat de la diffusion par une surface dont les hautes fréquences ont été tronquées par la discrétisation.

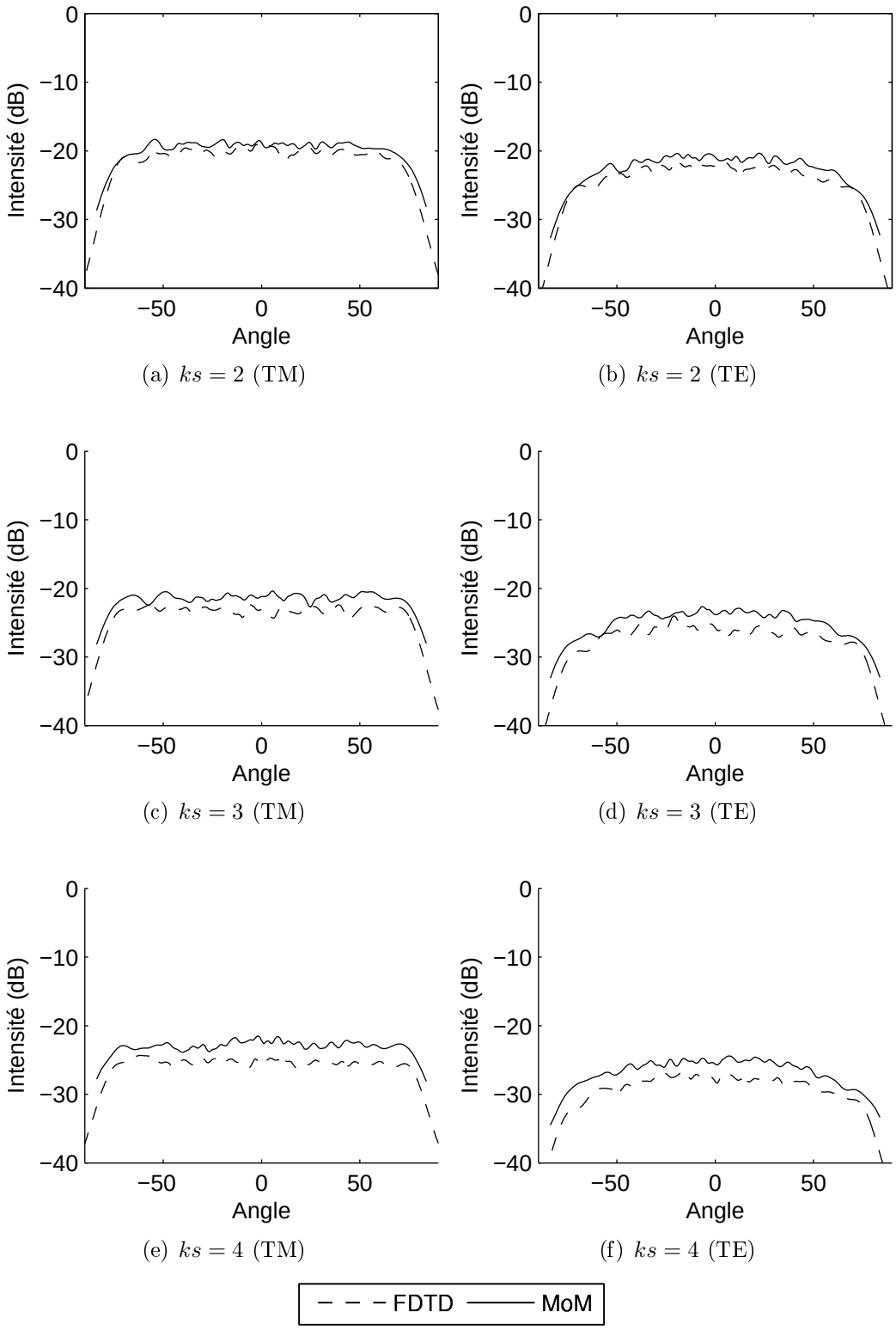


(a) $ks = 0.5$ (TM) (b) $ks = 0.5$ (TE)

(c) $ks = 1$ (TM) (d) $ks = 1$ (TE)

(e) $ks = 1$ (TM) (f) $ks = 1$ (TE)

FIG. 4.15 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 0.5$ (a et b), $ks = 1$ (c et d), $ks = 1.5$ (e et f) , et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM et TE. Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.

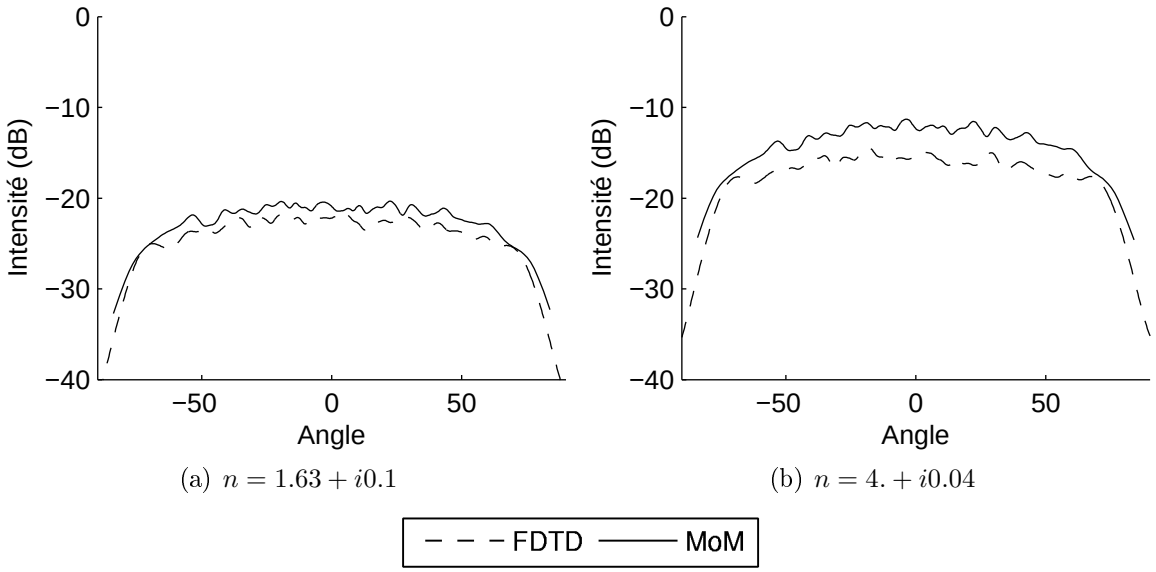


(a) $ks = 2$ (TM) (b) $ks = 2$ (TE)

(c) $ks = 3$ (TM) (d) $ks = 3$ (TE)

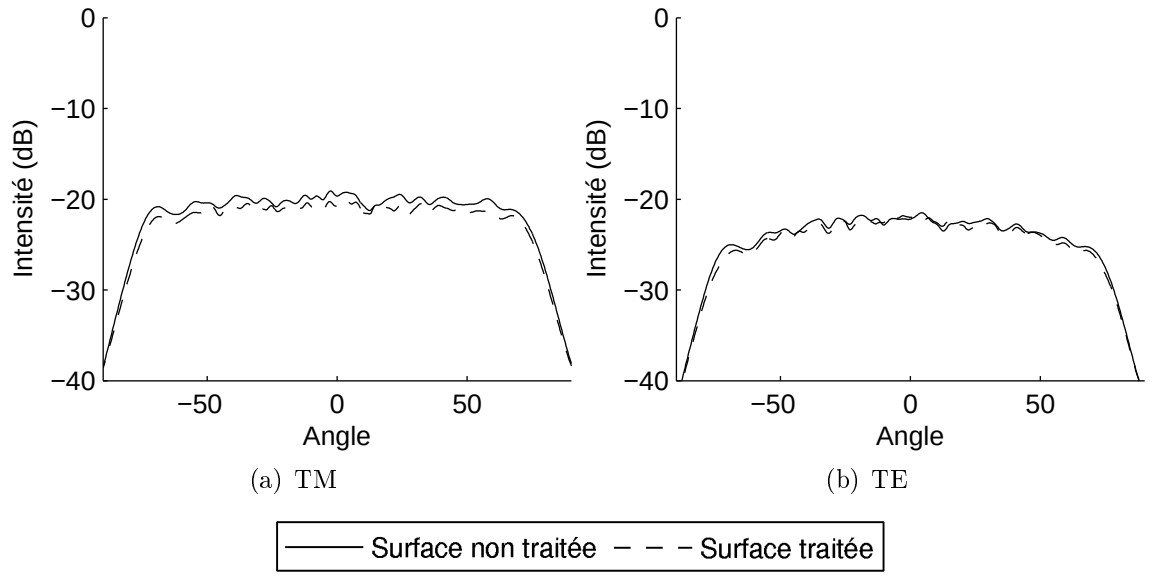
(e) $ks = 4$ (TM) (f) $ks = 4$ (TE)

FIG. 4.16 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 2$ (a et b), $ks = 3$ (c et d), $ks = 4$ (e et f) et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM et TE. Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.



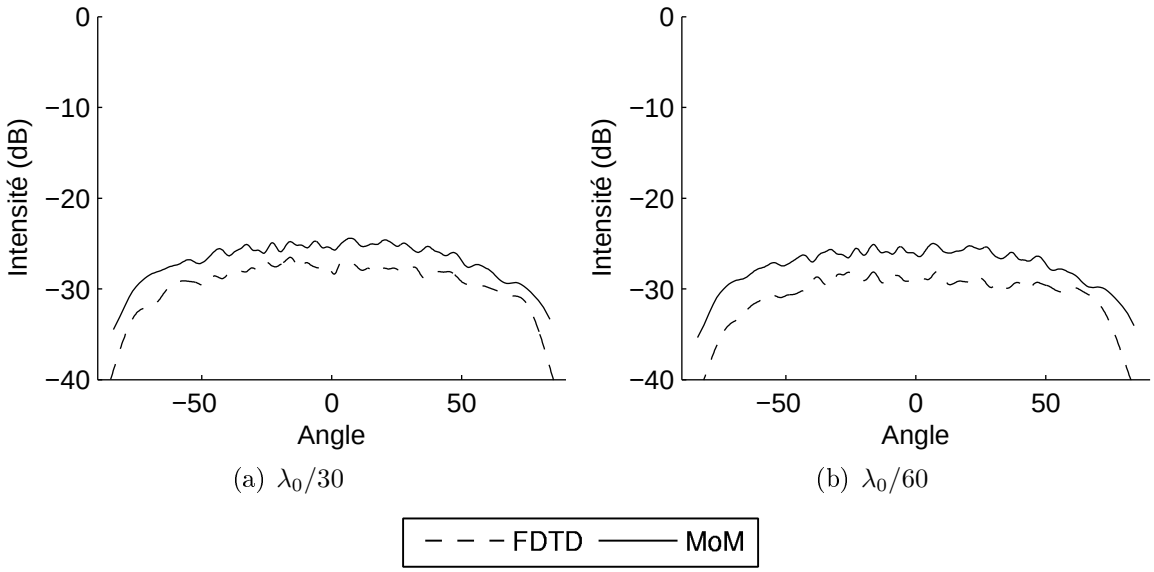
(a) $n = 1.63 + i0.1$ (b) $n = 4. + i0.04$

FIG. 4.17 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 2$ et $kL = 2\pi$ en polarisation TE . Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$ (a) et $n = 4 + i0.04$ (b).



(a) TM (b) TE

FIG. 4.18 – Diffusion par une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 2$ et $kL = 2\pi$ calculé par FDTD avec une surface traitée par homogénéisation et une surface non traitée. Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.



(a) $\lambda_0/30$ (b) $\lambda_0/60$

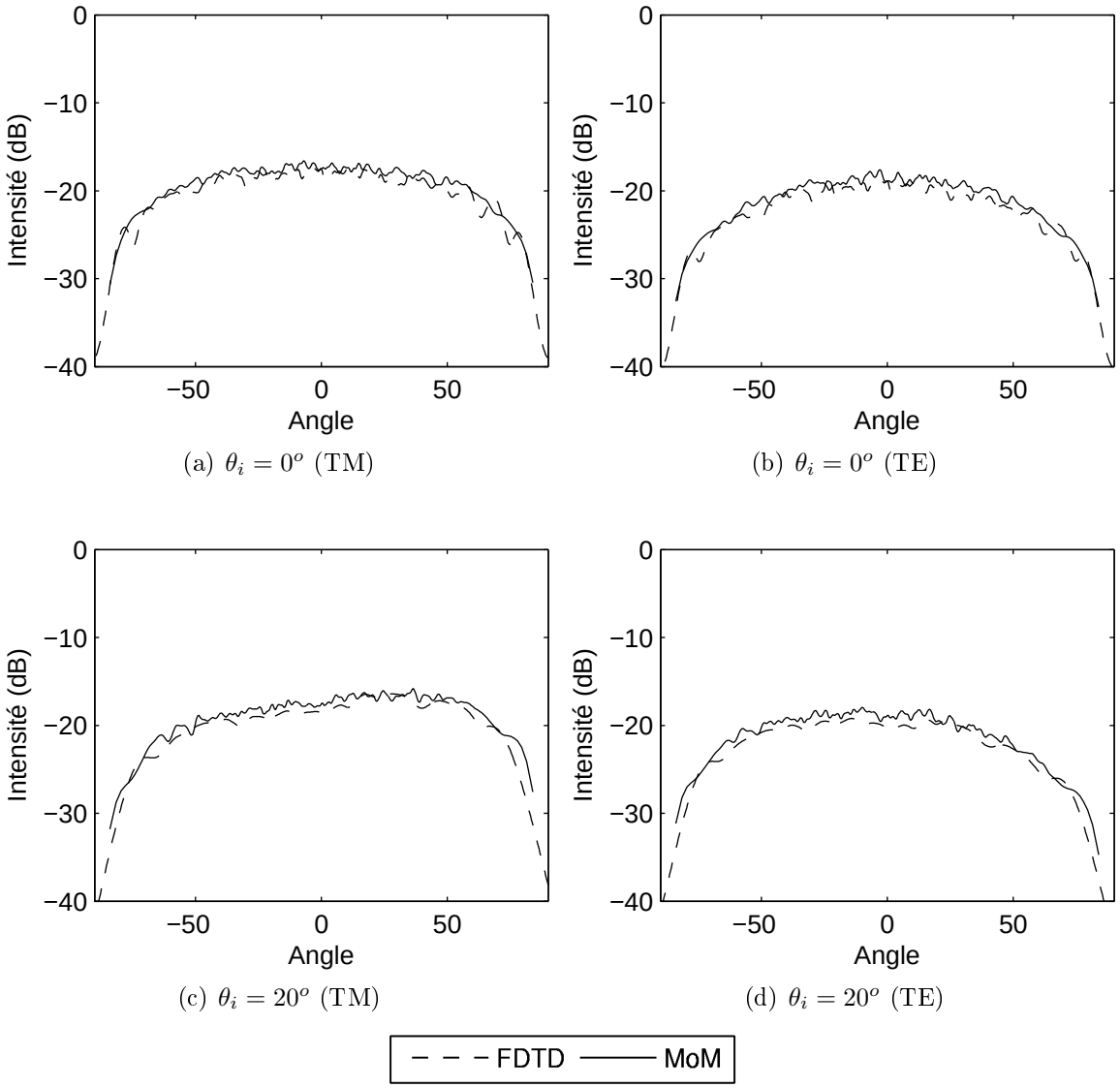
FIG. 4.19 – Diffusion par une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 4$ et $kL = 2\pi$ calculé par FDTD et par la Méthode des Moments pour un pas de discrétisation de $\lambda_0/30$ (a) et de $\lambda_0/60$ (b) pour des tailles de surfaces identiques. Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$ en polarisation TM.

Surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle en incidence Le cas $ks = 1.5$ est particulièrement intéressant pour les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle. En effet, c'est pour cette rugosité qu'une légère différence apparaît sur tout le domaine angulaire entre les résultats des deux méthodes numériques. Les Figures 4.20 et 4.21 présentent des résultats obtenus pour différentes incidences. On observe que l'écart entre les deux méthodes reste constant quel que soit l'angle d'incidence sauf dans le dernier cas ($\theta_{inc} = 60^o$). Pour cet angle, les erreurs numériques présentées dans la première partie de cette thèse (troncature des surfaces de Huygens) deviennent importantes et la précision des résultats ne peut plus être assurée. Ces courbes présentent un comportement différent suivant la polarisation TE ou TM. En effet, le lobe de diffusion n'est pas dans la même direction dans ces deux cas. En polarisation TE, il se situe dans la direction de rétro-propagation et en polarisation TM dans la direction avant.

Évolution de l'énergie diffusée Nous allons ici chercher à étudier l'évolution de l'énergie réfléchie, c'est à dire l'énergie renvoyée pour $-90^o < \theta_r < 90^o$. Pour cela, nous sommons les intensités diffusées I sur tout le domaine angulaire supérieur par :

$$E_{reflechie} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} I(\theta) d\theta \tag{4.8}$$

Le résultat est présenté sur la Figure 4.22 pour différent ks compris entre 0.5 et 2 et pour $kL = 2\pi$ dans les deux polarisations et pour les deux types de surfaces étudiées. Pour



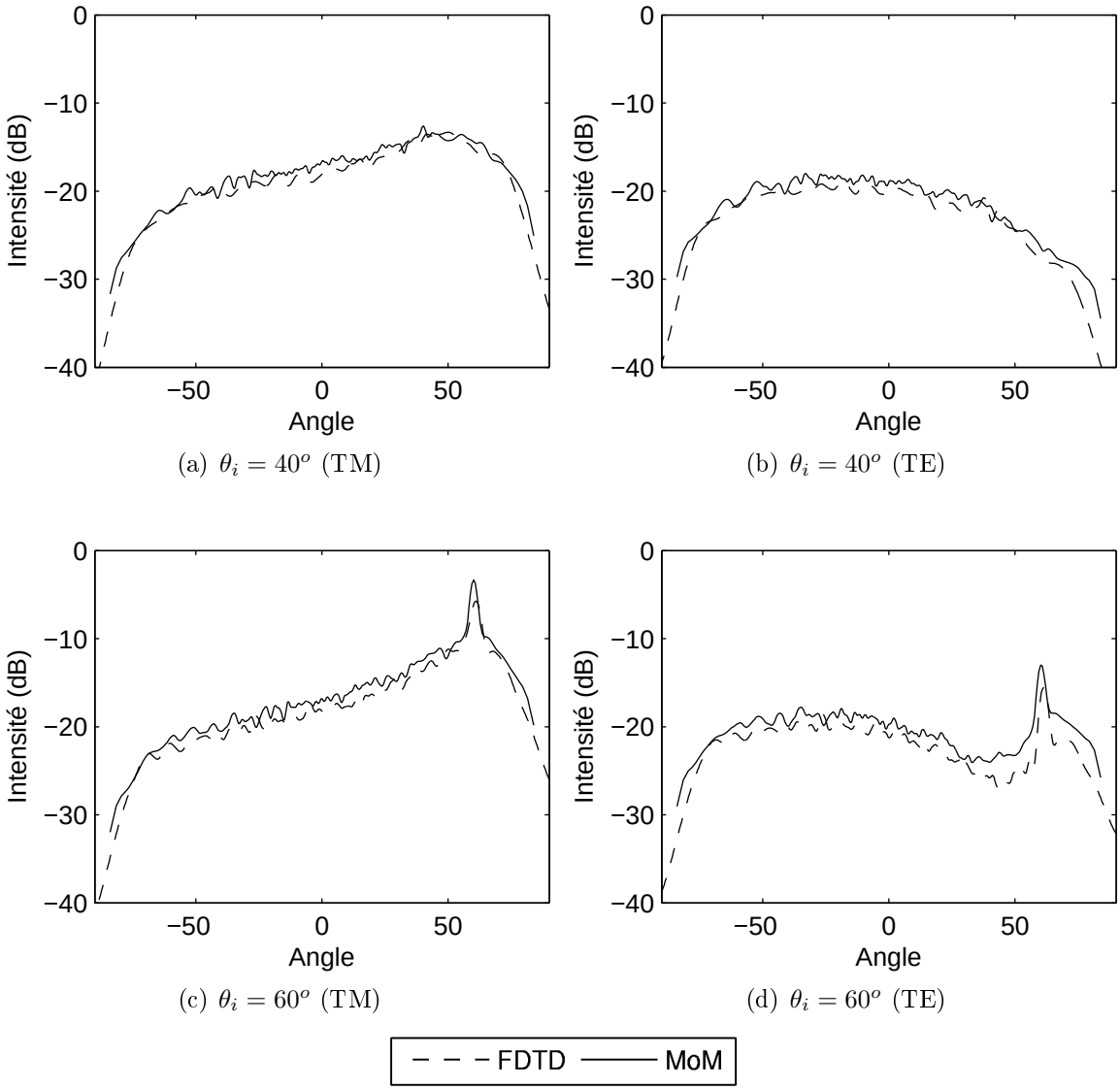
(a) $\theta_i = 0^o$ (TM)

(b) $\theta_i = 0^o$ (TE)

(c) $\theta_i = 20^o$ (TM)

(d) $\theta_i = 20^o$ (TE)

FIG. 4.20 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 1.5$ et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM et TE pour un angle d'incidence $\theta_i = 0^o$ (a et b), $\theta_i = 20^o$ (c et d). Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.



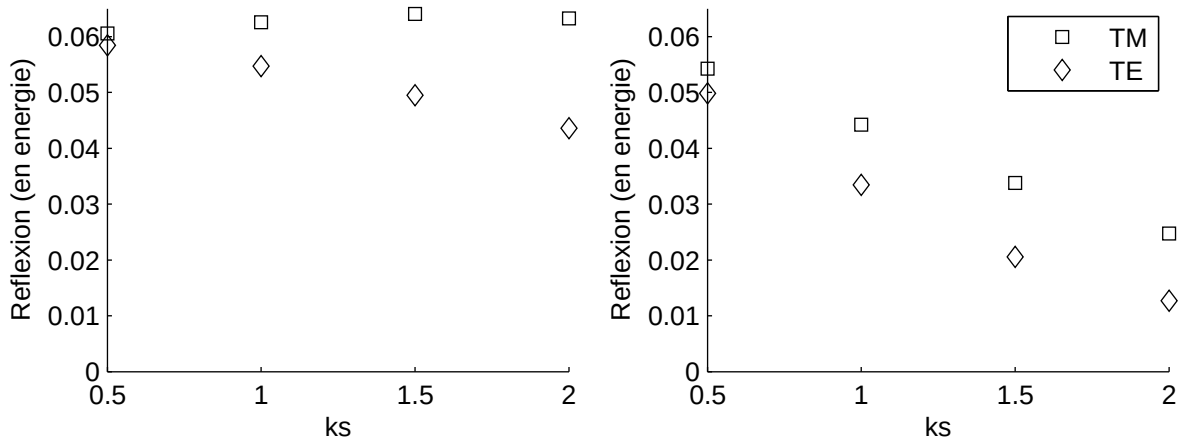
(a) $\theta_i = 40^o$ (TM)

(b) $\theta_i = 40^o$ (TE)

(c) $\theta_i = 60^o$ (TM)

(d) $\theta_i = 60^o$ (TE)

FIG. 4.21 – Comparaisons entre la MoM et la FDTD sur 150 réalisations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 1.5$ et pour $kL = 2\pi$ en polarisation TM et TE pour un angle d'incidence $\theta_i = 40^o$ (a et b), $\theta_i = 60^o$ (c et d). Le milieu est d'indice $n = 1.63 + i0.1$. Le pas de discrétisation est $\lambda_0/30$.



(a) Auto-corrélation gaussienne (b) Auto-corrélation exponentielle

FIG. 4.22 – Énergie totale réfléchie par des surfaces de fonctions d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle pour différents ks et $kl = 2\pi$ dans les polarisations TM et TE Les surfaces sont éclairées en incidence normale. Le milieu hôte est d'indice de $n_h = 1.63+0.1i$.

les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne, la polarisation TM présente une énergie réfléchie stable puis décroissante lorsque ks devient proche de 2. Ce comportement est confirmé par la Figure 4.14. La polarisation TE présente une baisse légère mais continue de l'énergie réfléchie. Les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle ont un comportement très différent. L'énergie totale réfléchie baisse fortement dans les deux polarisations avec la rugosité. Ainsi entre $ks = 0.5$ et $ks = 2$, en polarisation TE, celle-ci est 5 fois plus faible : les petites échelles de rugosité favorisent donc fortement la transmission et se comportent comme une couche d'adaptation d'impédance. Néanmoins un niveau de diffusion globalement bas diminue la précision puisqu'il renforce l'influence des bruits du calcul numérique (fuites sur la surface de Huygens, réflexions parasites).

Synthèse Dans cette partie, nous avons validé le calcul de la diffusion par des surfaces rugueuses de fonction d'auto-corrélation exponentielle lorsque la rugosité est inférieure à $ks = 1.5$ avec $kL = 2\pi$. La FDTD peut servir de méthode de référence dans ce domaine.

Puis, nous avons étudié phénoménologiquement le comportement de la diffusion en incidence et en fonction de l'énergie réfléchie. Nous avons vu que les petites rugosités jouent un rôle important dans la diffusion par une surface rugueuse.

4.4.1.2 Résultats de la confrontation

Nous avons comparé deux méthodes sur des surfaces de fonctions d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle dans les deux polarisations. Les résultats sont identiques pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne même pour des surfaces très ru-

gueuses. Lorsque nous utilisons des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle, des différences importantes apparaissent lorsque nous augmentons la rugosité (à partir de $ks = 1.5$ pour $kL = 2\pi$). Pour la rugosité la plus importante, lorsque nous raffinons le pas de maillage, de nouvelles échelles de rugosité sont créées et les deux méthodes ne convergent pas vers la même solution.

Le comportement de la diffusion par les deux types de surface est différent. La surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle diffuse plus et favorise la transmission de l'onde incidente. Cette étude confirme l'importance des petites rugosités pour la diffusion.

Cette étape nous a permis de valider notre approche. Nous avons vu que nous pouvons traiter avec confiance les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne pour toutes les échelles de rugosité considérées. La validité de la méthode est assurée pour les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielles lorsque la rugosité est suffisamment faible ($ks < 1.5$ avec $kL = 2\pi$).

Il faudrait utiliser d'autres méthodes numériques comme les éléments finis ou des méthodes intégrales utilisant d'autres fonctions de base afin de pouvoir disposer d'informations supplémentaires permettant de déterminer la validité des méthodes numériques pour des ks plus importants dans le cas de surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Par exemple, afin de pouvoir prendre en compte de manière rigoureuse ces petites rugosités pour une méthode numérique, Poirier propose de les homogénéiser grâce à des conditions aux limites équivalentes [103].

4.4.2 Résultats

La méthode de calcul utilisée dans cette section est la FDTD. Nous avons effectué de nombreux calculs pour différentes incidences, différents indices et différentes rugosités pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle dont les caractéristiques sont représentatives des applications dans le domaine micro-onde. Nous allons utiliser une partie de ces résultats pour illustrer certains phénomènes physiques.

4.4.2.1 Influence de ks/kL

Les surfaces rugueuses de fonction d'auto-corrélation exponentielle ou gaussienne dépendent de deux paramètres ks et kL. Ils définissent la dimension des rugosités dans les deux dimensions de l'espace (verticale pour ks et horizontale pour kL). On définit σ comme :

$$\sigma = \frac{ks}{kL} \tag{4.9}$$

$$= \frac{h_{rms}}{l_c} \tag{4.10}$$

Nous allons étudier deux exemples de diffusion par des surfaces rugueuses de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Dans le premier cas présenté Figure 4.23 $\sigma = (4\pi)^{-1}$, et on a respectivement $ks = 0.5$ avec $kL = 2\pi$ et $ks = 1$ avec $kL = 4\pi$. La forme générale du diagramme de diffusion est identique, et ce, dans les deux polarisations. On observe une différence de niveau de l'ordre de 3 dB. L'indice du milieu étant le même dans les deux cas, cette différence est due à la rugosité. Dans le second cas présenté Figure 4.24, la valeur de σ est plus élevée avec $\sigma = (2\pi)^{-1}$ ($ks = 1/kL = 2\pi$ et $ks = 2/kL = 4\pi$). La forme du diagramme est alors différente : on ne peut plus avoir une idée du comportement de la surface avec le paramètre réduit σ.

Pour comprendre ces résultats, la SPM (Small Perturbation Method) se révèle très utile. En effet, dans cette approche, le résultat de la diffusion est proportionnel au spectre de puissance de la surface étudiée [35]. Dans le cas d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle, nous avons vu dans le chapitre 3 que celui-ci s'écrivait :

$$PSD(k) = \frac{2h_{rms}^2 l_c}{1 + (l_c k)^2} \tag{4.11}$$

On a donc, dans les grands angles :

$$PSD(k) = \frac{2l_c\sigma^2}{k^2} \tag{4.12}$$

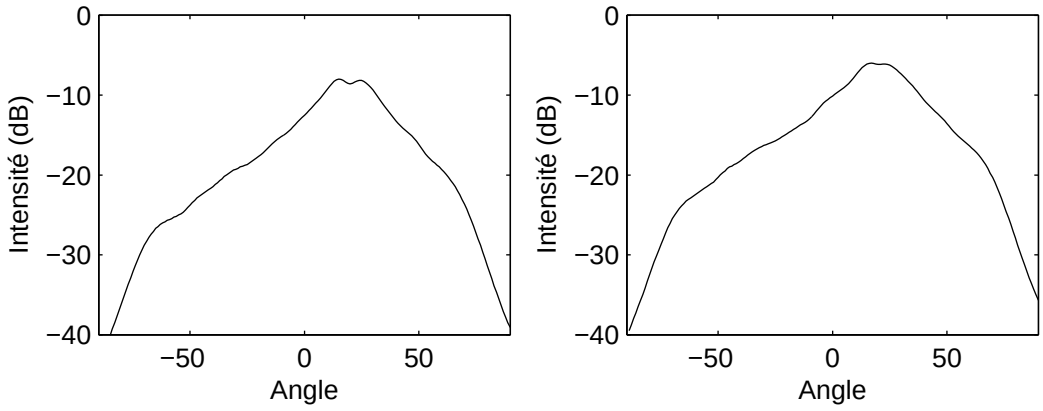
Ainsi, si on calcule l'intensité diffusée par deux surfaces de σ égaux mais avec deux longueurs de corrélations l_{c1} et l_{c2} alors les deux courbes en décibel seront éloignées dans les grands angles de $20log_{10}(l_{c1}/l_{c2})$.

Sur la Figure 4.23, ks et ks/kL sont légèrement en dehors du domaine de validité de la SPM. Néanmoins, on mesure effectivement environ 3 dB de différence (2.6 dB en TE et 3.4 dB en TM) entre les deux courbes ce qui correspond au rapport des deux longueurs de corrélation.

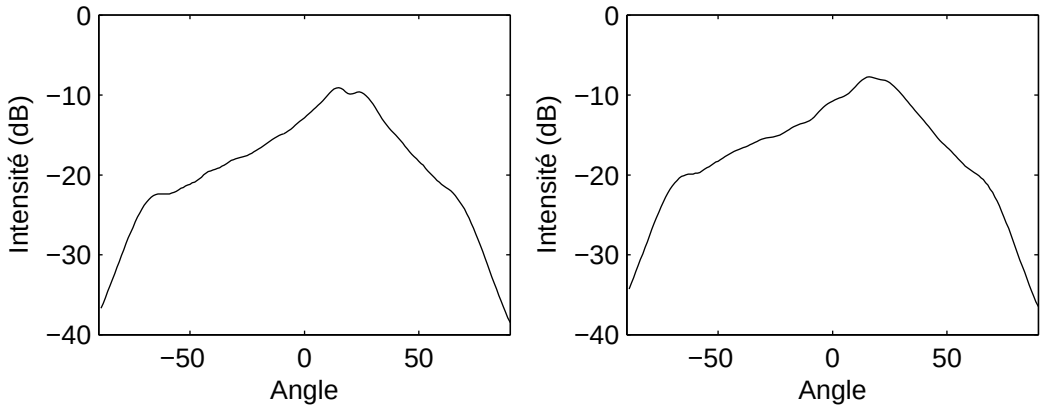
Pour la Figure 4.24, les pentes sont largement plus fortes ($\sigma = (2\pi)^{-1}$) et les ks sont plus importants. Nous sommes hors du domaine de validité de la SPM et on ne retrouve plus de phénomène de translation des courbes représentant l'intensité diffusée.

4.4.2.2 Influence de l'indice

Nous cherchons ici à étudier l'influence de l'indice optique sur la diffusion par une surface rugueuse. Dans le cas d'une interface plane, une augmentation de l'indice optique se traduit par une énergie réfléchie plus grande suivant les lois des Fresnel. La Figure 4.25 présente les résultats pour diverses rugosités entre $ks = 0.5$ et $ks = 2$ pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle avec deux indices optiques différents ($n = 2.65 + i0.15$ et $n = 2.02 + i0.074$). On observe que l'augmentation de l'indice optique induit une énergie réfléchie plus importante pour tous les cas considérés et sur tout le diagramme de diffusion. La différence est d'environ 2.3 dB en polarisation TE et de 2.7

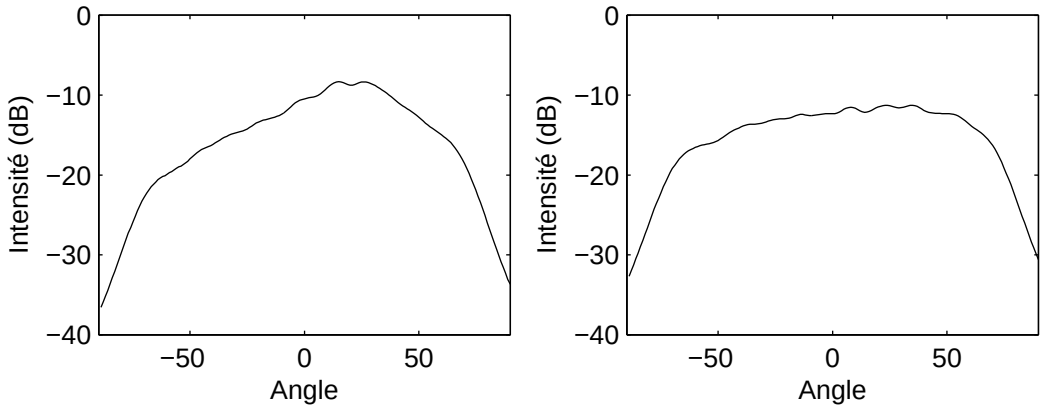


(a) $ks = 0.5$, $kL = 2\pi$ (TM) (b) $ks = 1$, $kL = 4\pi$ (TM)

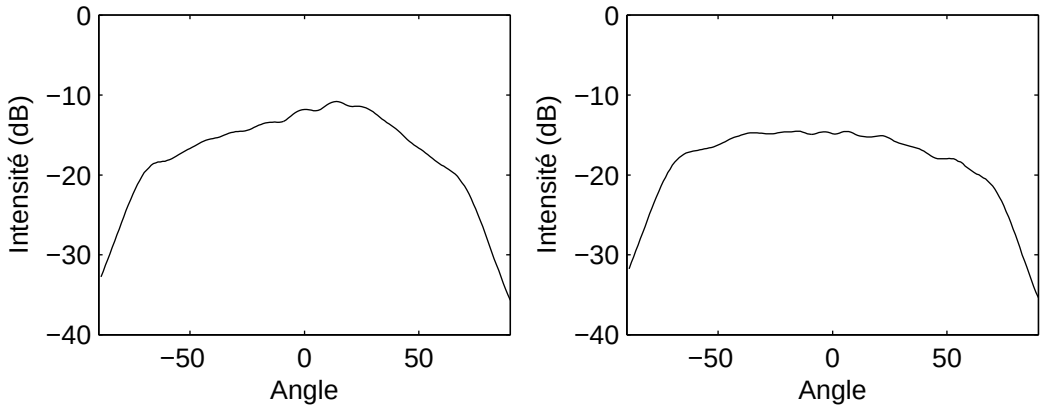


(c) $ks = 0.5$, $kL = 2\pi$ (TE) (d) $ks = 1$, $kL = 4\pi$ (TE)

FIG. 4.23 – Intensités incohérentes diffusées par des surfaces rugueuses de fonction d'autocorrélation exponentielle pour $ks = 0.5$ et $kL = 2\pi$ (a et c), pour $ks = 1$ et $kL = 4\pi$ (b et d) pour un angle d'incidence $\theta_i = 20^o$ en polarisation TM (a et b) et TE (c et d), l'indice du milieu hôte est $n = 2.65 + i0.15$.



(a) $ks = 1$, $kL = 2\pi$ (TM) (b) $ks = 2$, $kL = 4\pi$ (TM)



(c) $ks = 1$, $kL = 2\pi$ (TE) (d) $ks = 2$, $kL = 4\pi$ (TE)

FIG. 4.24 – Intensités incohérentes diffusées par des surfaces rugueuses de fonction d'autocorrélation exponentielles pour $ks = 1$ et $kL = 2\pi$ (a et c), et pour $ks = 2$ et $kL = 4\pi$ (b et b) pour un angle d'incidence $\theta_i = 20^o$ en polarisation TM (a et b) et TE (c et d), l'indice du milieu hôte est $n = 2.65 + i0.15$.

dB en polarisation TM quelle que soit la rugosité. Ainsi, en moyenne, une augmentation de l'indice induit une réflexion plus forte mais ne modifie pas l'allure générale du diagramme de diffusion.

Ces résultats sont obtenus pour une moyenne d'un ensemble de 300 réalisations. Nous pouvons voir, sur la Figure 4.26, que cette relation est toujours valable pour une réalisation d'une surface rugueuse de fonction d'auto-corrélation exponentielle ($ks = 1.5$). La figure de diffusion dans son ensemble est translatée et les différences de forme sont minimes.

4.5 Conclusion sur la diffusion surfacique

Nous avons validé notre implémentation d'une méthode d'étude des matériaux rugueux basée sur la FDTD en confrontant ses résultats avec la Méthode des Moments pour des surfaces faiblement à fortement rugueuses avec des fonctions d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle. Dans un premier temps, nous avons comparé les résultats de la diffusion par des surfaces déterministes de grande taille. Nous avons vu que les deux méthodes donnaient les mêmes résultats pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne mais que des différences significatives apparaissaient pour des matériaux fortement rugueux dans le cas exponentiel. Nous avons ensuite poursuivi cette comparaison pour la moyenne de l'intensité diffusée par un ensemble de réalisations. Les deux méthodes donnent toujours des résultats identiques pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne et des différences sensibles apparaissent pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks > 1.5$. L'écart grandissant en fonction de la rugosité des résultats des calculs de diffusion pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle semble du aux différences de traitement de la surface dans les deux méthodes.

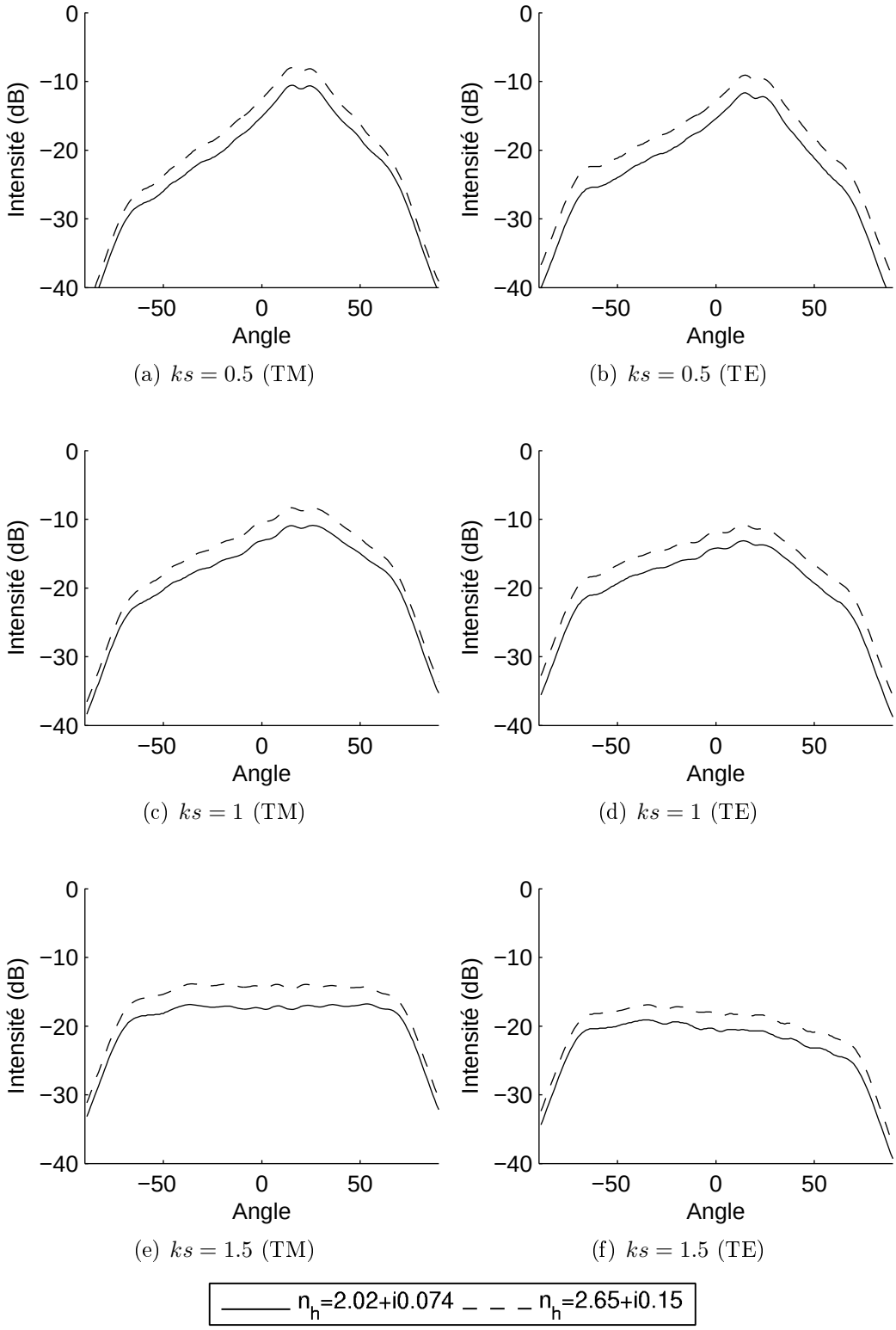
Ces résultats sont les premiers publiés sur la comparaison de deux méthodes numériques sur le calcul de la diffusion de surfaces d'auto-corrélation exponentielle. Ils montrent que l'utilisation de ces méthodes est pertinente pour leur étude lorsque $ks/kL < 0.25$.

Cette étape de validation était nécessaire avant d'entreprendre les études sur le couplage surface volume. En l'effectuant, nous avons pu mettre en évidence certaines propriétés de la diffusion par une surface rugueuse.

Ainsi, nous avons vu que le comportement de la diffusion par les deux types de surface est différent et que les petites échelles de rugosités sont importantes. Elles favorisent la transmission de l'énergie et sa diffusion sur un large domaine angulaire.

Nous avons ensuite étudié l'influence du facteur ks/kL pour la diffusion par une surface rugueuse. Nous avons vu que, tant que nous sommes dans le domaine de validité de la méthode des petites perturbations (SPM), ce facteur est suffisant pour déterminer le comportement de la surface dans les grands angles à partir de résultats de même ks/kL.

Nous avons ensuite étudié l'influence de l'indice optique. Nous avons vu qu'une augmentation de l'indice accroissait l'énergie diffusée sans modifier le diagramme de diffusion



(a) $ks = 0.5$ (TM) (b) $ks = 0.5$ (TE)

(c) $ks = 1$ (TM) (d) $ks = 1$ (TE)

(e) $ks = 1.5$ (TM) (f) $ks = 1.5$ (TE)

FIG. 4.25 – Intensités incohérentes diffusées par des surfaces rugueuses de fonction d'autocorrélation exponentielle pour $ks = 0.5$ et $kL = 2\pi$ (a et b), pour $ks = 1$ et $kL = 2\pi$ (c et d), $ks = 1.5$ et $kL = 2\pi$ (e et f) pour un angle d'incidence $\theta_i = 20^o$ en polarisation TM et TE, l'indice du milieu hôte est $n = 2.65 + i0.15$ ou $n = 2.02 + i0.074$.

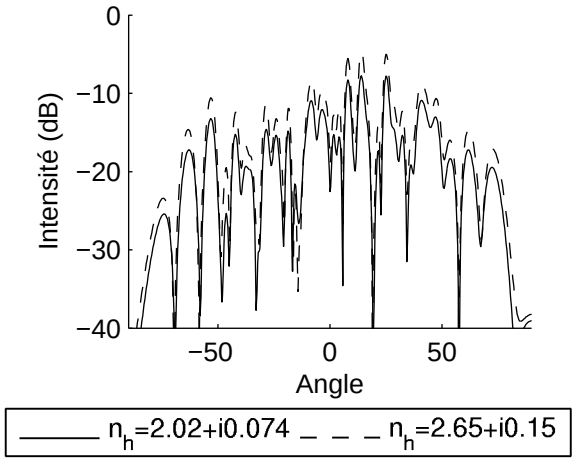


FIG. 4.26 – Intensités diffusées par des surfaces rugueuses de fonction d'auto-corrélation exponentielle pour $ks = 1.5$ et $kL = 2\pi$ pour un angle d'incidence $\theta_i = 20^o$ en polarisation TM, l'indice du milieu est $n_h = 2.65 + i0.15$ et $n_h = 2.02 + i0.074$.

quelle que soit la rugosité étudiée.

Il a été démontré dans ce chapitre que l'outil développé pouvait servir de référence pour les problèmes de diffusion surfaciques. Cette approche permet donc de disposer de résultats de référence pour établir le domaine de validité de méthodes asymptotiques. Elle a ainsi été utilisée au cours d'une étude ESA pour la diffusion par les sols. Elle peut aussi servir de méthode alternative lorsque les méthodes asymptotiques ne s'appliquent pas (par exemple ks important). Finalement, elle trouve pleinement son intérêt quand les effets de volume s'additionnent à la rugosité surfacique, ce que nous verrons dans le chapitre 6.

Chapitre 5

Étude de l'homogénéisation et de la diffusion volumique

5.1 Présentation du problème

La propagation d'une onde dans un milieu hétérogène aléatoire est un phénomène extrêmement complexe fortement dépendant de la géométrie du milieu. Ainsi, nous allons commencer par définir l'objet de notre étude. Nous considérerons ici un cas particulier de la diffusion volumique : la diffusion par un ensemble de cylindres infinis aléatoirement positionnés dans un milieu hôte. Ces cylindres suivent le modèle des sphères dures (ils n'ont pas le droit de s'interpénétrer). Le milieu comporte (Figure 5.1) :

- Un milieu hôte homogène d'indice n_h (1) ;
- Un ensemble polydisperse et polymatériau de particules (2) .

L'interface avec l'espace libre est plane. Le milieu est éclairé par un faisceau gaussien.

Dans ce type de milieu, on montre [43] que, à cause de la diffusion incohérente, l'intensité cohérente diminue exponentiellement lors de sa propagation dans un milieu aléatoire d'un facteur que nous noterons κ_d. On peut donc écrire, pour une onde se propageant sur l'axe des x et d'intensité initiale I_0 :

$$I_{coh} = I_0 e^{-\kappa_d x} \tag{5.1}$$

Dans un milieu à pertes, l'intensité présente une décroissance exponentielle de coefficient κ_a. Elle est de la forme :

$$I = I_0 e^{-\kappa_a x} \tag{5.2}$$

L'énergie incidente cohérente est soumise aux deux phénomènes. Ainsi son intensité diminue exponentiellement en $\kappa_e = \kappa_a + \kappa_d$ lors de sa propagation dans le milieu hétérogène. κ_e est appelé le coefficient d'extinction. L'évolution de l'intensité incohérente est

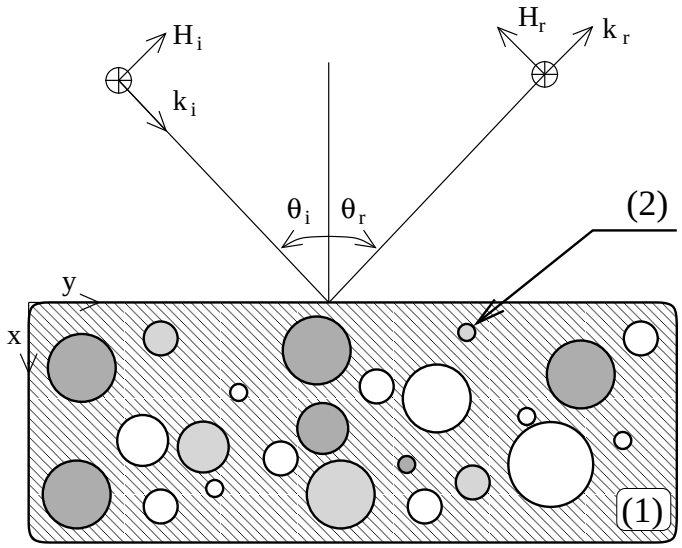


FIG. 5.1 – Géométrie du problème pour la diffusion par un milieu hétérogène. (1) représente le milieu hôte homogène, (2) les particules. L'onde incidente a pour vecteur d'onde k_i et fait un angle θ_i avec la normale, la direction d'observation est θ_r.

beaucoup plus complexe et sa décroissance n'est pas simple à modéliser : par exemple, en 1D elle est polynomiale, tandis qu'en 3D elle est exponentielle [43].

L'étude du champ cohérent est particulièrement intéressante. En effet, dans notre cas, on peut trouver un matériau homogène équivalent pour représenter sa propagation [33]. Il s'agit alors de trouver un indice effectif pour prendre en compte la présence des particules. En effet, celles-ci vont diminuer l'intensité du champ cohérent par diffusion et modifier sa vitesse de propagation.

Nous verrons, dans la première partie de ce chapitre, plusieurs modèles approchés de détermination de l'indice effectif pour la propagation du cohérent. Il s'agit de deux lois de mélanges : Maxwell-Garnett [85] et Bruggeman [12] ainsi que de deux modèles perturbatifs pour la détermination de la constante de propagation effective : Foldy-Twersky [39] et Keller [69].

Nous développerons ensuite une approche innovante basée sur la FDTD de détermination de l'indice effectif à partir de l'étude de la propagation du champ cohérent dans le milieu [19]. Puis, nous comparerons ces résultats avec les modèles décrits précédemment. Il s'agit de la première étude - sur un domaine large de fraction volumique, d'indice et de taille des particules - du domaine de validité de ces approches.

Nous présenterons finalement une approche novatrice pour l'étude du problème de la diffusion par un milieu bidisperse. Nous étudierons si nous pouvons remplacer les plus petites particules par le milieu effectif calculé par la méthode précédente représentatif du milieu constitué des petites particules seules.

5.2 Méthodes approchées de détermination de l'indice effectif

5.2.1 Lois de mélange

Nous allons présenter deux lois de mélanges : Maxwell-Garnett (MG) et Bruggeman (Br). Ces lois sont simples et ne font intervenir que la fraction volumique f_v, l'indice optique du milieu hôte n_h et des particules n_i. De plus, elles négligent la diffusion incohérente par les particules ($\kappa_d = 0$) : les pertes sont uniquement dues à l'absorption. Nous nous sommes basés sur les calculs de Niklasson *et al.* [96] effectués en géométrie tridimensionnelle pour déterminer l'équivalent en géométrie bidimensionnelle des lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman.

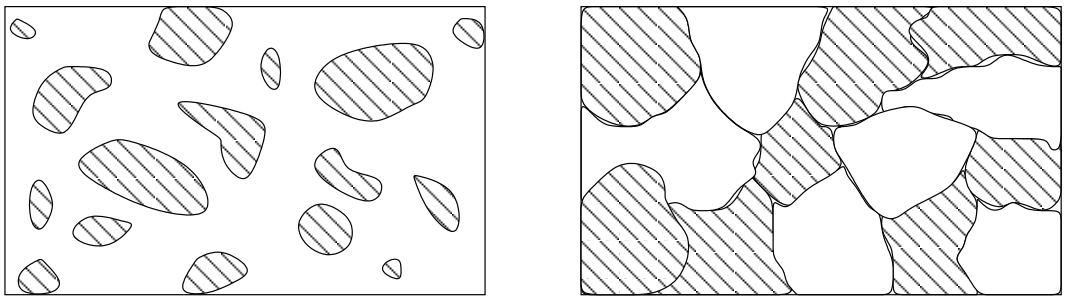


FIG. 5.2 – Géométrie pour la loi de mélange de Maxwell-Garnett (a) et pour la loi de mélange de Bruggeman (b) comportant deux composants A (hachuré) et B (blanc)

Ces lois se basent sur deux géométries différentes de milieux. Elles sont présentées Figure 5.2. Le premier cas (a), représente la géométrie utilisée pour la loi de mélange de Maxwell-Garnett. On peut clairement identifier des inclusions de formes diverses dans un milieu hôte. Elle représente le milieu que nous cherchons à modéliser. Dans la seconde géométrie (b), utilisée dans le formalisme de Bruggeman, les deux composantes ne sont plus clairement séparables et on ne peut pas distinguer milieu hôte et inclusions. Dans ce cas, les matériaux ont un rôle symétrique.

Ces deux géométries différentes permettent d'arriver à des indices effectifs différents même si les dimensions des éléments du mélange sont très petites devant la longueur d'onde. La structure fine du matériau et le modèle utilisé pour le représenter jouent donc un rôle important dans l'indice effectif. Dans toute la suite, la fraction volumique f_v représentera le volume occupé par les particules sur le volume total.

L'obtention de ces lois est décrite dans l'Annexe B. Nous les rappelons dans le tableau ci-dessous :

	TE	TM
Maxwell-Garnett	$n_{eff}^2 = n_h^2 + 2f_v n_h^2 \frac{n_i^2 - n_h^2}{n_i^2 + n_h^2 - f_v(n_i^2 - n_h^2)}$	$n_{eff}^2 = n_h^2 + f_v(n_i^2 - n_h^2)$
Bruggeman	$f_v \left(\frac{n_i^2 - n_{eff}^2}{n_i^2 + n_{eff}^2} \right) + (1 - f_v) \left(\frac{n_h^2 - n_{eff}^2}{n_h^2 + n_{eff}^2} \right) = 0$	$n_{eff}^2 = n_h^2 + f_v(n_i^2 - n_h^2)$

5.2.2 Modèle de Foldy-Twersky et Keller

Les modèles de Foldy-Twersky [39] et de Keller [69] sont plus évolués. Ils sont basés sur un développement perturbatif vis à vis de la permittivité pour obtenir le nombre d'onde k_{eff} dans le milieu hétérogène. Dans sa thèse, Durant [33] a développé ces deux théories pour une géométrie bidimensionnelle. Elles supposent que :

- toutes les particules ont la même taille ;
- les particules sont de petits diffuseurs isotropes ;

Le modèle de Foldy-Twersky donne le nombre d'onde effectif k_{eff} par une correction du nombre d'onde k_1 du milieu hôte. Il prend en compte la diffusion simple. Son expression est :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + i\frac{4f_v S(0)}{\pi a^2} \tag{5.3}$$

où a est le rayon de la particule et f_v la fraction volumique. $S(0)$ est l'amplitude de diffusion dans la direction avant. On remarque qui si on remplace $S(0)$ par son expression dans le cas de petites particules (eq. (B.9)), on trouve en TE :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + 2k_1^2 f_v \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 1} \right) \tag{5.4}$$

soit :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_1 + 2f_v \epsilon_1 \left(\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \right) \tag{5.5}$$

On retrouve l'expression de Maxwell-Garnett en polarisation TE pour des fractions volumiques faibles. Dans l'autre polarisation, on obtient :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_1 + f_v(\epsilon_2 - \epsilon_1) \tag{5.6}$$

On obtient la formule de Maxwell-Garnett en polarisation TM. Ainsi, et de même qu'en géométrie tridimensionnelle, la limite du modèle de Foldy-Twersky pour des petites particules devant la longueur d'onde est la loi de Maxwell-Garnett. Foldy-Twersky appa-

raît comme un raffinement supplémentaire par rapport à la loi de Maxwell-Garnett grâce à la prise en compte de la matrice de diffusion.

Le modèle de Keller est une approximation du second ordre du problème perturbatif précédent. Une seconde correction est ajoutée pour prendre en compte les diffusions doubles par les particules. Son expression est :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + i\frac{4f_v S(0)}{\pi a^2} - i\frac{\pi}{2}\left(\frac{4fS(0)}{\pi a^2}\right)^2 \int_0^\infty H_0^1(k_1 r) J_0(k_{eff} r)(g(r)-1) r dr \qquad (5.7)$$

où $g(r)$ est la fonction de corrélation de paires et H_0^1 et J_0 sont respectivement les fonctions de Hankel et de Bessel d'ordre 0. Cette formulation est plus complexe que le modèle de Foldy-Twersky. Tout d'abord, il s'agit d'une équation non linéaire puisque k_{eff} apparaît dans la fonction J_0. De plus, l'intégration fait intervenir la fonction de corrélation de paires $g(r)$. Dans le cas 3D, l'équation est de même nature et les méthodes de résolution sont les mêmes. Ishimaru [59] propose d'utiliser k_0 au lieu de k_{eff} dans l'intégrale, ainsi qu'une fonction de corrélation de type gaz. Celle-ci s'écrit, pour des particules de rayon r_i :

$$g(r) = \begin{cases} 1 \; si \; r > 2r_i \\ 0 \; sinon \end{cases} \qquad (5.8)$$

Hespel [54] propose une approche itérative. Celle ci se décompose en plusieurs étapes :
1) Initialisation : $k_{eff}^{(0)}$ est initialisé par la formule de Foldy-Twersky ;
2) Itération :

$$\left(k_{eff}^{(n+1)}\right)^2 = k_1 + i\frac{4fS(0)}{\pi a^2} - i\frac{\pi}{2}\left(\frac{4fS(0)}{\pi a^2}\right)^2 \int_0^\infty H_0^1(k_1 r) J_0(k_{eff}^{(n)} r)(g(r)-1) r dr \qquad (5.9)$$

3) Fin : lorsque la précision requise est atteinte.

5.2.3 Conclusion

Nous avons présenté quatre modèles de complexité croissante : les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman, le modèle de Foldy-Twersky et de Keller. Nous avons étudié l'équivalence de ces modèles dans le cas des faibles fractions volumiques. La loi de Maxwell-Garnett est une simple loi de mélange et n'est vérifiée que pour des particules de petite taille (les phénomènes de diffusion sont négligés), le modèle de Foldy-Twersky prend en compte la diffusion simple et le modèle de Keller les diffusions d'ordre 2.

5.3 Méthode de détermination d'un indice effectif basé sur la FDTD

5.3.1 Introduction

Dans la littérature, il existe différentes approches pour déterminer numériquement l'indice effectif. Chacune repose sur une géométrie spécifique, de ses observables associées et d'un processus d'inversion adapté. Il s'agit de déterminer par optimisation les caractéristiques d'un objet homogène équivalent pour le champ cohérent. Nous avons testé les approches suivantes :

- Un cylindre rectangulaire ou circulaire [109] : la détermination de l'indice effectif est basée sur la comparaison entre le champ lointain diffusé par un cylindre hétérogène et un cylindre homogène. Le diagramme complet est considéré pour l'optimisation. Pour le cylindre circulaire homogène nous utilisons la formule analytique de Rayleigh. Ces approches sont simples d'utilisation lorsque les inclusions sont petites devant la longueur d'onde puisque dans ce cas le cylindre hétérogène peut être de petite taille. Néanmoins, lorsque nous traitons le cas de larges particules, cela induit un temps de calcul plus important et un diagramme présentant des oscillations rapides, mal adapté à l'optimisation. L'utilisation, plus simple, de l'amplitude diffusée vers l'avant $S(0)$ ne conduit à une solution unique que pour des petites particules.
- Une lame [106, 33, 68] : L'indice effectif est calculé en comparant le résultat entre la réflexion et la transmission pour une lame hétérogène avec les résultats analytiques pour le milieu équivalent. La lame a été introduite en FDTD grâce à des conditions périodiques aux extrémités latérales du domaine de calcul. Nous avons rencontré ici le problème classique de cette approche avec de nombreuses ambiguïtés quand l'épaisseur du domaine augmente. Ces ambiguïtés disparaissent avec l'augmentation de l'extinction.
- Un milieu semi-infini : l'indice effectif est calculé en étudiant la propagation de l'intensité cohérente dans le milieu.

En se basant sur la dernière approche, nous allons présenter ici une nouvelle méthode de détermination de la constante de propagation effective basée sur la comparaison entre le champ proche moyennés et la propagation d'une onde plane dans un milieu homogène équivalent. Nous allons utiliser les champs proches obtenus par la FDTD pour étudier directement l'évolution de l'énergie cohérente.

En effet, la propagation d'une onde plane en milieu homogène est connue. Pour une longueur d'onde λ et un indice optique n, toutes les composantes F du champ sont de la forme :

$$F(x) = F_0 exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}nx\right) \tag{5.10}$$

Quand le milieu présente des pertes, l'indice optique complexe s'écrit $n = n' + ik$, l'équation (5.10) peut être mise sous la forme :

$$F(x) = F_0 exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}n'x\right) exp\left(-\frac{2\pi}{\lambda}kx\right) \tag{5.11}$$

Le premier terme est relié à la phase de l'onde tandis que le second est relié à son amplitude. Nous chercherons à déterminer un indice effectif n_{eff} équivalent reproduisant le comportement de l'intensité cohérente. Pour cela, nous allons lier son évolution, dans le milieu, aux caractéristiques d'un milieu homogène. Nous allons utiliser la FDTD pour déterminer $F(x)$ dans tout l'espace de calcul en effectuant la moyenne des champs sur un grand nombre de réalisations indépendantes. Nous utiliserons ces résultats pour déterminer les propriétés effectives du milieu hétérogène.

Le calcul de la partie réelle et de la partie imaginaire de l'indice optique effectif est développé dans les deux prochains paragraphes.

5.3.2 Détermination du coefficient d'extinction

Dans une première étape, la propagation d'un faisceau gaussien au travers d'un ensemble de réalisations de milieux hétérogènes est calculée par FDTD. L'interface avec le milieu extérieur est plane et le milieu est généré en utilisant l'algorithme de Metropolis. La largeur du faisceau gaussien est choisie de façon à ce qu'il diverge très peu sur l'ensemble du domaine de calcul pour s'approcher du comportement d'une onde plane. Pour chaque réalisation, une transformation de Fourier directe (DFT) est effectuée sur toutes les mailles et à toutes les longueurs d'ondes d'intérêt pour la composante z du champ électromagnétique (composante orthogonale au domaine de calcul). Ainsi, par exemple, le champ E_z est utilisé pour la polarisation TM. Le champ est alors moyenné à la fréquence d'intérêt sur l'ensemble des réalisations et le champ cohérent est extrait. L'énergie cohérente W_{coh} est utilisée pour le calcul de la partie imaginaire k_{eff} de l'indice effectif. On a :

$$W_{coh}(x) = W_0 exp\left(-\kappa_e x\right) \tag{5.12}$$

$$= W_0 exp\left(-\frac{4\pi}{\lambda}k_{eff}x\right) \tag{5.13}$$

où κ_e est le coefficient d'extinction, W_0 l'énergie initiale et x la profondeur.

L'énergie à une profondeur x donnée du domaine de calcul est calculée par $W_{coh}(x) = \sum_{j=1}^{N} W_{coh}(i,j)$ avec $x = i\Delta x$. La Figure 5.3 présente des applications à un milieu homogène (a) et à un milieu hétérogène (b). Ainsi, sur la Figure 5.3(a) représentant la propagation dans un milieu sans perte ($k = 0$), nous pouvons vérifier la nature non divergente du faisceau. La Figure 5.3(c) montre les flux d'énergie dans ce cas et nous pouvons

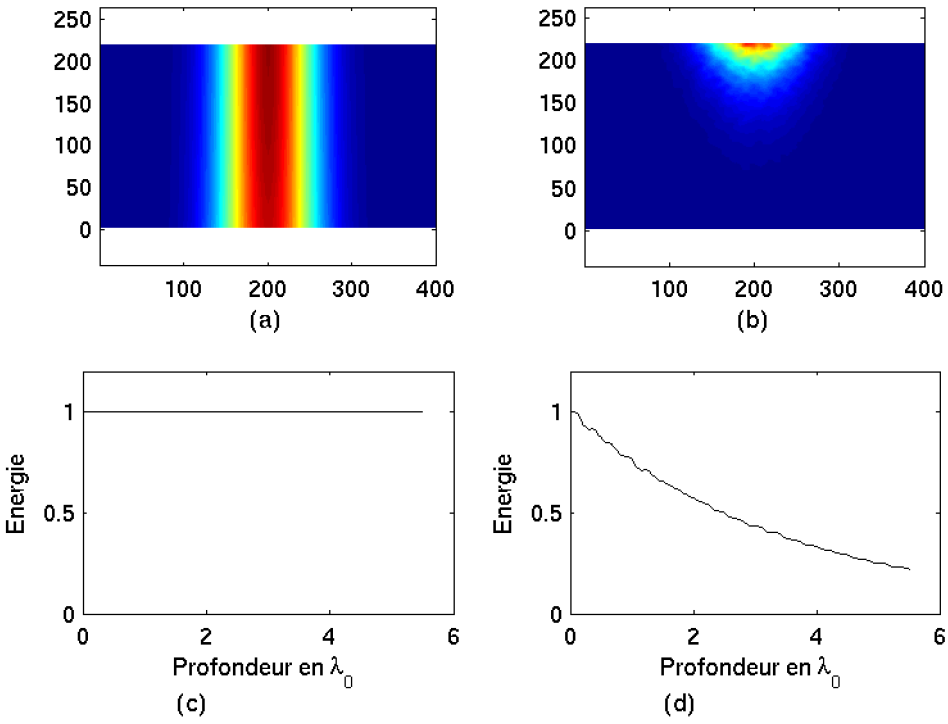


FIG. 5.3 – Décroissance exponentielle de l'énergie dans un milieu inhomogène. Les figures (a) et (b) représentent uniquement la partie contenant le milieu hôte du domaine de calcul. Le cas (a) est pour un milieu homogène d'indice optique $n_h = 1.63$ et le cas (b) pour un milieu hétérogène avec un milieu hôte d'indice optique $n_h = 1.63$, et des particules d'indice $n_i = 2.25 + i0.2$ et de rayon $\lambda_0/40$ pour une fraction volumique de 25%. Les résultats sont moyennés sur 20 réalisations. La figure (c) (resp. d) représente l'évolution de W_{coh} en fonction de la profondeur dans le cas (a) (resp. b).

vérifier que celle ci reste stable : aucune perte numérique n'a été introduite par les conditions absorbantes et la divergence du faisceau. La Figure 5.3(b) présente la propagation de l'énergie à travers un milieu hôte sans perte et des particules absorbantes : nous pouvons observer l'évolution de l'énergie cohérente. Le tracé du flux d'énergie en fonction de la profondeur (Figure 5.3(d)) montre une évolution exponentielle. Le coefficient d'extinction peut alors être calculé en calculant la pente du logarithme de l'énergie. Pour cela nous calculons le rapport de l'énergie entre deux profondeurs séparées d'une maille x et $x+\Delta x$ à partir de l'équation (5.13) :

$$\frac{W_{coh}(x)}{W_{coh}(x+\Delta x)} = exp\left(-\frac{4\pi}{\lambda}k\Delta x\right) \tag{5.14}$$

Soit, en utilisant le logarithme népérien :

$$k = -\frac{\lambda}{4\pi}\frac{ln(W_{coh}(x)) - ln(W_{coh}(x+\Delta x))}{\Delta x} \tag{5.15}$$

Cette méthodologie est très facile à implémenter dans le cas de la FDTD où les champs sont connus naturellement sur toutes les mailles de l'espace de calcul. Elle s'est avérée être plus précise que les méthodes présentées précédemment.

5.3.3 Détermination de la partie réelle de l'indice effectif

La partie réelle de l'indice effectif est reliée à la phase du champ se propageant dans le milieu par la formule suivante :

$$\phi(x) = \frac{2\pi}{\lambda}n'x \tag{5.16}$$

soit :

$$\phi(x) - \phi(x+\Delta x) = \frac{2\pi}{\lambda}n'\Delta x \tag{5.17}$$

d'où :

$$n' = \frac{\lambda}{2\pi}\frac{\phi(x) - \phi(x+\Delta x)}{\Delta x} \tag{5.18}$$

Nous n'utilisons pas directement cette formule car la détermination numérique de la phase ϕ est complexe lorsqu'elle est proche de 2π. Pour cela, nous calculons le champ F pour deux profondeurs séparées de Δx :

$$F(x) = |F(x)|\, e^{i\phi(x)} \tag{5.19}$$

$$F(x+\Delta x) = |F(x+\Delta x)|\, e^{i\phi(x+\Delta x)} \tag{5.20}$$

d'où :

$$\frac{F(x)}{F(x+\Delta x)} = \frac{|F(x)|}{|F(x+\Delta x)|} e^{i(\phi(x)-\phi(x+\Delta x))} \tag{5.21}$$

soit :

$$\phi\left(\frac{F(x)}{F(x+\Delta x)}\right) = \phi(x) - \phi(x+\Delta x) \tag{5.22}$$

d'où :

$$n' = \frac{\lambda}{2\pi\Delta x}\phi\left(\frac{F(x)}{F(x+\Delta x)}\right) \tag{5.23}$$

Cette formulation permet d'obtenir la différence de phase sans effectuer les deux calculs de phase présents dans l'équation (5.18). Les deux points x et $x+\Delta x$ sont suffisamment proches pour que le calcul de la phase dans $F(x)/F(x+\Delta x)$ soit suffisamment petit pour ne pas introduire trop d'erreur numérique lors du calcul de l'arc-tangente. Néanmoins, la détermination de la partie réelle n'est pas aussi précise que celle de la partie imaginaire car la détermination de la phase reste imprécise lorsque les fluctuations sont importantes.

5.3.4 Limites de la méthode

La principale difficulté rencontrée lors de l'utilisation de cet algorithme est la détermination du champ cohérent à partir des données FDTD. En effet, l'intensité cohérente est déterminée à partir du champ E (ou H) par :

$$I_{coh} = \langle EE^* \rangle \tag{5.24}$$

où $*$ représente la conjugaison. Comme nous avons un nombre fini N de milieux, cette équation s'écrit :

$$I_{coh}^N = \frac{1}{N^2}\sum_{n=1}^{N} E(n)E^*(n) \tag{5.25}$$

Nous avons vu que le champ total E peut se décomposer en une composante cohérente E_{coh} identique quel que soit le milieu et une composante incohérente E_{incoh} variable. L'équation (5.25) s'écrit alors :

$$I_{coh}^N = \frac{1}{N^2}\sum_{n=1}^{N}(E_{coh}+E_{incoh}(n))(E_{coh}^*+E_{incoh}^*(n)) \quad (5.26)$$

$$= |E_{coh}|^2 + E_{coh}\frac{\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}^*(n)}{N} + E_{coh}^*\frac{\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}(n)}{N} + \frac{1}{N^2}\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}(n)\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}^*(n) \quad (5.27)$$

Or, on a par définition de l'incohérent :

$$\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}(n) \approx 0 \quad (5.28)$$

$$\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}(n)\sum_{n=1}^{N}E_{incoh}^*(n) \approx \sum_{n=1}^{N}|E_{incoh}|^2 \quad (5.29)$$

On a donc finalement :

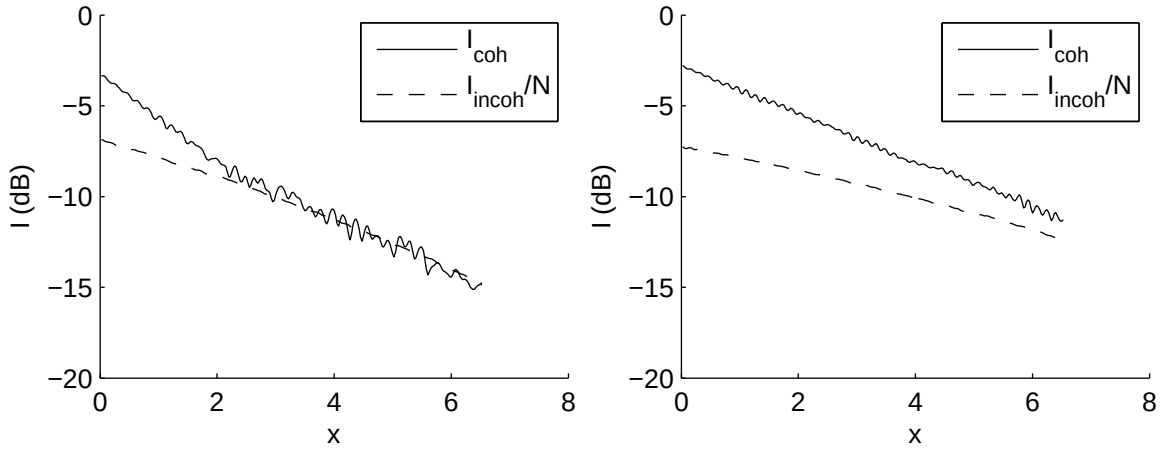
$$I_{coh}^N \approx |E_{coh}|^2 + \frac{1}{N^2}\sum_{n=1}^{N}|E_{incoh}|^2 \quad (5.30)$$

$$\approx I_{coh}^{\infty} + \frac{1}{N}I_{incoh}^N \quad (5.31)$$

Ainsi, on peut observer deux zones lors de la détermination du cohérent :

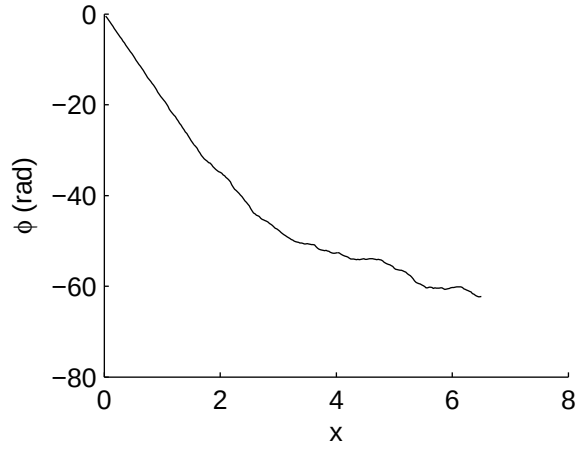
- Lorsque $I_{coh}^{\infty} \gg \frac{1}{N}I_{incoh}^N$, on a $I_{coh}^N \sim I_{coh}^{\infty}$ comme attendu ;
- Lorsque $I_{coh}^{\infty} \ll \frac{1}{N}I_{incoh}^N$, on a $I_{coh}^N \sim \frac{1}{N}I_{incoh}^N$et on ne représente plus correctement I_{coh}^{∞}. L'inversion pour déterminer l'indice effectif n_{eff} n'est alors plus possible et il faut alors augmenter le nombre N de milieux utilisés pour la moyenne afin de diminuer la valeur de $\frac{1}{N}I_{incoh}^N$.

La Figure 5.4 présente l'évolution de I_{coh}^N et I_{incoh}^N/N ainsi que de la phase cohérente associée pour deux fractions volumiques différentes. Dans le premier cas ($f_v = 35\%$), on observe que pour des profondeurs x comprises entre 0 et $1.8\lambda_0$ la décroissance de l'intensité cohérente et l'évolution de la phase est linéaire et rapide. Pour des profondeurs supérieures, l'intensité I_{coh}^N devient égale à I_{incoh}^N/N comme prévu par la théorie. Rappelons que dans ce cas (voir l'annexe D), l'extinction est plus forte pour une fraction volumique de 30% que pour une fraction volumique de 50%. Ainsi, pour pouvoir déterminer correctement I_{coh}^{∞} à partir de I_{coh}^N sur tout le domaine observé (pour x compris entre 0 et 6), il faudrait diminuer l'intensité I_{incoh}^N/N de 10 dB et donc, faire l'étude sur 3000 milieux. Dans le second cas ($f_v = 50\%$), nous avons toujours $I_{coh}^N \gg I_{incoh}^N/N$. Ainsi I_{coh}^N et la phase ont

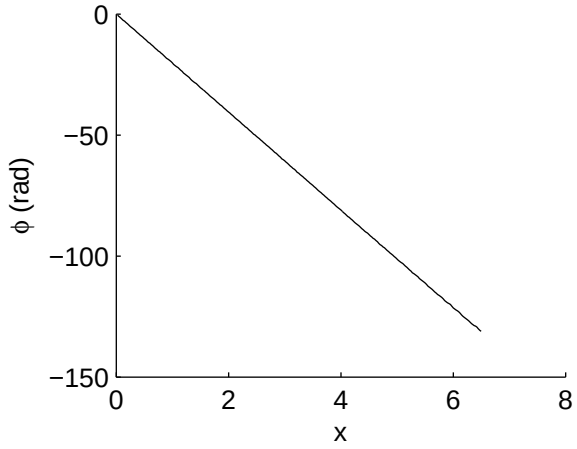


(a) $f_v = 30\%$ I_{coh} et I_{incoh}/N

(b) $f_v = 50\%$ I_{coh} et I_{incoh}/N



(c) $f_v = 30\%$ ϕ_{coh}



(d) $f_v = 50\%$ ϕ_{coh}

FIG. 5.4 – Évolution de I^N_{coh} et I^N_{incoh}/N pour $N = 300$ ainsi que de la phase associée pour des particules d'indice $n_i = 4$ et de rayon $\lambda_0/20$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63$ pour une fraction volumique de 35% et de 50% en fonction de la profondeur x exprimée en λ_0.

un comportement linéaire sur tout le domaine étudié. Il sera, dans ce cas, plus facile de déterminer l'indice effectif précisément puisque l'intégralité de la courbe peut être utilisée par l'algorithme d'inversion.

5.4 Comparaisons

5.4.1 Introduction

Dans cette partie, les résultats des modèles de Keller, de Foldy-Twersky et les approximations de Maxwell-Garnett et de Bruggeman sont comparés aux résultats numériques issus de la FDTD. Pour cette comparaison, il faut prendre garde à la discrétisation. En effet, les plus petites particules ont le même rayon que le pas de maillage. Dans ce cas, nous utiliserons un rayon effectif équivalent pour la comparaisons avec les modèles de Keller et de Foldy-Twersky. Ce rayon est obtenu en recherchant le cylindre équivalent de même surface que le carré maillé. Ainsi, il s'agit de :

$$r_{eff} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} r \tag{5.32}$$

Afin de simplifier l'écriture, nous garderons les notations en r, mais c'est le rayon r_{eff} qui est pris en compte lors des calculs. De plus, nous calculerons à chaque fois numériquement la fraction volumique réelle. En effet, des différences significatives apparaissent pour les plus petits rayons entre la fraction volumique des cylindres et leurs équivalents maillés. Ainsi, pour chaque taille de particule les points FDTD n'auront pas exactement la même abscisse sur l'axe des fractions volumiques.

Dans une première partie, nous allons étudier des particules sans pertes en polarisation TM. Nous verrons l'influence de la fonction de corrélation de paires pour le modèle de Keller, puis nous verrons l'influence de pertes variant de $k = 0$ à $k = 0.2$ dans des particules de rayon $\lambda_0/40$. Nous ferons ensuite varier la taille des particules entre $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/5$ pour les particules de perte $k = 0.2$.

Dans une seconde partie, nous étudierons des milieux hétérogènes à pertes dans les deux polarisations. Nous commencerons par faire varier les pertes dans le milieu hôte entre $k = 0.02$ et $k = 0.2$ pour des particules de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice 2.25. Puis nous ferons varier l'indice des particules entre $n = 1$ et $n = 2.25$ et finalement, nous étudierons l'influence de la taille des particules en la faisant varier entre $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/10$.

Nous finirons par une extension de la théorie de Foldy-Twersky et de Keller pour des polymatériaux.

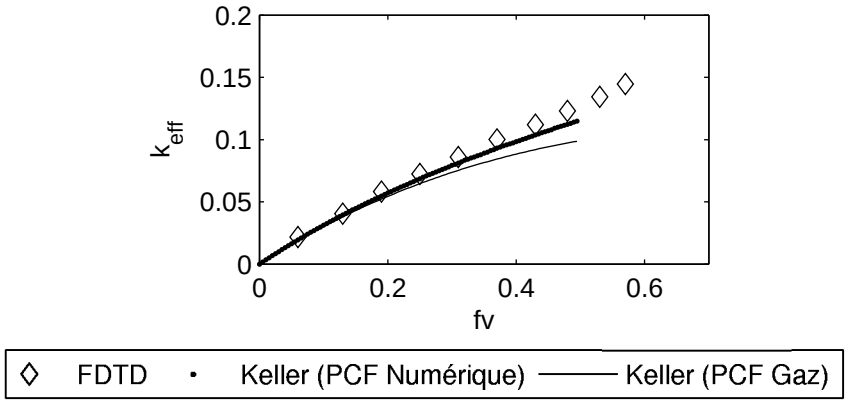


FIG. 5.5 – Partie imaginaire de l'indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 2.25 + i0.2$ dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63$.

5.4.2 Milieux sans pertes

Dans les exemples ci-dessous, l'indice du milieu hôte est réel $n_h = 1.63$ tandis que l'indice des particules est $n_i = 2.25 + ik$ avec k prenant différentes valeurs pour tenir compte de particules plus ou moins absorbantes. Le rayon des particules r_i varie de $\lambda_0/40$ à $\lambda_0/5$.

5.4.2.1 Influence de la fonction de corrélation de paires (PCF) sur l'approximation de Keller

Le modèle de Keller (eq. 5.7) dépend de la fonction de corrélation de paires pour représenter correctement la diffusion double. Dans le cas du modèle des sphères dures, une première approximation utilise la fonction de corrélation de paires suivante :

$$g(r) = \begin{cases} 0 \; si \; r < 2a \\ 1 \; sinon \end{cases} \tag{5.33}$$

Cette formulation permet de borner et de simplifier l'intégrale infinie présente dans la formulation de Keller et donc, de faciliter son calcul. La seconde approche est basée sur la fonction de corrélation de paires numérique calculée précédemment (Chapitre 3).

Pour cette étude, nous utilisons des particules de rayon $r_i = \lambda_0/20$ et $k = 0.2$. Nous comparons les résultats de l'indice obtenu par FDTD avec deux approximations du modèle de Keller. Les résultats sont présentés Figure 5.5.

Jusqu'à une fraction volumique de 20%, nous notons que nous avons une concordance excellente entre les trois approches. Au dessus de 20%, l'approximation de Keller utilisant le PCF numérique s'éloigne peu à peu des résultats obtenus par FDTD, mais jusqu'à 30% la comparaison reste excellente et jusqu'à 50% la différence reste faible. L' approximation de Keller utilisant la fonction de corrélation de paire de type gaz s'éloigne beaucoup plus

rapidement dès 20% et les résultats sont erronés aux fortes fractions volumiques. Cette étude montre l'intérêt d'utiliser une PCF numérique pour des larges fractions volumiques. C'est cette approche que nous utiliserons.

Ainsi, nous avons effectué le calcul de la PCF pour toutes les fractions volumiques comprises entre 1 et 50% pour une taille de particule de rayon $r_i = \lambda_0/20$. Son utilisation permet d'améliorer les résultats pour des fractions supérieures à 20% pour un coût numérique faible. En effet, elle n'est calculée qu'une seule fois pour une taille de particule à toutes les fractions volumiques.

5.4.2.2 Influence des pertes dans les particules

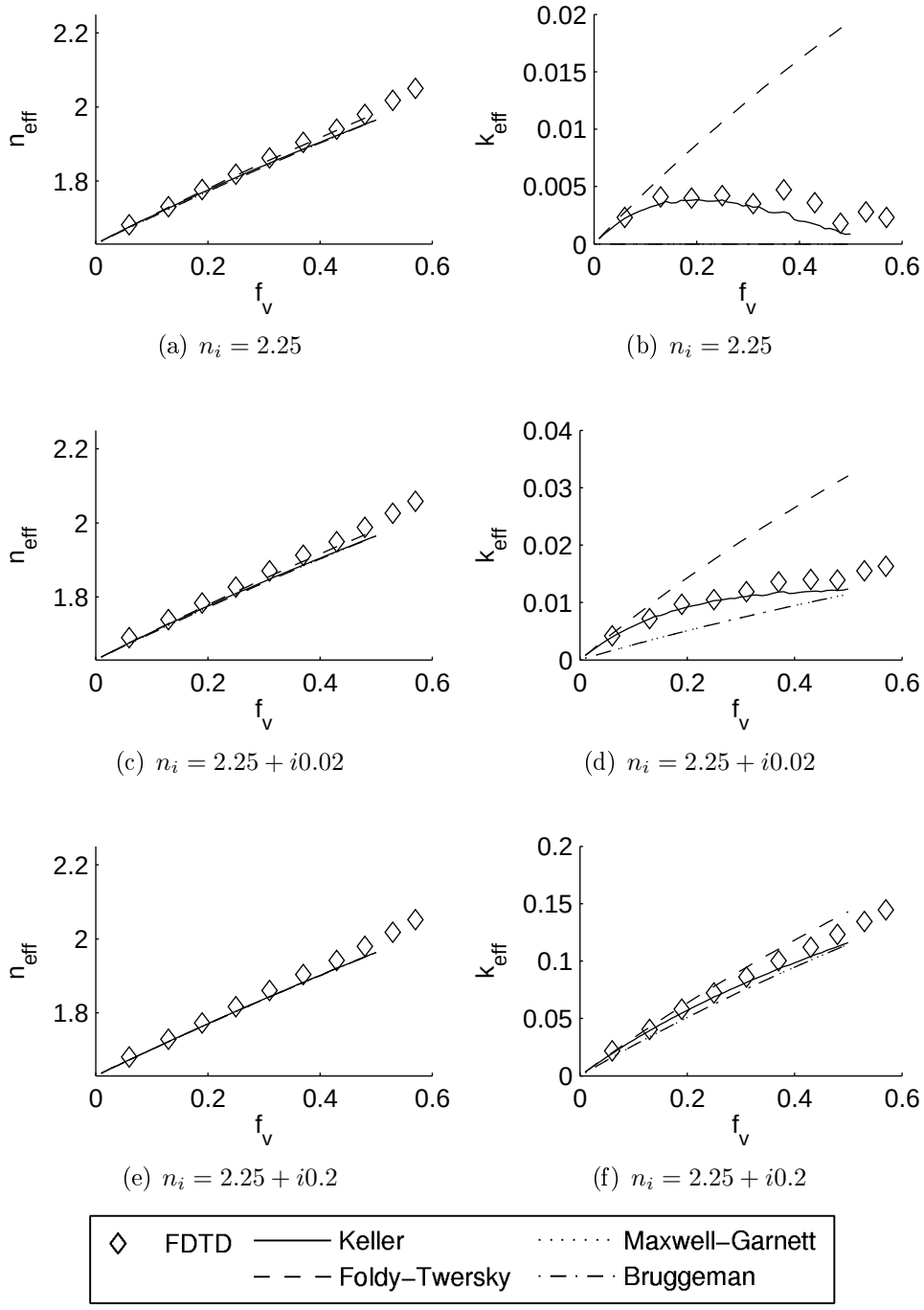
Nous considérons ici des particules de rayon $a = \lambda/40$, de partie imaginaire de l'indice $k = 0$, 0.02 et 0.2, et nous comparons les résultats FDTD avec les quatre lois introduites précédemment (Figure 5.6). La partie réelle de l'indice effectif est bien représentée par les quatre lois étudiées. Les différences avec les résultats obtenus par FDTD restent faibles sur l'ensemble des fractions volumiques pour toutes les absorptions étudiées.

Pour la partie imaginaire de l'indice effectif, quand $k = 0$, nous pouvons voir une bonne concordance entre les résultats FDTD et le modèle de Keller, les deux s'éloignant très rapidement du modèle de Foldy-Twersky. Dans ce cas l'extinction est uniquement due aux pertes par diffusion et le modèle de Foldy-Twersky surestime largement l'extinction. Au dessus d'une fraction volumique de 10%, la FDTD présente une saturation de l'extinction qui reste identique à mesure que la fraction volumique augmente, ce qui est bien reproduit par le modèle de Keller jusqu'à $f_v = 30\%$. Les lois de Bruggeman et de Maxwell-Garnett prédisent une extinction nulle, ce qui est normal vue leur nature.

Dans le cas des particules à pertes $k = 0.2$, le modèle de Foldy-Twersky surestime légèrement le coefficient de propagation effectif déterminé par la FDTD. Le modèle de Keller le sous-estime légèrement. Jusqu'à des fractions volumiques de 50%, la concordance entre les quatre approches reste acceptable, ce qui est logique puisque l'absorption est le phénomène prédominant et qu'il est pris en compte correctement dans les quatre approches.

L'indice effectif obtenu à partir des particules avec k=0.02 présente un comportement intermédiaire entre les cas précédents avec une surestimation forte de l'extinction par le modèle de Foldy-Twersky au dessus de 10% et une sous estimation croissante de l'approximation de Keller au dessus de 30%. Les lois de Bruggeman ou de Maxwell Garnett sous-estiment largement l'extinction.

Sur ces trois exemples, nous pouvons conclure que pour cette taille et ces indices, le domaine de validité du modèle de Foldy-Twersky croît avec les pertes par absorption. Il reste précis jusqu'à des fractions volumique de 10%. L'approximation de Keller est très précise et reste valide jusqu'à des fractions volumiques de 30%.



(a) $n_i = 2.25$ (b) $n_i = 2.25$

(c) $n_i = 2.25 + i0.02$ (d) $n_i = 2.25 + i0.02$

(e) $n_i = 2.25 + i0.2$ (f) $n_i = 2.25 + i0.2$

FIG. 5.6 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique (a-b) $n_i = 2.25$, (c-d) $n_i = 2.25 + i0.02$ et (e-f) $n_i = 2.25 + i0.2$ dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63$ en polarisation TM.

5.4.2.3 Influence de la taille des particules

Les particules sont d'indice $n_i = 1.63 + i0.2$ et de rayon variable r_i compris entre $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/5$. Nous comparons les résultats obtenus par la FDTD avec les modèle de Keller et de Foldy-Twersky et les lois de Bruggeman et Maxwell-Garnett en fonction de la fraction volumique f_v. Les résultats sont présentés Figure 5.7.

En ce qui concerne la partie imaginaire, lorsque r_i croît, nous pouvons noter que les approximations de Bruggeman et de Maxwell-Garnett s'éloignent des résultats numériques de la FDTD. Dans tous les cas, le modèle de Keller donne d'excellents résultats jusqu'à des fractions volumiques de 30%. Au dessus de cette limite, il sous-estime k_{eff} pour les particules de rayon $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/20$ et le surestime pour les plus grosses particules. Le domaine de validité du modèle de Foldy-Twersky croît avec la taille des particules. Il permet de représenter correctement l'évolution de l'extinction jusqu'à des fractions volumiques de 10% pour des particules de rayon $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/20$ et jusqu'à 30% pour les particules de rayon $\lambda_0/10$ et $\lambda_0/5$. Ainsi, l'approximation de Foldy-Twersky semble être mieux caractérisée par le nombre de centres par unité de volume que par la fraction volumique.

Pour la partie réelle de l'indice effectif, nous pouvons vérifier que l'approximation de Bruggeman et de Maxwell-Garnett donnent de bons résultats sauf pour des inclusions de grande taille. Le modèle de Keller donne toujours d'excellents résultats. Le modèle de Foldy-Twersky reste valable jusqu'à des tailles de particules de $\lambda_0/20$ mais pour des tailles de particules supérieures, son domaine de validité est restreint à 10%.

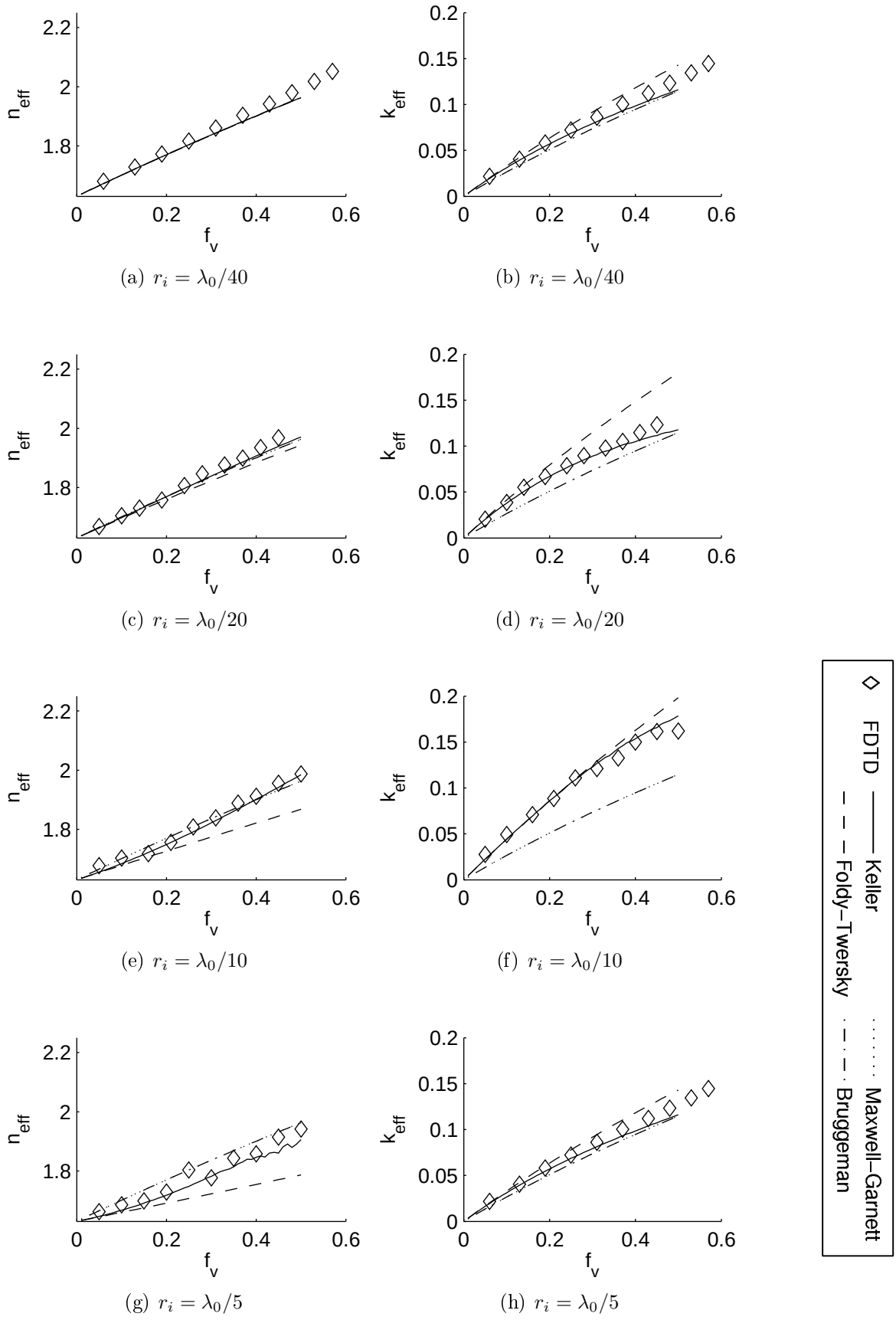
5.4.3 Milieux à pertes

Pour l'instant, nous avons traité des particules à pertes dans un milieu sans pertes. Ce n'est pas la configuration la plus probable. En effet, dans le domaine optique, les pertes sont également dans le milieu. Aussi allons nous reprendre la même exploration que précédemment en faisant varier les pertes dans le milieu entre $k = 0.02$ et $k = 0.2$. Nous allons également l'enrichir en explorant l'influence de la polarisation. Nous ferons varier ensuite la taille des particules entre $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/10$ ainsi que leur indice optique entre 1 et 4. Les résultats complets sont présentés en annexe D.

5.4.3.1 Influence des pertes dans le milieu

Les particules ont un rayon de $\lambda_0/40$ et un indice de 2.25. Les deux polarisations ont un comportement différent. Aussi, nous allons décrire l'évolution de l'indice effectif en polarisation TM, puis, nous ferons cette analyse en polarisation TE.

Polarisation TM Nous considérons ici sur la Figure 5.8 des particules de rayon $r_i = \lambda_0/40$. La partie imaginaire k de l'indice optique du milieu hôte prend les valeurs $k = 0$,



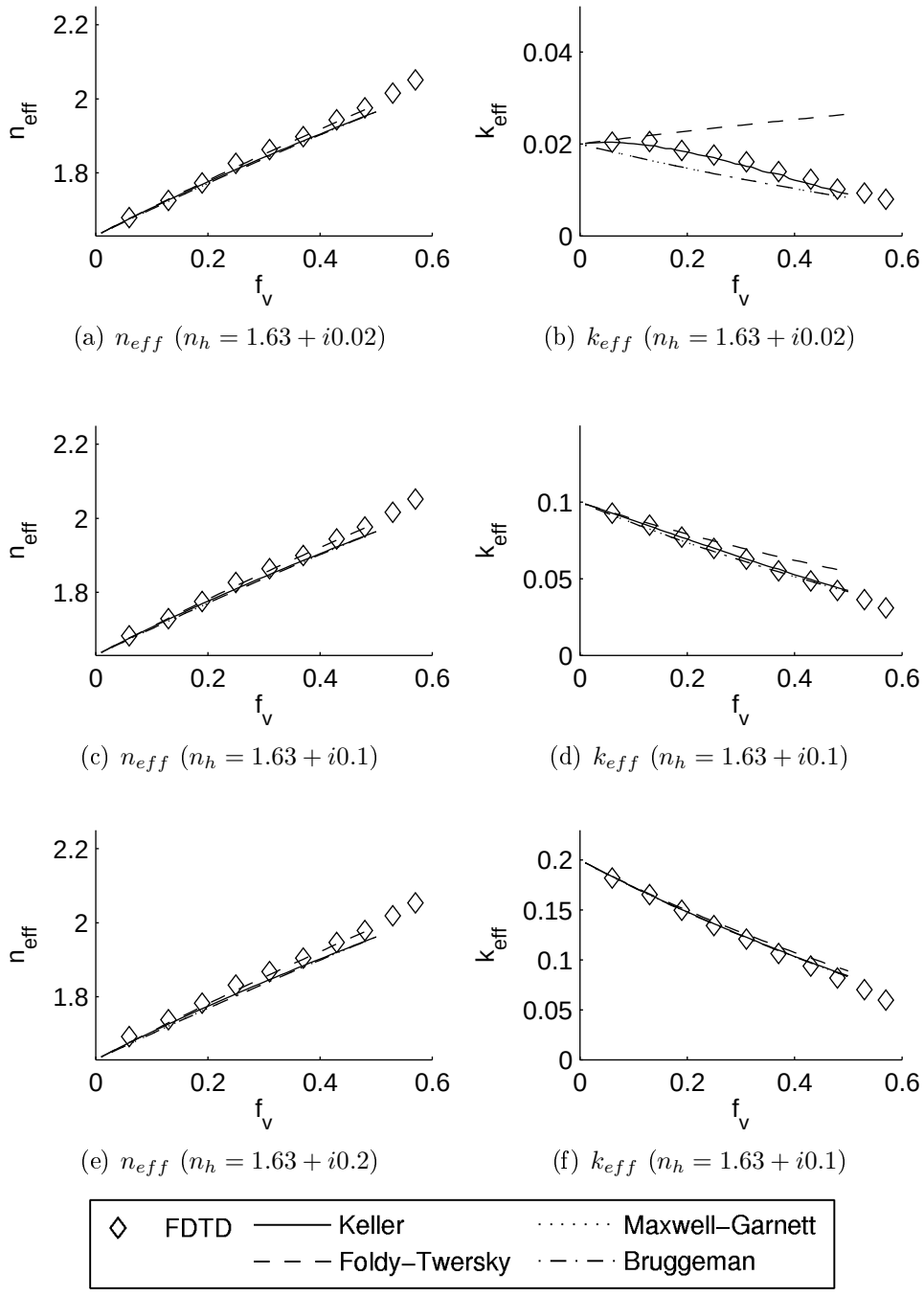
(a) $r_i = \lambda_0/40$ (b) $r_i = \lambda_0/40$

(c) $r_i = \lambda_0/20$ (d) $r_i = \lambda_0/20$

(e) $r_i = \lambda_0/10$ (f) $r_i = \lambda_0/10$

(g) $r_i = \lambda_0/5$ (h) $r_i = \lambda_0/5$

FIG. 5.7 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon (a-b) $\lambda_0/40$ (c-d) $\lambda_0/20$ (e-f) $\lambda_0/10$ et (g-h)$\lambda_0/5$ et d'indice optique $n_i = 2.25 + i0.2$ dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63$ en polarisation TM.



(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

FIG. 5.8 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

0.02 et 0.2. Nous comparons les résultats FDTD avec les quatre lois de Foldy-Twersky, de Keller, de Maxwell-Garnett et de Bruggeman.

Lorsque la fraction volumique augmente, deux phénomènes sont en concurrence. Le premier est la diffusion par les particules qui aura tout d'abord tendance à faire croître l'extinction, au moins en régime de diffusion simple. Dans le même temps, l'absorption baisse car on ajoute un matériaux sans pertes (les particules) dans un milieu à pertes (le milieu hôte) ce qui aura tendance à diminuer l'extinction. Ainsi, suivant la contribution prédominante, on assistera à une augmentation de l'extinction lorsque la diffusion par les particules sera supérieure à la diminution simultanée de l'absorption ou une diminution due au phénomène inverse.

Ainsi, quand $k = 0.02$, on observe tout d'abord une augmentation de l'extinction due à la diffusion des particules pour $f_v < 10\%$ puis une baisse due à la diminution de l'absorption par le milieu. Le modèle de Keller et les résultats numériques sont identiques pour toutes les fractions volumiques étudiées. Ils s'éloignent très rapidement du modèle de Foldy-Twersky qui surestime toujours l'extinction. Les modèles de Maxwell-Garnett et de Bruggeman ne permettent pas de prendre en compte l'évolution de l'extinction lorsqu'elle est due à la diffusion.

Dans le cas intermédiaire, le modèle de Keller représente toujours parfaitement les variations d'indices. Dans ce cas, l'extinction diminue dès le départ. Le modèle de Foldy-Twersky présente une légère surestimation de l'extinction pour des fractions volumiques supérieures à 10%.

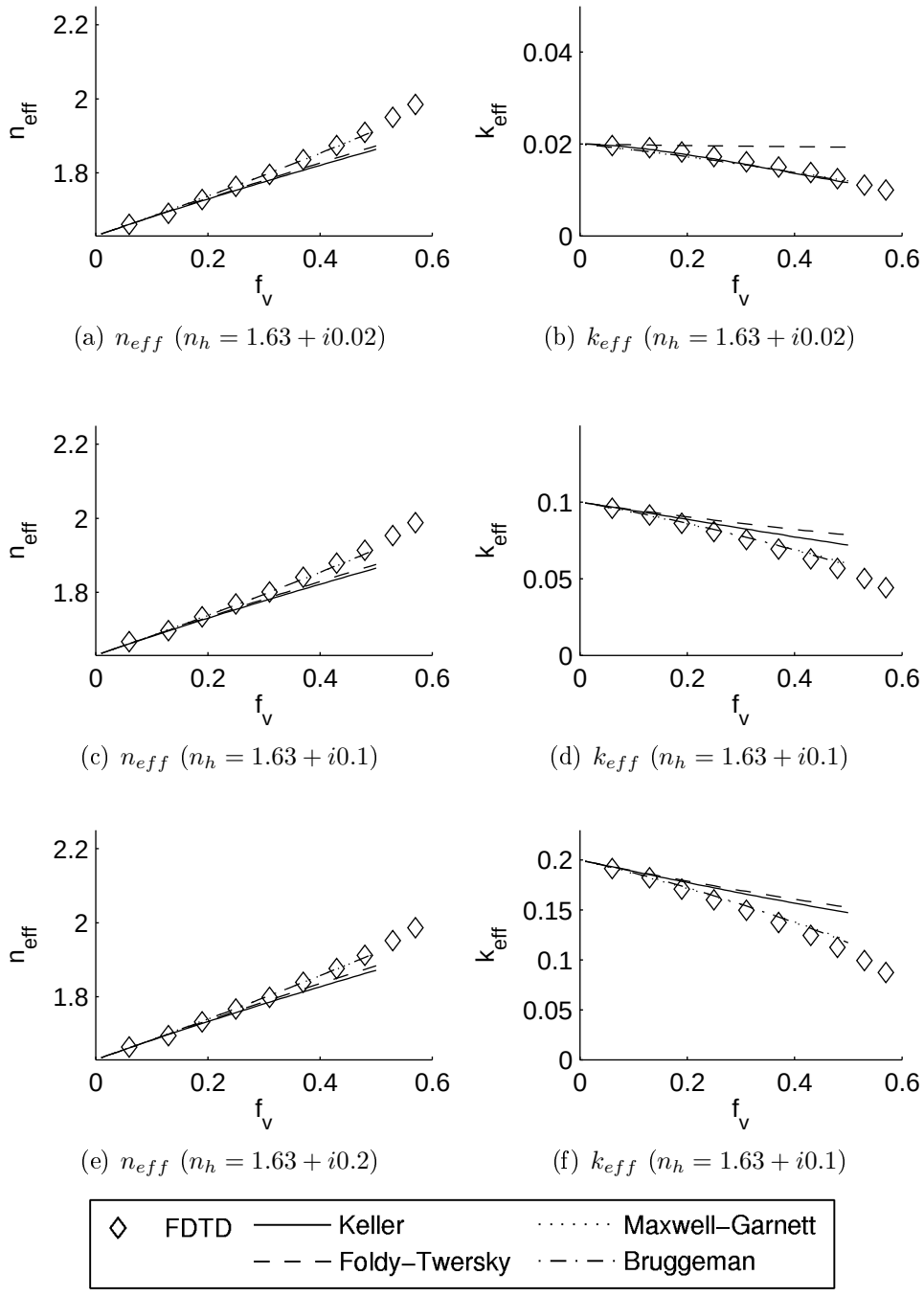
Dans le cas des particules à pertes, les modèles de Keller et de Foldy-Twersky représentent correctement les résultats numériques de la FDTD jusqu'à des fractions de $f_v = 50\%$. Ce résultat est logique puisque l'absorption est le phénomène qui prédomine et celui-ci est correctement pris en compte dans les trois approches.

On retrouve donc des résultats quasi-identiques au cas des particules à pertes. C'est-à-dire que l'on retrouve une influence de la diffusion incohérente uniquement pour les pertes les plus faibles ($k = 0.02$) que le modèle de Foldy-Twersky et de Keller permettent de représenter. Lorsque les pertes augmentent, on a alors $\kappa_e \approx \kappa_a$ et tous les modèles donnent des résultats corrects.

Polarisation TE La Figure 5.9 présente les résultats obtenus en polarisation TE.

Les variations de la partie réelle de l'indice effectif sont correctement prises en compte par les lois de Maxwell-Garnett et Bruggeman sur l'ensemble du domaine des fractions volumiques. Néanmoins, un écart significatif entre les résultats FDTD et les modèles de Keller et de Foldy-Twersky apparaît à partir d'une fraction volumique de 20%.

Dans le premier cas ($k = 0.02$), le modèle de Keller permet de représenter correctement l'évolution de l'extinction. On a rapidement $\kappa_e = \kappa_a$ et les lois de mélange permettent donc d'en suivre les variations. Le modèle de Foldy-Twersky permet de représenter la



(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

FIG. 5.9 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

partie imaginaire de l'indice effectif jusqu'à des fractions volumiques de 5%. Au delà, il surestime l'extinction. Dans ce cas, les modèles les plus simples donnent les meilleurs résultats.

Lorsque les pertes dans le milieu augmentent ($k = 0.1$), le modèle de Keller s'éloigne des résultats FDTD à partir d'une fraction volumique de 10% et surestime alors l'extinction, son comportement est alors relativement proche du modèle de Foldy-Twersky. La meilleure approximation est toujours donnée par les deux modèles les plus simples.

Finalement, lorsque l'absorption est maximale, le modèle de Foldy-Twersky et de Keller se confondent mais ne donnent des résultats corrects que pour des fractions volumiques inférieures à 10%. Bruggeman et Maxwell-Garnett donnent toujours d'excellents résultats.

Pour mieux comprendre ce phénomène, nous utilisons des particules d'indice optique $n_i = 4$ (Figure 5.10). L'effet sur la partie réelle est beaucoup plus marqué et seuls les modèles de Bruggeman et de Maxwell-Garnett permettent de représenter celle-ci sur l'ensemble des fractions volumiques.

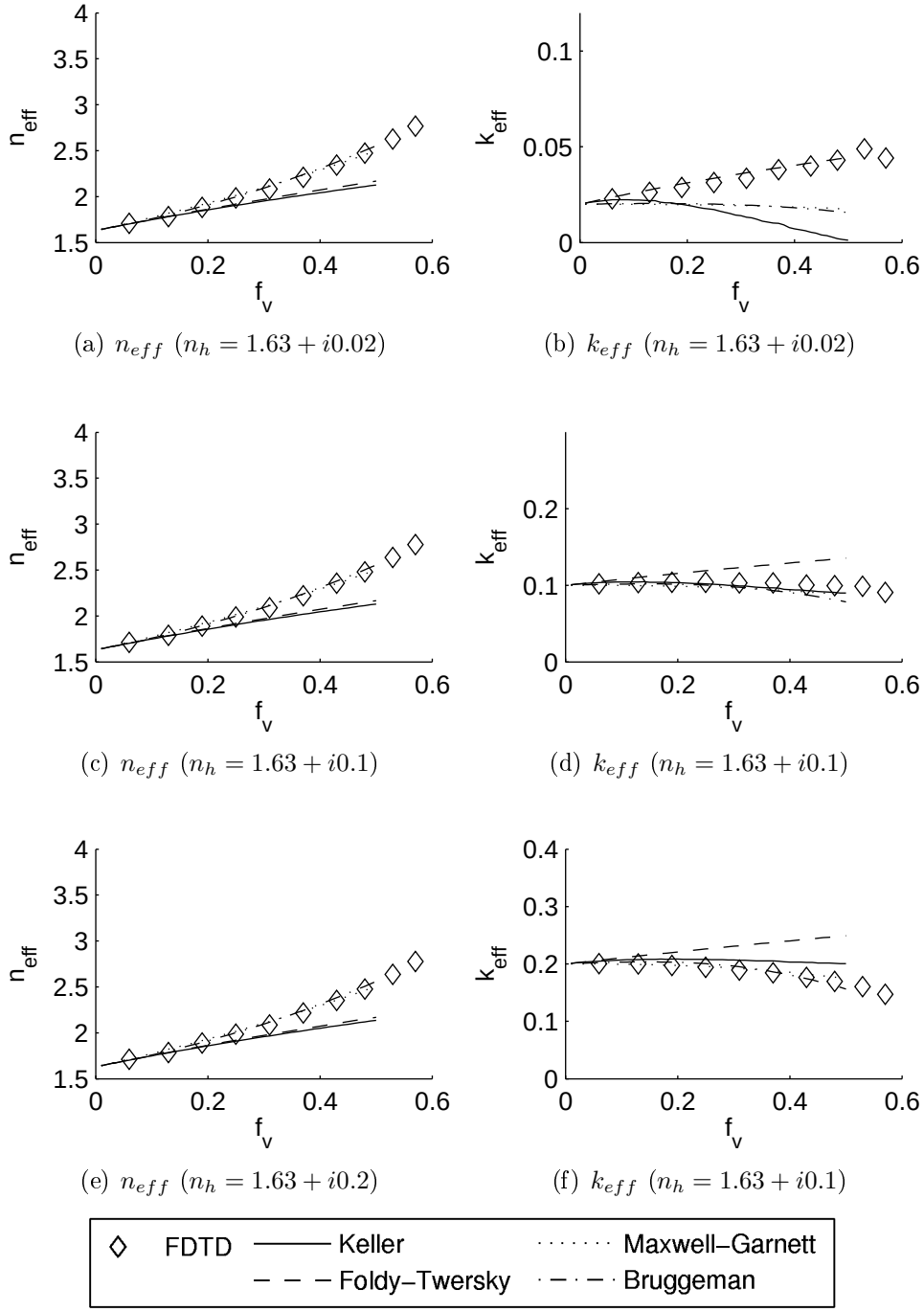
Pour l'absorption la plus faible, nous avons une augmentation continue de l'extinction. Celle-ci est donc due à la diffusion. Le modèle de Keller permet d'obtenir l'extinction jusqu'à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. Le modèle de Foldy-Twersky représente correctement la partie imaginaire de l'indice effectif pour toutes les fractions volumiques. La diffusion incohérente est prépondérante ($\kappa_d \gg \kappa_a$), ainsi les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman sous-estiment l'extinction.

Lorsque l'absorption du milieu hôte augmente ($k = 0.1$), l'extinction est assez stable sur l'ensemble des fraction volumiques. Le modèle de Keller et l'approximation de Maxwell-Garnett donnent d'excellents résultats jusqu'à des fractions volumiques de 30%. que l'approximation de Bruggeman sous estime l'extinction à partir d'une fraction volumique de 35%. Le modèle de Foldy-Twersky surestime la partie imaginaire de l'indice effectif lorsque la fraction volumique est supérieure à 5%.

Pour l'absorption la plus forte ($k = 0.2$), les modèles de Keller et de Foldy Twersky surestiment l'extinction pour des fractions volumiques supérieures à 10%. Le modèle de Maxwell-Garnett donne les meilleurs résultats et reste valable jusqu'à des fractions volumiques de 40%. On a donc, dans ce cas $\kappa_e \approx \kappa_a$.

Synthèse Lorsque le milieu est à pertes, le modèle de Keller permet de représenter l'évolution des parties réelle et imaginaire de l'indice effectif pour le champ cohérent en polarisation TM sur l'ensemble des fractions volumiques. Le modèle de Foldy-Twersky est limité aux faibles fractions volumiques et surestime l'extinction. Lorsque l'extinction est principalement due à l'absorption ($\kappa_e \simeq \kappa_a$), les lois de Bruggeman et de Maxwell-Garnett donnent des résultats corrects.

En polarisation TE, le modèle de Foldy-Twersky donne des résultats corrects lorsque la diffusion incohérente est importante ($\kappa_d \gg \kappa_a$). Lorsque l'extinction est surtout due à



(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

FIG. 5.10 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 4$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

l'absorption ($\kappa_e \approx \kappa_a$), les modèles de Keller et de Foldy-Twersky prédisent correctement l'extinction jusqu'à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. Au delà une approximation plus simple comme celle de Maxwell-Garnett donne de meilleurs résultats. Les deux polarisations TE et TM ont donc un comportement différent pour les modèles d'indice effectif utilisés. Ainsi, par exemple, le modèle de Keller permet de représenter l'évolution de l'extinction en polarisation TM où la diffusion des particules est isotrope (voir Chapitre 3). En polarisation TE, les particules diffusent de manière fortement anisotrope, et ce modèle ne permet plus de représenter l'évolution de l'extinction sur l'ensemble des fractions volumiques.

Il est alors difficile de connaître le comportement des différents modèles en géométrie tridimensionnelle. Des expériences numériques dans cette géométrie sont nécessaires afin de pouvoir déterminer si une des deux polarisations est plus représentative de leur domaine de validité.

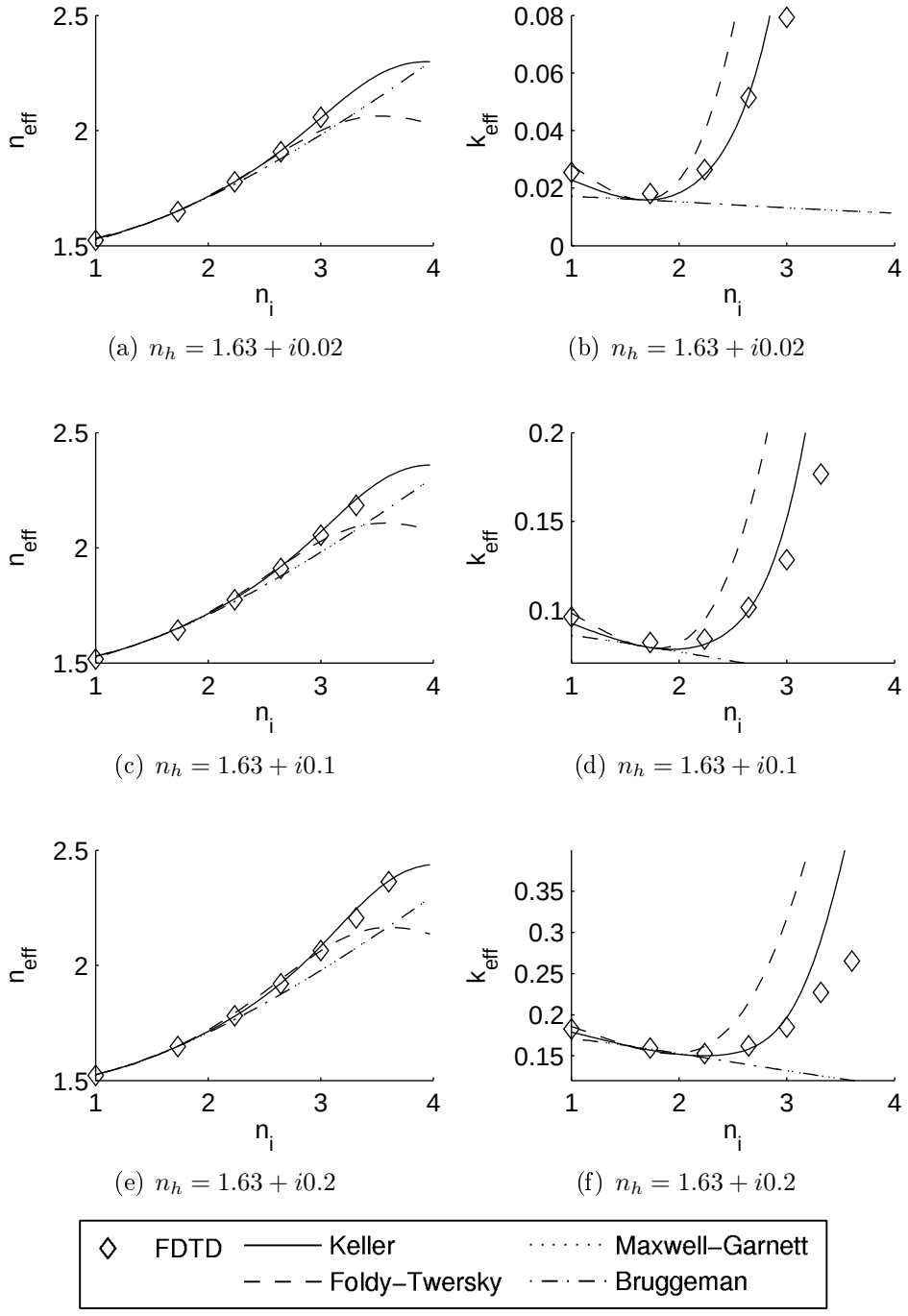
5.4.3.2 Influence de l'indice des particules

Nous allons ici étudier l'influence de l'indice optique des particules sur les modèles testés. Lorsque celui-ci augmente, la particule diffuse plus et le contraste diélectrique avec le milieu hôte augmente. Ainsi, les lois de mélanges négligeant la diffusion comme Bruggeman et Maxwell-Garnett ainsi que les théories perturbatives limitées en contraste d'indice devraient s'éloigner du résultat obtenu par la FDTD.

La Figure 5.11 présente la comparaison entre les différents modèles et les résultats obtenus par FDTD pour des particules de rayon $\lambda_0/20$ et pour un indice n_i variant de 1 à 4 pour une fraction volumique de 20% en polarisation TM.

Le modèle de Keller donne les meilleurs résultats pour un indice optique des particules de $n_i = 1$ ou $n_i = 2.25$. Pour des indices plus élevés ($n_i = 4$), on note une augmentation très forte et rapide des valeurs de k_{eff} prédites par le modèle de Keller, et une surestimation de l'extinction par rapport aux résultats FDTD. Comme nous sommes à une fraction volumique de 20%, le modèle de Foldy-Twersky surestime l'extinction dans tous les cas et la différence avec le modèle de Keller pour des indices supérieurs à 1.63 s'accentue avec l'indice optique. Le modèle de Bruggeman et le modèle de Maxwell-Garnett ne donnent pas des résultats corrects sauf pour l'absorption la plus forte ($k_h = 0.2$) où il permet de représenter assez correctement les évolutions de l'indice.

La Figure 5.12 présente la comparaison entre les modèles et les résultats obtenus par FDTD pour des particules de rayon $\lambda_0/20$ et pour un indice n_i de 1 à 4 et pour une fraction volumique de 20% en polarisation TE. Le comportement des méthodes est identique pour la partie réelle de l'indice effectif. Si toutes les méthodes donnent un résultat correct lorsque l'indice est faible pour cette fraction volumique (20%), seule les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman permettent de déterminer sa valeur pour l'indice de réfraction des particules le plus élevé ($n_i = 4$). On retrouve la même conclusion que dans le cas de

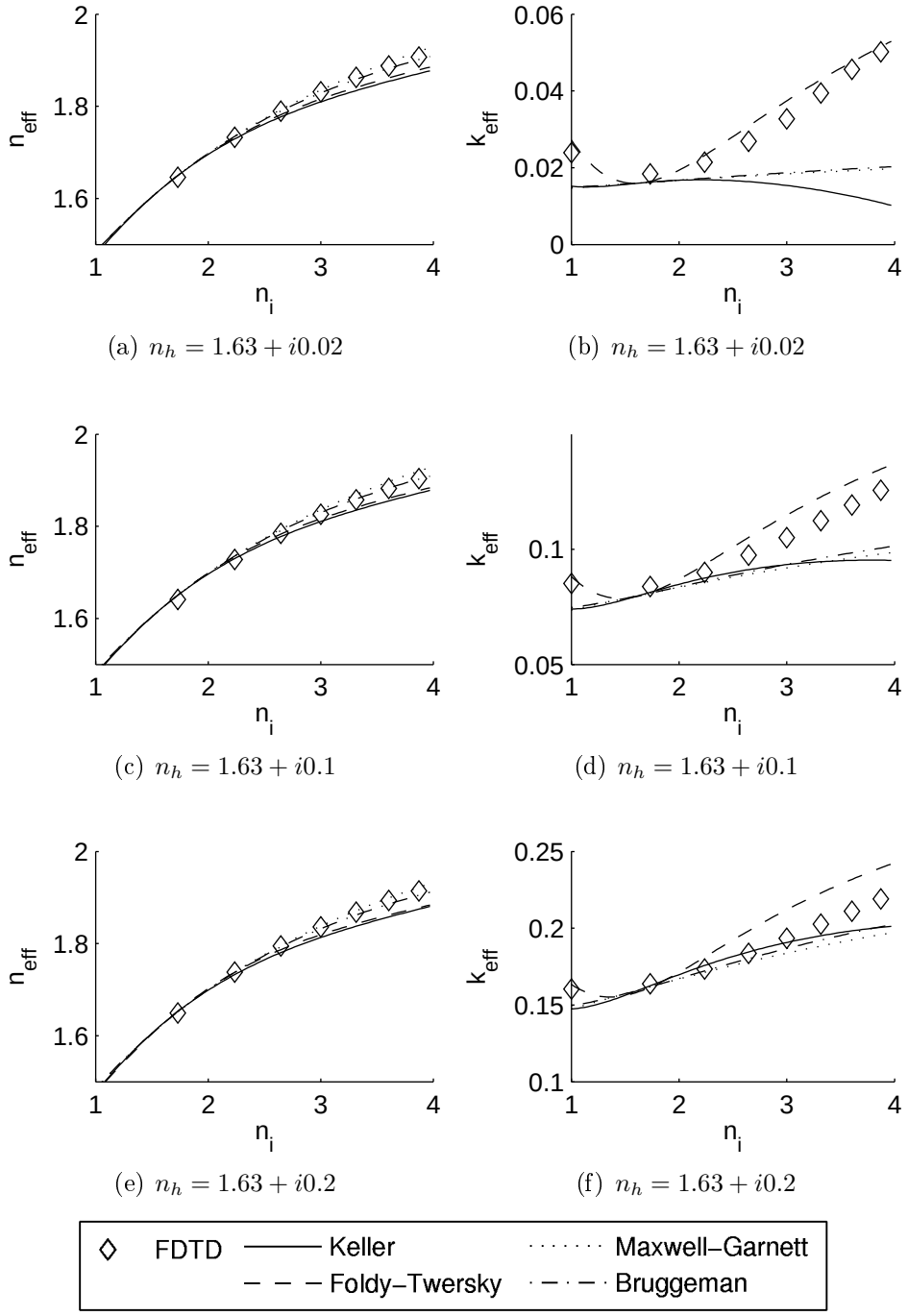


(a) $n_h = 1.63 + i0.02$ (b) $n_h = 1.63 + i0.02$

(c) $n_h = 1.63 + i0.1$ (d) $n_h = 1.63 + i0.1$

(e) $n_h = 1.63 + i0.2$ (f) $n_h = 1.63 + i0.2$

FIG. 5.11 – Indice effectif en fonction de l'indice des particules pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ pour une fraction volumique $f_v = 0.2$ dans un milieu hôte d'indice pour (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.



(a) $n_h = 1.63 + i0.02$ (b) $n_h = 1.63 + i0.02$

(c) $n_h = 1.63 + i0.1$ (d) $n_h = 1.63 + i0.1$

(e) $n_h = 1.63 + i0.2$ (f) $n_h = 1.63 + i0.2$

FIG. 5.12 – Indice effectif en fonction de l'indice des particules pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et pour une fraction volumique $f_v = 0.2$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

l'étude effectuée sur l'influence des pertes en fonction de la fraction volumique.

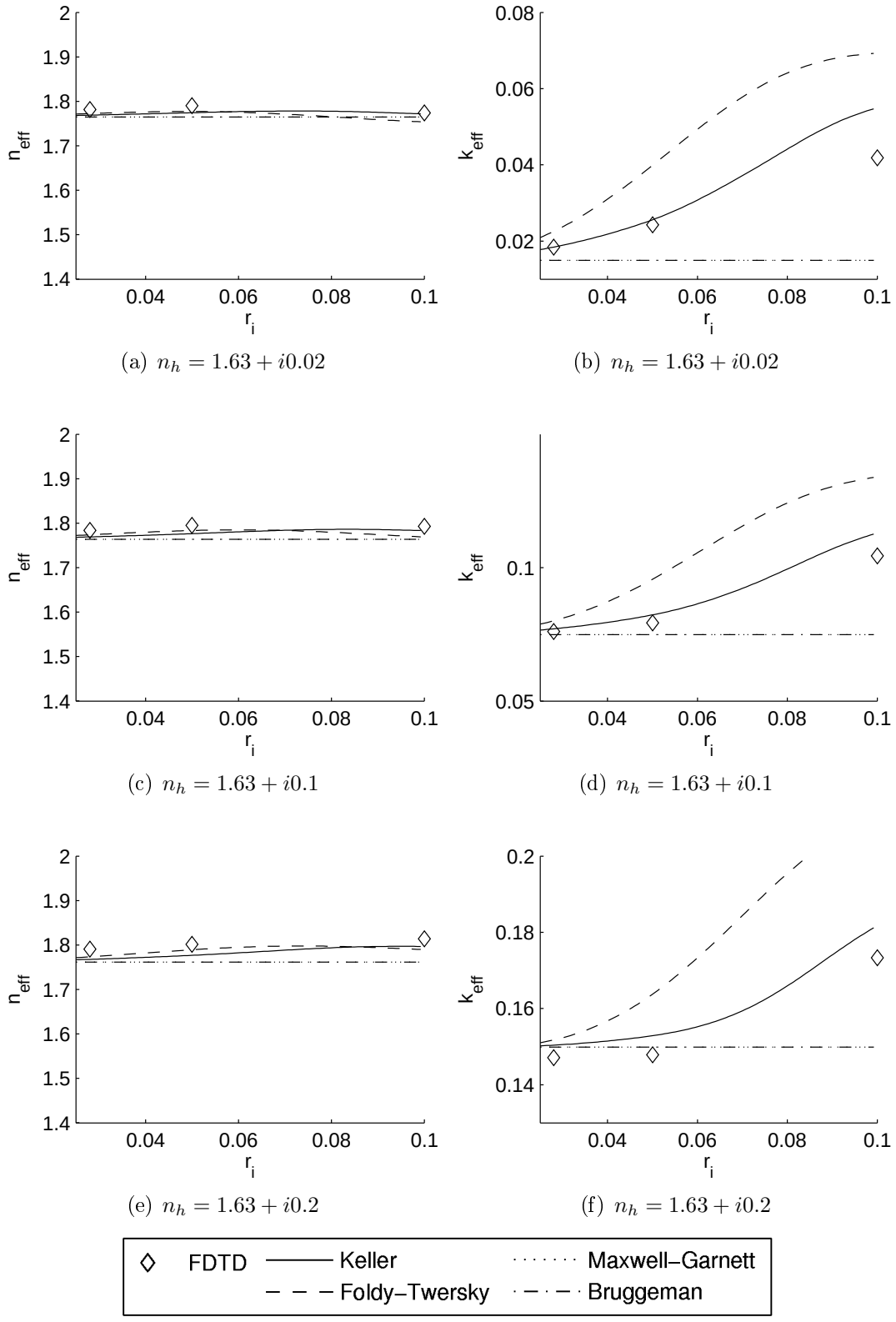
Pour la partie imaginaire de l'indice effectif, les modèles de Keller et de Foldy-Twersky ne présentent plus de forte croissance comme en polarisation TM. Dans le cas où les pertes sont les plus faibles ($n_h = 1.63 + i0.02$), seul le modèle de Foldy-Twersky a les mêmes variations que l'indice effectif en le surestimant néanmoins. Le modèle de Keller prévoit une baisse de l'extinction alors que dans les faits, elle augmente. Les lois de Bruggeman et de Maxwell Garnett restent très proches du modèle de Keller jusqu'à un indice de réfraction des particules n_i de 2. Lorsque les pertes augmentent ($n_i = 1.63 + i0.1$), les résultats suivent toujours le modèle de Foldy-Twersky mais la différence est plus importante. Le modèle de Keller et les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman semblent plus précises lorsque l'indice est proche de 2.25.

Finalement, lorsque l'absorption est la plus forte ($k_h = 0.2$), tous les modèles donnent des résultats similaires lorsque le contraste d'indice est faible ($1 < n_i < 2.25$). Néanmoins, lorsque l'indice des particules devient supérieur à 2.25, le modèle de Keller et les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman donnent des résultats similaires en sous-estimant l'extinction tandis que le modèle de Foldy-Twersky le surestime.

5.4.3.3 Influence de la taille des particules

Finalement, nous allons étudier l'influence de la taille des particules sur l'indice effectif. Nous allons pour cela considérer des particules d'indice optique $n_i = 2.25$ pour une fraction volumique $f_v = 0.2$ dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63 + ik$ où k prendra les valeurs 0.02, 0.1, et 0.2. La taille des particules varie de $\lambda_0/40$ à $\lambda_0/10$.

Dans le premier cas (Figure 5.13), cette étude est effectuée en polarisation TM. On observe sur la Figure (a), (c) et (e) que la partie réelle de l'indice effectif varie peu avec la taille des particules. Elle reste proche de la valeur donnée par les modèles de Keller, Foldy-Twersky et même des lois de mélange. La vitesse de propagation de l'onde n'est donc pas modifiée par la taille des particules. La partie imaginaire de l'indice effectif, présentée sur les Figure (b), (d) à (f), est plus contrastée. Les lois de Bruggeman et de Maxwell Garnett ne peuvent prendre en compte le rayon des particules. L'extinction prévue par ces modèles n'est donc correcte que pour les plus petites particules traitées. Leur limitation apparaît clairement sur ces trois figures. On note néanmoins que les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman donnent de bien meilleurs résultats pour la plus forte absorption du milieu hôte ($k = 0.2$). Le modèle de Keller donne d'excellents résultats pour des particules de rayon $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/20$. Il donne les meilleurs résultats pour les particules de rayon $\lambda_0/10$ et permet de calculer précisément l'indice effectif lorsque l'absorption dans le milieu hôte est suffisante ($k_h > 0.1$). Le modèle de Foldy-Twersky ne donne ici de bon résultats que pour des particules de rayon $\lambda_0/40$ et surestime de plus en plus l'extinction à mesure que la taille des particules augmente. Compte tenu de la fraction volumique utilisée ($f_v = 0.2$), ces résultats sont logiques puisque ce modèle est hors de son domaine de validité.

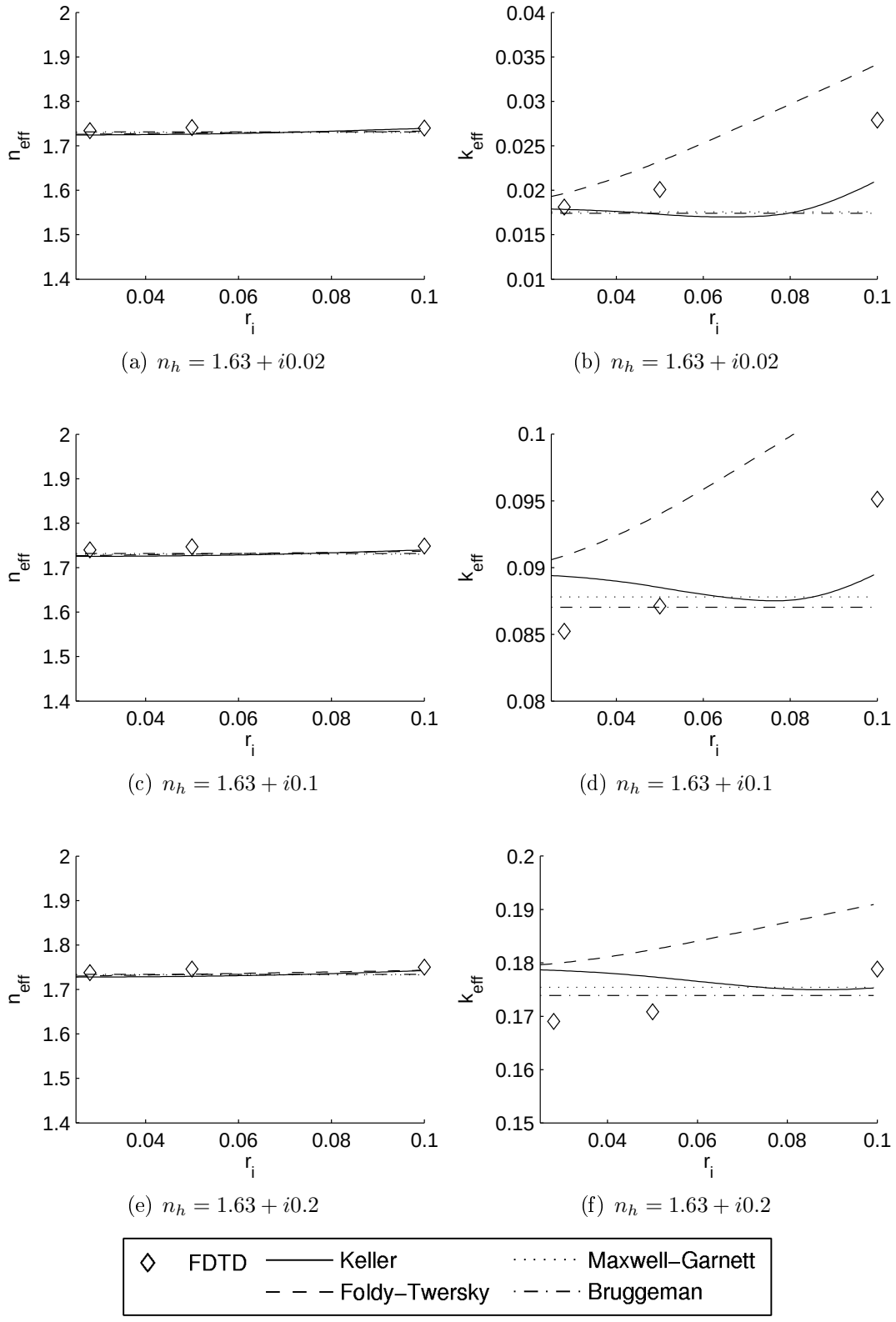


(a) $n_h = 1.63 + i0.02$ (b) $n_h = 1.63 + i0.02$

(c) $n_h = 1.63 + i0.1$ (d) $n_h = 1.63 + i0.1$

(e) $n_h = 1.63 + i0.2$ (f) $n_h = 1.63 + i0.2$

FIG. 5.13 – Indice effectif en fonction de la taille des particules exprimée en λ_0 pour des inclusions d'indice $n_i = 2.25$ et pour une fraction volumique $f_v = 0.2$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.



(a) $n_h = 1.63 + i0.02$ (b) $n_h = 1.63 + i0.02$

(c) $n_h = 1.63 + i0.1$ (d) $n_h = 1.63 + i0.1$

(e) $n_h = 1.63 + i0.2$ (f) $n_h = 1.63 + i0.2$

FIG. 5.14 – Indice effectif en fonction de la taille des particules exprimée en λ_0 pour des inclusions d'indice $n_i = 2.25$ et pour une fraction volumique $f_v = 0.2$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

En polarisation TE (Figure 5.14), la partie réelle de l'indice effectif ne varie pas non plus en fonction de la taille des particules pour les trois absorptions considérées. Toutes les méthodes donnent le même résultat. Dans le premier cas où l'absorption est la plus faible ($n_h = 1.63 + i0.02$), le modèle de Foldy-Twersky permet de représenter l'évolution de l'extinction. Il la surestime toujours dans tous les cas. Ces résultats ce détériorent avec la taille des particules. Lorsque l'absorption augmente le modèle de Foldy-Twersky représente de moins en moins l'évolution de l'extinction, et il ne donne même pas un valeur correcte pour les plus petites particules ($\lambda_0/40$). Le modèle de Keller ne représente pas l'évolution de l'extinction, il prévoit une décroissance en fonction de la taille alors que celle-ci est continûment croissante.

5.4.3.4 Utilisation du modèle de Keller pour l'étude de l'influence de la taille des particules

Nous avons vu que, en polarisation TM, le modèle de Keller permettait de déterminer précisément l'extinction. Nous avons déterminé un domaine de validité pour $f_v < 30\%$ lorsque l'indice des particules est 2.25. Nous pouvons donc utiliser le modèle de Keller pour effectuer une étude plus approfondie du comportement de l'extinction pour ces paramètres. Le résultat est présenté Figure 5.15. On observe tout d'abord une phase où la partie imaginaire de l'indice effectif baisse avec la fraction volumique lorsque $r_i = \lambda_0/40$ car on ajoute des particules sans pertes à un milieu à perte. Dans le cas inverse, lorsque $r_i = \lambda_0/10$, l'extinction croit avec le nombre de particules puisque les pertes par diffusions sont plus importantes que la baisse de l'absorption. Entre ces deux extrêmes, les courbes présentent une augmentation initiale due aux phénomènes de diffusions suivie d'une baisse dues aux diffusions multiples et à la baisse de l'absorption.

5.4.3.5 Conclusion

Nous avons vu qu'en polarisation TM le modèle de Keller donnait d'excellents résultats pour toutes les fractions volumiques considérées tant que l'indice de réfraction des particules demeurait raisonnable (≤ 2.25). Le modèle de Foldy-Twersky permet quant à lui d'estimer l'évolution de l'extinction, dans les cas que nous avons traités, jusqu'à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. De plus, il est lui aussi limité par les forts indices. Les lois de Bruggeman et de Maxwell-Garnett permettent de déterminer l'indice effectif lorsque l'extinction est uniquement due à l'absorption ($\kappa_e \approx \kappa_a$) et d'en avoir une estimation sinon. Néanmoins, ces modèles ne permettent pas de prendre en compte la taille des particules.

La polarisation TE donne des résultats différents. Dans ce cas, le modèle de Keller ne permet pas de rendre compte les évolutions de l'indice effectif lorsque la fraction volumique est supérieure à 10%. Le modèle de Foldy-Twersky, pourtant plus simple permet d'obtenir

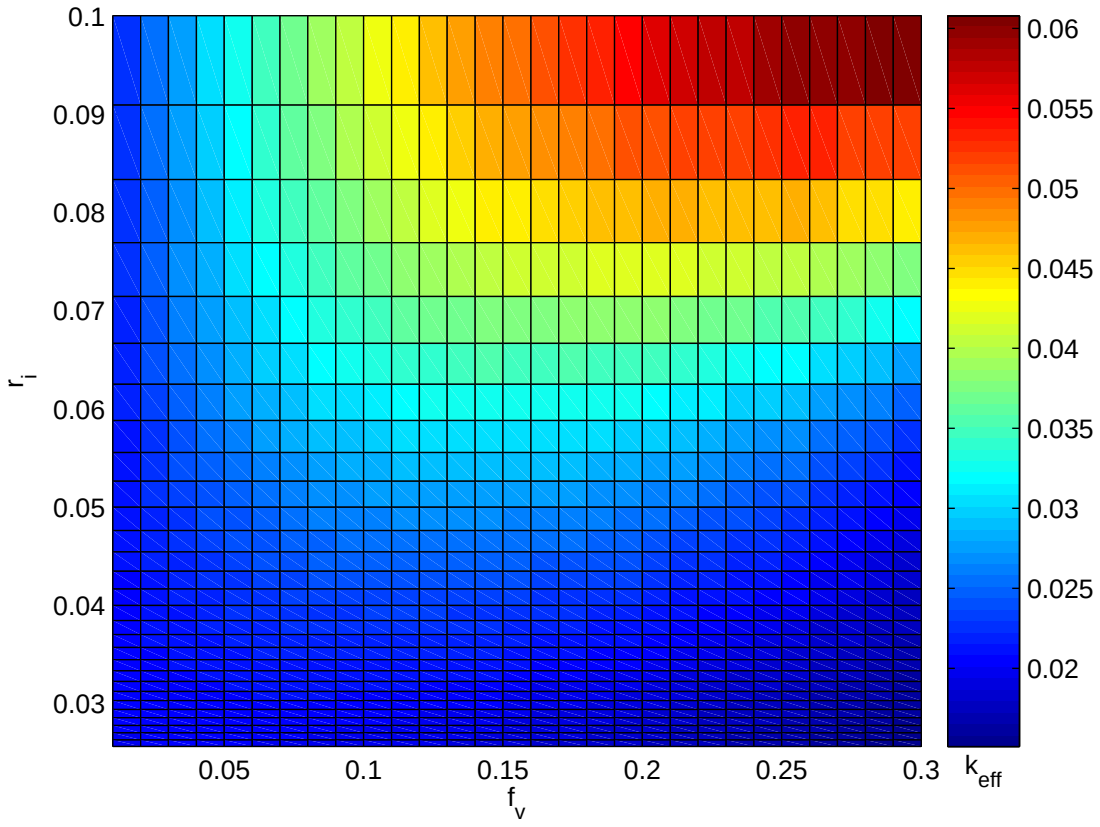


FIG. 5.15 – Partie imaginaire de l'indice effectif obtenue avec le modèle de Keller pour des particules d'indice 2.25 dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63 + i0.02$ en fonction de la fraction volumique f_v et du rayon des particules r_i.

un domaine de validité similaire. Le modèle de Foldy-Twersky semble donner de bons résultats lorsque l'absorption est faible et que l'extinction est surtout due à la diffusion. Lorsque la taille des particule n'est pas trop élevée ($\leq \lambda_0/40$) et que l'extinction est surtout due à l'absorption, les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman donnent les meilleurs résultats.

Ainsi, les polarisations TE et TM ont un comportement différent vis à vis des lois de mélange et des modèles de détermination de la constante de propagation effective. Notamment, le modèle de Keller ne peut pas s'appliquer en polarisation TE. Une étude similaire doit être menée en géométrie tridimensionnelle de comparaison entre les résultats numériques et ces modèles approchés. En effet, les domaines de validité déterminés ici ne seront sans doute pas transposables compte tenu de la différence de comportement entre les deux polarisations.

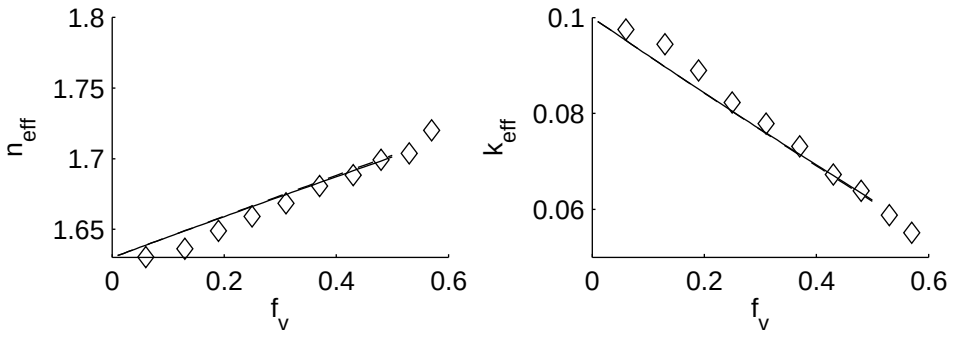
5.4.4 Extension aux polymatériaux

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons traité la diffusion par un ensemble monodisperse de particules. Cette limitation n'est pas due à notre méthode puisqu'elle peut traiter un ensemble polydisperse de diffuseurs polymatériaux mais est liée aux limitations de certaines méthodes approchées utilisées. En effet, le modèle de Keller a été développé pour un ensemble monodisperse de particules. La première idée consiste à appliquer les modèles précédents itérativement à chaque type de particule. Néanmoins, cette méthode donne un indice effectif différent suivant l'ordre de prise en compte des particules. Par exemple, pour deux types de particules d'indice $n_i^{(1)} = 2.25$ et $n_i^{(2)} = 1$ de rayon $\lambda_0/40$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.1$ avec une fraction volumique $f_v = 0.4$ répartie équitablement entre les deux matériaux, on obtient, avec le modèle de Keller en polarisation TM les résultats suivants :

	milieu 1 puis milieu 2	milieu 2 puis milieu 1
k_{eff}	$1.65 + i0.068$	$1.70 + i0.066$

Il faut donc redéfinir les modèles de Keller et de Foldy-Twersky dans ce cas. Si l'adaptation du modèle de Foldy-Twersky est triviale, le modèle de Keller est plus difficilement adaptable. En effet, il se base sur la fonction de corrélation de paire qui n'est définie que pour un ensemble de particules de même type. Nous allons donc ici étudier un polymatériau. Dans ce cas la fonction de corrélation de paire reste la même. Supposons que l'on ait un ensemble P de particules p quelconques. Nous proposons d'utiliser une matrice de diffusion équivalente S à partir des matrices de diffusion de chaque particule $S^{(p)}$ et de sa fraction volumique partielle $f_v^{(p)}$ par :

$$S(0) = \frac{1}{f_v} \sum_P f_v^{(p)} S^{(p)}(0) \tag{5.34}$$



(a) (b)

FIG. 5.16 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique f_v pour des inclusions d'indice $n_i^{(1)} = 2.25$ et $n_i^{(2)} = 1$ de fraction volumique identique dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63 + i0.1$ en polarisation TM.

où f_v est la fraction volumique totale occupée par l'ensemble des particules. Le modèle de Foldy-Twersky s'écrit alors :

$$k_{eff}^2 = k_0^2 - \frac{4}{\pi} \sum_p \frac{f_v(p) S^{(p)}(0)}{a^2} \tag{5.35}$$

Le modèle de Keller s'écrit comme :

$$\begin{aligned} k_{eff}^2 &= k_0^2 - \frac{4}{\pi} \sum_p \frac{f_v(p) S^{(p)}(0)}{a^2} \\ &- i\frac{\pi}{2} \left(\frac{4}{\pi a^2} \right)^2 \left(\sum_p \frac{f_v(p) S^{(p)}(0)}{a^2} \right)^2 \int_0^\infty H_0^1(k_1 r) J_0(k_{eff} r)(g(r) - 1) r dr \end{aligned}$$

La Figure 5.16 présente ces deux modèles pour deux types de particules d'indice $n_i^{(1)} = 2.25$ et $n_i^{(2)} = 1$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.1$ pour une fraction volumique répartie équitablement entre les deux matériaux. On observe que le modèle de Foldy-Twersky donne des résultats identiques au modèle de Keller sur l'ensemble des fractions volumiques étudiées. Ainsi, on ne peut savoir si les diffusions doubles sont correctement prises en compte. Les deux modèles permettent de représenter précisément l'évolution de la partie réelle et de la partie imaginaire de l'indice effectif. On note néanmoins de légères différences entre les modèles et les résultats numériques pour les fractions volumiques les plus faibles (entre 5 et 15%).

5.5 Diffusion par un ensemble bidisperse de particules

5.5.1 Présentation du problème

De nombreuses méthodes dépendent de la quantité de particules dans le domaine de calcul ou se révèlent difficiles d'application lorsque le milieu n'est pas monodisperse et monomatériau. Ce sont, par exemple, des méthodes comme l'utilisation des matrices S [45] ou basées sur la DBA (Distorded Born Approximation) [79].

Dans cette partie, nous allons étudier une approche originale de réduction de la complexité du calcul de la diffusion par un ensemble bidisperse de particules. Le milieu comporte des grosses particules diffusantes et des petites particules peu diffusantes. Nous utiliserons un indice effectif afin de représenter l'influence des petites particules sur le milieu. Il est calculé par la méthode présentée dans la première partie de ce chapitre.

Nous commencerons par expliciter les paramètres de calcul utilisés pour cette étude. Puis, nous chercherons à déterminer si l'on peut calculer précisément le champ lointain en utilisant un indice effectif associé à la propagation de l'énergie cohérente pour représenter les petites particules. Cette étude est réalisée pour le cas de particules à pertes et sans perte.

5.5.2 Paramètres du calcul

L'espace de calcul est maillé à $\lambda_0/40$. Le milieu hôte a un indice $n_h = 1.63$ et comporte deux types de particules :

- les grosses particules (GP) ont un rayon de $\lambda_0/10$ et un indice $n_{GP} = 2.25$;
- les petites particules (PP) ont un rayon de $\lambda_0/40$ et un indice $n_{PP} = 2.25 + ik$ avec $k = 0.2$ ou 0.

La fraction volumique totale est de 20%, avec une fraction volumique partielle de grosses particules de 10% et de petites particules de 10%. Cela représente 96% de petites particules et 4% de grosses particules. Après la génération des milieux avec l'algorithme de Metropolis, on calcule par FDTD les quantités suivantes :

- Le champ lointain total diffusé par l'ensemble des particules (petites et grosses particules) dans le milieu hôte ;
- Le champ lointain incohérent diffusé par les petites particules dans le milieu hôte. Ces milieux sont générés en enlevant les grosses particules des milieux utilisés pour le calcul total.
- Le champ lointain total diffusé par les grosses particules dans le milieu homogénéisé. Ces milieux sont générés en enlevant les petites particules des milieux utilisés pour le calcul total. L'indice du milieu hôte est calculé par l'approche numérique présentée Chapitre 5.
- Le champ total diffusé par les grosses particules dans le milieu hôte initial. Ces

milieux sont générés en enlevant les petites particules des milieux utilisés pour le calcul total.

Nous utiliserons ces résultats pour tracer simultanément les courbes suivantes :

- Le diagramme de rayonnement en champ lointain du problème total (solution de référence notée (1)) ;
- Le diagramme de rayonnement en champ lointain dû aux grosses particules dans le milieu hôte (aucune prise en compte des petites particules : solution notée (2)) ;
- Le diagramme de rayonnement en champ lointain dû aux grosses particules dans le milieu homogénéisé (prise en compte de la propagation cohérente du champ : solution notée (3)) ;
- Le diagramme de rayonnement en champ lointain des grosses particules dans le milieu homogénéisé en ajoutant le champ lointain incohérent diffusé par les petites particules (prise en compte de la diffusion incohérente des petites particules : solution notée (4)).

Nous cherchons à modéliser un milieu semi-infini. Ainsi, nous devons nous assurer que toutes les interactions avec les particules ont eu lieu dans l'espace de calcul aux fréquences d'intérêt. Pour cela nous calculons, en plus des données précédentes, la transformé de Fourier des champs proches à la fréquence étudiée. Nous définissons ensuite W_{fuites} pour un milieu occupant les mailles i_n à i_N et j_0 à j_M dans l'espace de calcul par :

$$W_{fuites} = \frac{1}{W_0}\left(\sum_{i=i_n}^{i_N} W(i,j_0) + \sum_{i=i_n}^{i_N} W(i,j_M)\right) \tag{5.36}$$

où W_0 est l'énergie du faisceau incident et $W(i,j)$ la valeur du flux du vecteur de Poynting au point (i,j). Cette grandeur permet d'évaluer le niveau d'énergie sur les bords latéraux du domaine de calcul et de vérifier que celui-ci est quasi-nul.

5.5.3 Réduction des tavelures

Afin de lisser les résultats obtenus par l'algorithme FDTD, nous effectuons une moyenne angulaire sur 10^o et nous utilisons la symétrie du problème par rapport à l'incidence normale (onde incidente normale au problème). Ainsi, l'intensité lissée $\hat{I}(\theta)$ est obtenue a partir du résultat brut $I(\theta)$ par :

$$\hat{I}(\theta) = \frac{1}{2(N_\theta+1)} \sum_{n=-N_\theta/2}^{N_\theta/2} (I(\theta + n\Delta\theta) + I(-\theta - n\Delta\theta)) \tag{5.37}$$

où θ est l'angle d'observation, N_θ le nombre de points utilisés pour la moyenne et $\Delta\theta$ le pas de discrétisation angulaire.

5.5.4 Petites particules d'indice optique $n_{PP} = 2.25 + i0.2$

Nous commençons par traiter le cas de petites particules fortement absorbantes. Ainsi, nous devrions avoir $\kappa_e \approx \kappa_a$ et des interactions faibles entre les particules. Une grande partie de la diffusion incohérente est absorbée et l'indice effectif devrait convenablement représenter les petites particules.

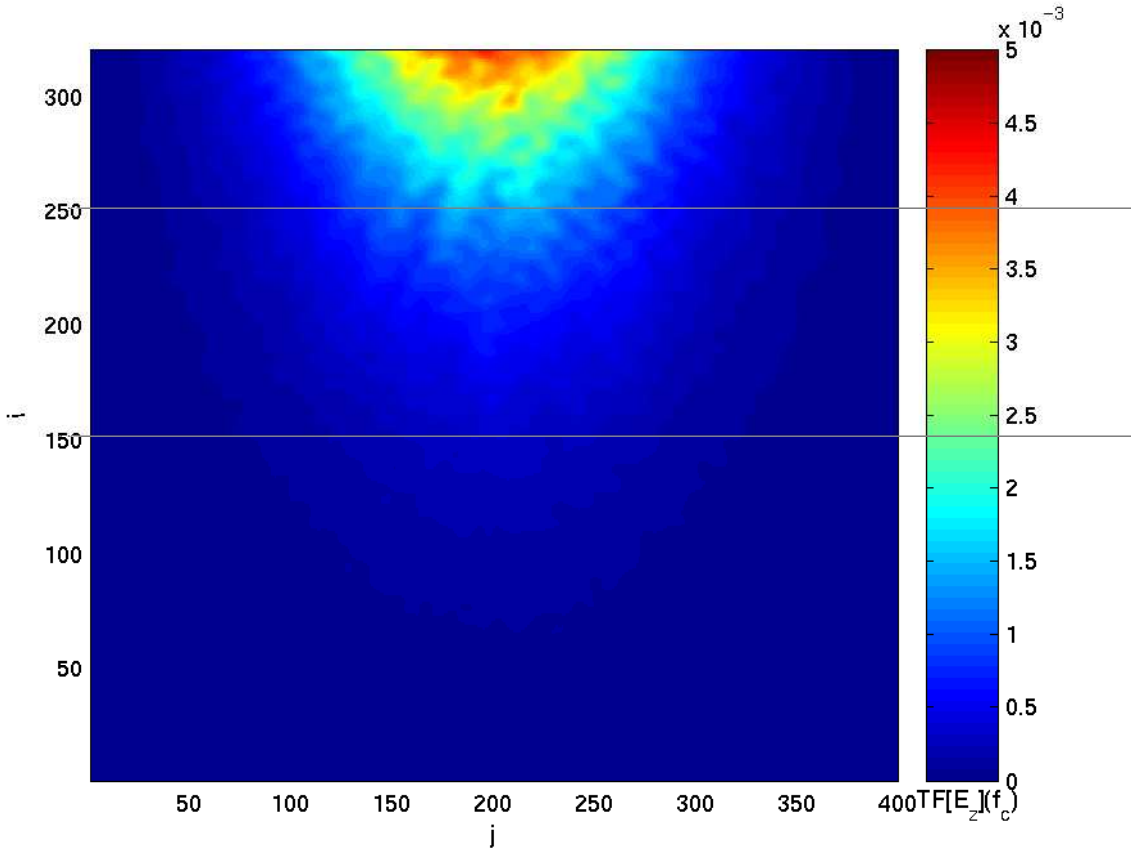


FIG. 5.17 – Intensité diffusée par l'ensemble des particules dans le milieu hétérogène pour un ensemble bidisperse de particules avec des particules $\lambda_0/40$ d'indice $n_{PP} = 2.25 + i0.2$ en polarisation TM. Les échelles sont en mailles.

Dans une première étape, nous allons vérifier que l'ensemble des interactions avec le milieu hôte a eu lieu dans le domaine de calcul en déterminant les champs proches dans le milieu hétérogène (Figure 5.17). Le domaine a une taille de $10\lambda_0 \times 10\lambda_0$ et la largeur du faisceau gaussien incident est de $2\lambda_0$. On observe une décroissance du champ au fur et à mesure de sa propagation et il ne reste que 4% de l'énergie incidente dans le milieu aux bords du domaine de calcul. Lorsque la taille du domaine est de $20\lambda_0 \times 10\lambda_0$, il ne reste plus que 1% de l'énergie incidente mais les résultats en champ lointain n'évoluent pas (Figure 5.18).

Nous calculons ensuite les résultats des approches (1) à (4) décrites dans le chapitre 5.5.2. La procédure d'homogénéisation numérique nous donne $n_{eff} = 1.73 + i0.0404$. Les

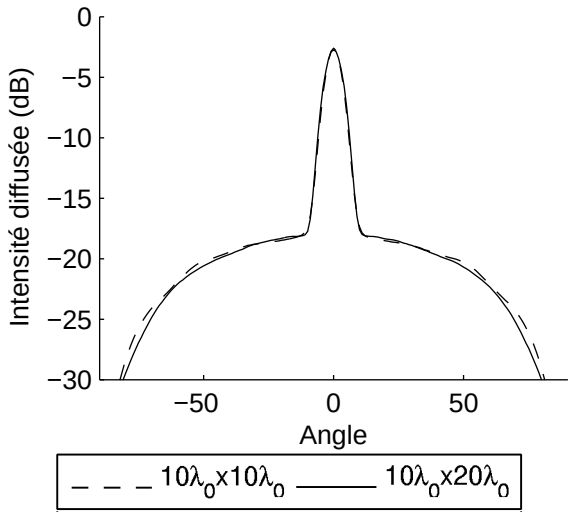


FIG. 5.18 – Comparaisons entre les intensités diffusées par un milieu hétérogène avec $n_{PP} = 2.25 + i0.2$. en polarisation TM.

résultats sont présentés Figure 5.19. Sur la courbe représentant le problème total, on trouve un cohérent fort et un diffus faible dû aux pertes importantes dans les petites particules (situé environ à -17 dB). Ainsi, l'erreur commise est très importante lorsque on omet les petites particules, comme dans l'approche (2), avec plus de 10 dB d'erreur sur le niveau du diffus. L'approche (3), où nous utilisons le milieu effectif pour représenter les particules, permet d'avoir une bien meilleure approximation des résultats réels (environ 1,5 dB de différence). Le champ cohérent est parfaitement représenté. Finalement, l'écart restant est comblé en utilisant l'approche (4), c'est-à-dire en ajoutant la partie incohérente diffusée par les petites particules sous un plan.

Les différentes approches présentées permettent donc, graduellement, d'atteindre la solution du problème total. Si l'on cherche à avoir un ordre de grandeur, la prise en compte des petites particules par le milieu homogénéisé donne une précision inférieure à 2 dB dans ce cas, pouvant être améliorée en ajoutant la diffusion incohérente par les petites particules.

5.5.5 Petites particules d'indice optique $n_{PP} = 2.25$

Les petites particules sont désormais sans pertes et d'indice $n_{PP} = 2.25$. Nous ne pouvons pas, pour des raisons de ressources informatiques, traiter le problème de la diffusion par un milieu semi-infini. En effet, l'extinction est très faible et le domaine de calcul ne peut pas être suffisamment étendu pour contenir toutes les interactions de l'onde incidente avec le milieu hétérogène. Nous limiterons la profondeur du domaine de calcul à $10\lambda_0$ et nous représenterons donc la diffusion par une lame hétérogène infinie. Dans une première étape, nous allons déterminer la largeur minimale du domaine de calcul pour pouvoir

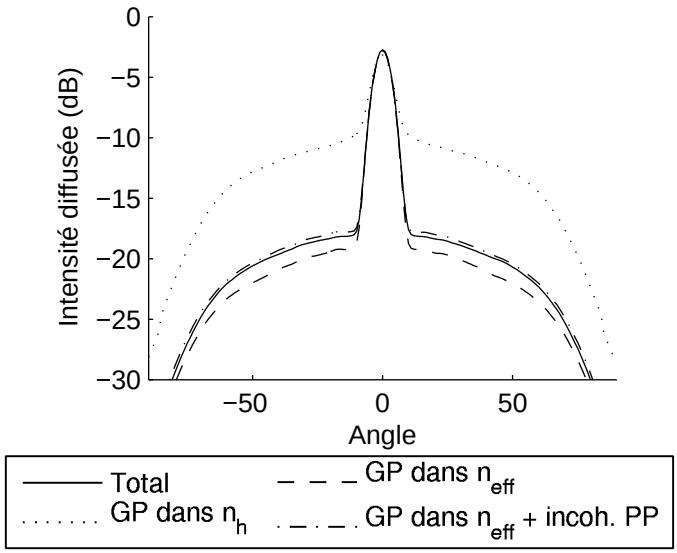


FIG. 5.19 – Intensités diffusées par un ensemble bidisperse de particules pour $n_{PP} = 2.25 + i0.2$.

contenir toutes les interactions latérales de l'onde incidente avec le milieu hétérogène puis nous appliquerons la méthodologie précédente pour traiter les petites particules.

Pour cela, nous commençons par calculer les fuites en dehors du domaine de calcul en fonction de sa taille. Cette étude est présentée Figure 5.20. On observe que la décroissance du diffus incohérent se propageant latéralement n'est pas la même suivant les particules étudiées. En effet, pour le problème total et lorsque l'on est suffisamment loin du centre du faisceau, elle est d'environ 7 dB/décade tandis qu'elle est de 9 dB/décade pour les grosses particules et de 5 dB/décade pour les petites particules. La diffusion par les grosses particules est forte mais décroît rapidement alors que les petites particules diffusent peu et transportent l'énergie beaucoup plus loin. Les domaines de prédominance de chacune des contributions au diffus ne sont donc pas les mêmes. Ainsi, si près du faisceau le diffus est majoritairement dû à la présence des grosses particules, à partir d'une distance par rapport au centre du faisceau de $10\lambda_0$, la contribution des petites particules devient majoritaire. Cette analyse est confirmée par la Figure 5.21. Elle représente les champs proches dans le domaine de calcul pour le problème total (grosses et petites particules) et l'incohérent diffusé par les petites particules seules. Le domaine a pour dimensions $10\lambda_0 \times 30\lambda_0$ et la largeur du faisceau gaussien incident est de $2\lambda_0$. On observe que les champs proches représentés Figure 5.21 sont faibles sur les bords droit et gauche du domaine de calcul mais restent importants vers le bas du domaine. Nous représentons donc bien une lame hétérogène. La Figure 5.22 représente l'incohérent diffusé par les petites particules. Il est dix fois plus faible que le cohérent dans la Figure 5.21, mais sa décroissance est très lente et l'énergie se propage très loin dans le domaine de calcul. Les petites particules ont donc un rôle fondamental dans la propagation de l'énergie. Leur rôle dans le transport de

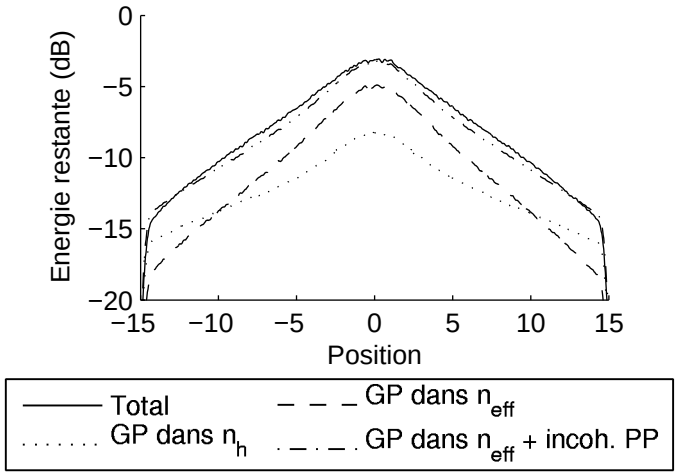


FIG. 5.20 – Énergie incohérente traversant un plan perpendiculaire à la direction d'incidence en polarisation TM. Le centre du faisceau est en 0.

l'énergie diffusée ne peut être négligé.

La décroissance de l'énergie est lente et il nous faut faire croître largement la taille du domaine de calcul. L'évolution des fuites latérales est décrite dans le tableau suivant :

Taille du domaine de calcul	$10\lambda_0 \times 10\lambda_0$	$20\lambda_0 \times 10\lambda_0$	$30\lambda_0 \times 10\lambda_0$
W_{fuites}	40%	16%	8%

On observe que, pour une largeur de $30\lambda_0$, il reste encore 8% de l'énergie incidente sur les bords latéraux. Néanmoins, comme on peut le voir sur la Figure 5.23, le niveau du champ lointain diffusé se stabilise pour $30\lambda_0 \times 10\lambda_0$. L'augmentation du niveau du diffus entre le domaine $10\lambda_0 \times 10\lambda_0$ et $20\lambda_0 \times 10\lambda_0$ est très importante et confirme que de nombreuses interactions entre l'onde et les particules ont encore lieu.

Cette étude nous a permis de déterminer la taille minimale du domaine de calcul pour notre étude, il s'agit désormais d'utiliser l'indice effectif pour représenter les petites particules. Dans ce cas, nous avons $n_{eff} = 1.73 + i0.0041$. La partie imaginaire de l'indice effectif est très faible par rapport au cas des particules à pertes. Ainsi, on passe d'un régime où la diminution de l'énergie cohérente durant sa propagation est due à l'absorption par les particules à un régime où ces pertes sont uniquement dues à la diffusion incohérente ($\kappa_e = \kappa_d$). Les résultats des différents traitements sont présentés Figure 5.24. La diffusion par les particules est beaucoup plus forte que pour les particules d'indice $n_{PP} = 2.25 + i0.2$ et la procédure donne des résultats plus mauvais. Ainsi, le résultat de la diffusion par les grosses particules dans le milieu homogénéisé donné par l'approche (3) représente mal le résultat du calcul total (environ 4 dB de différence). Néanmoins, lorsque nous ajoutons l'incohérent diffusé par les petites particules (approche (4)), une grande partie de cet écart est comblé. Ainsi cette approche permet, dans ce cas, d'avoir une approximation du problème de la diffusion par un milieu bidisperse de particules mais elle nécessite de faire

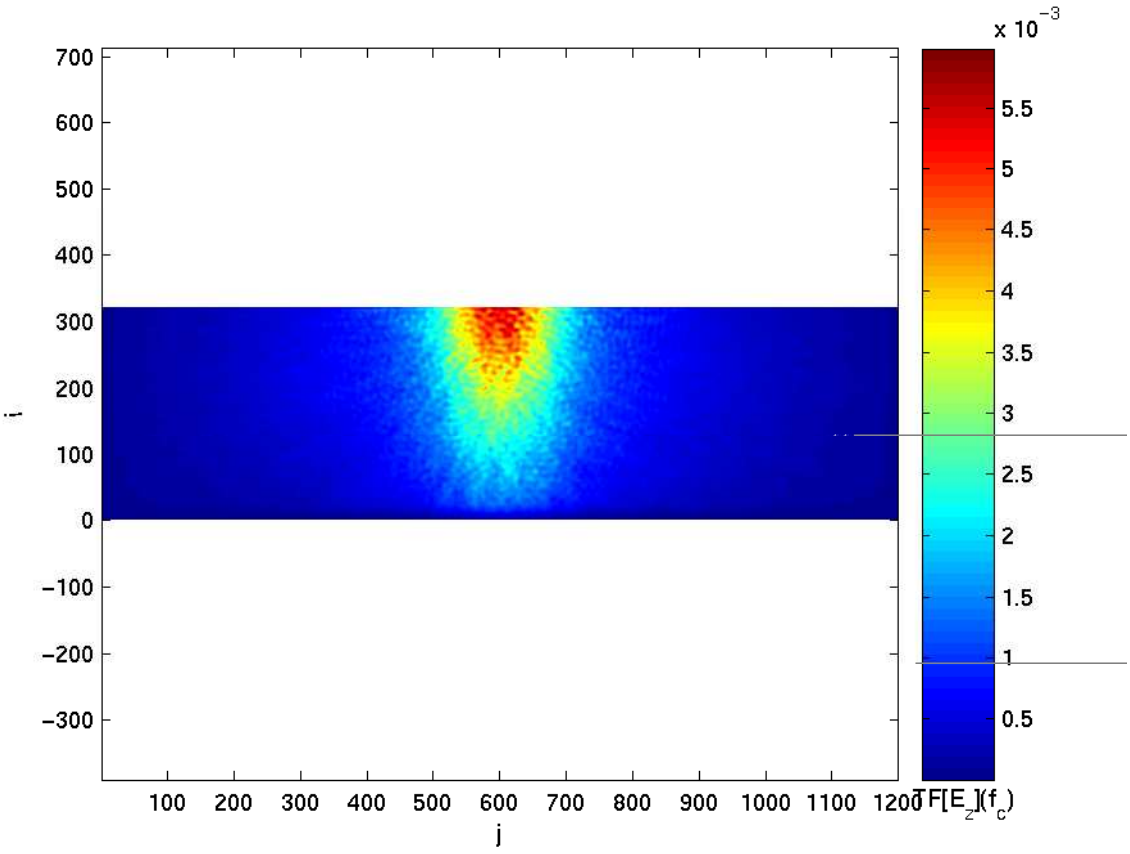


FIG. 5.21 – Intensités dans le milieu hétérogène en polarisation TM pour un ensemble bidisperse de particules pour des particules $\lambda_0/40$ d'indice $n_{PP} = 2.25$ (a) . Les échelles sont en mailles.

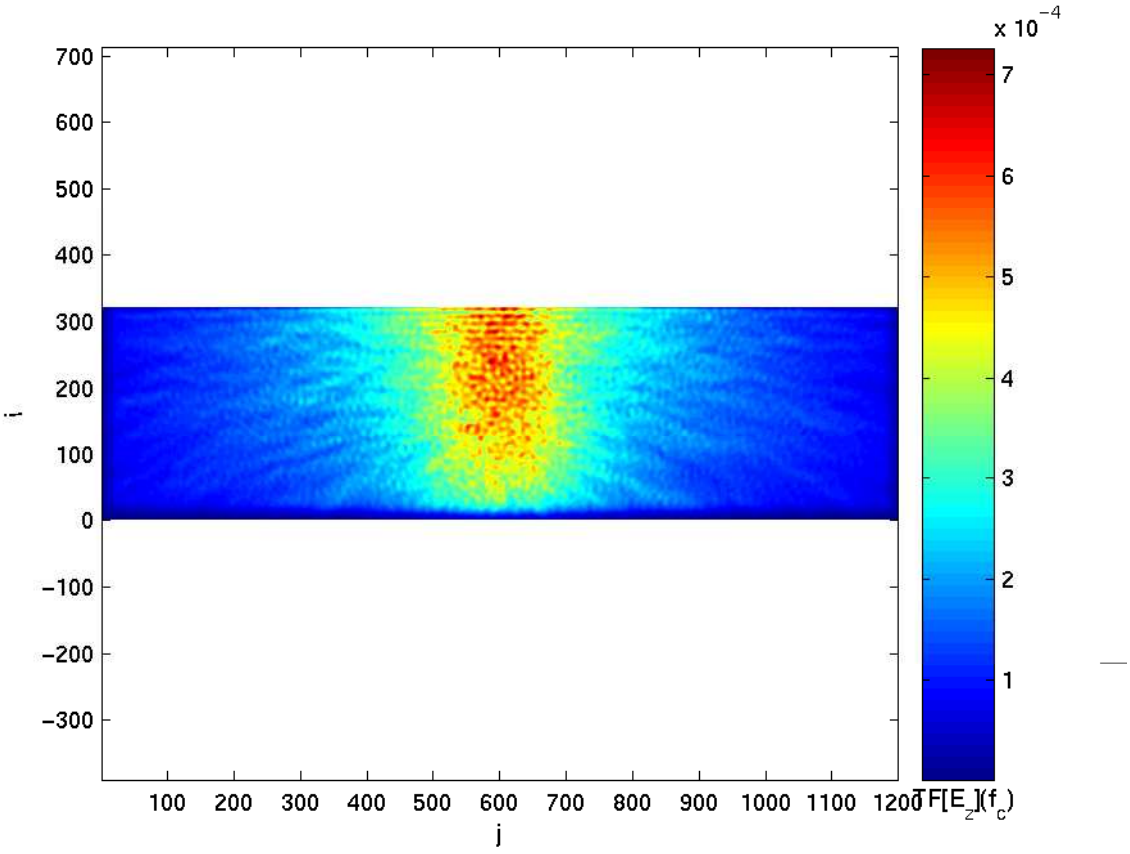


FIG. 5.22 – Intensités dans le milieu hétérogène en polarisation TM pour les petites particules seules pour des particules $\lambda_0/40$ d'indice $n_{PP} = 2.25$ Les échelles sont en mailles.

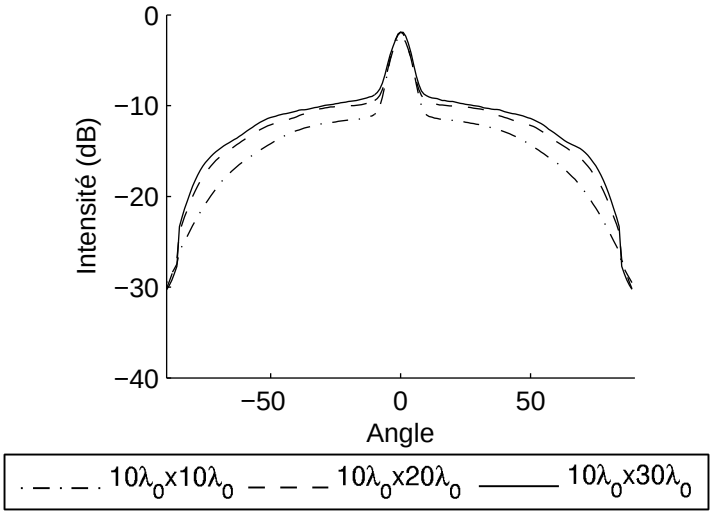


FIG. 5.23 – Intensités diffusées par un ensemble bidisperse de particules pour $n_{PP} = 2.25$. Le problème de taille $10\lambda_0 \times 10\lambda_0$ est représenté en traits points pointillés, celui de taille $10\lambda_0 \times 20\lambda_0$ en traits pointillés et celui de taille $10\lambda_0 \times 30\lambda_0$ en trait plein.

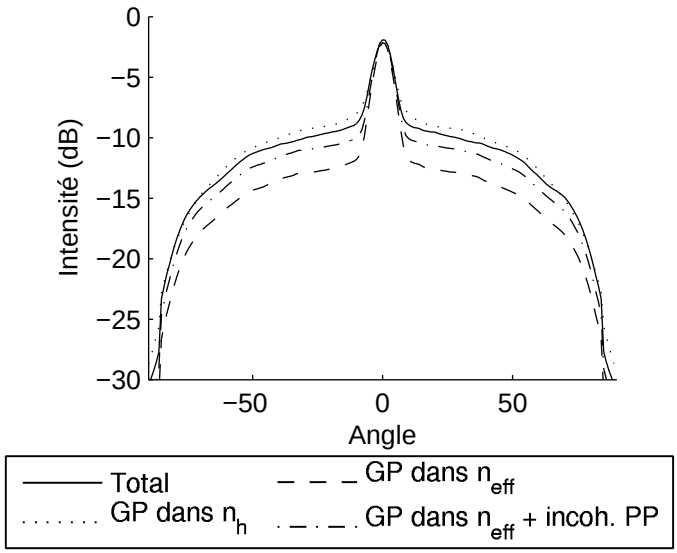


FIG. 5.24 – Intensités diffusées par un ensemble bidisperse de particules pour $n_{PP} = 2.25$ en polarisation TM. Les échelles sont en mailles.

le calcul de la diffusion par l'ensemble des petites particules. La précision atteinte (2 dB) est néanmoins supérieure à la différence entre la diffusion par problème total et par les grosses particules dans le milieu hôte (1.5 dB).

5.5.6 Validité de l'approche

Nous avons utilisé notre méthodologie pour diminuer la complexité du problème de la diffusion par un ensemble bidisperse de particules pour deux indices optiques : $n_{PP} = 2.25 + i0.2$ et $n_{PP} = 2.25$. Dans le premier cas, les particules sont à pertes et l'énergie propagée dans le milieu est contenue dans le domaine de calcul. La procédure d'homogénéisation donne de bons résultats, et lorsque nous ajoutons l'énergie incohérente diffusée par les petites particules les courbes concordent. Dans le second cas, les particules sont sans perte et nous ne pouvons pas utiliser un domaine de calcul assez grand pour contenir toutes les interactions de l'onde avec le milieu hétérogène. Nous avons utilisé une lame hétérogène en lieu et place du milieu semi-infini. Nous avons étudié la propagation de l'incohérent dans le milieu et nous avons vu que des interactions ont lieu à très grande distance. Ainsi, la procédure d'homogénéisation donne seulement des résultat acceptables mais une méthode rigoureuse doit être utilisée pour avoir des résultats précis.

Cette méthodologie est seulement applicable lorsque la diffusion par les petites particules est faible. En effet, notre procédure d'homogénéisation est basée sur la propagation du cohérent. L'ajout de la partie diffusée par les petites particules dans le milieu hôte à la diffusion du problème homogénéisé permet d'améliorer les résultats lorsque les pertes sont faibles et de représenter le problème total lorsque les pertes sont importantes.

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une méthode originale à notre connaissance de détermination d'un indice effectif. Elle est basée sur l'étude de la propagation de l'énergie cohérente dans l'algorithme FDTD. Nous l'avons utilisée pour tester la validité de deux lois de mélange : Maxwell-Garnett et Bruggeman et de deux modèles perturbatifs : les modèles de Keller et de Foldy-Twersky. Nous avons remarqué un comportement différent suivant la polarisation. En effet, en polarisation TM le modèle de Keller est correct sur toutes les fractions volumiques et pour des différences d'indice optique inférieures à 1. Le modèle de Foldy-Twersky est limité à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. Les lois de mélange permettent d'obtenir un bon ordre de grandeur. En polarisation TE, le modèle de Keller est limité à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. Le modèle de Foldy-Twersky est correct dans les cas étudiés jusqu'à des fractions volumiques de l'ordre de 10%.

Nous avons ensuite utilisé cet ensemble de résultats pour étudier la diffusion en champ lointain par un ensemble bidisperse de particules et notamment savoir si nous pouvions remplacer les petites particules par le milieu homogénéisé décrit précédemment. Nous avons pu déterminer dans quels cas cette décomposition est possible.

Troisième partie

Étude du couplage surface/volume

Chapitre 6

Couplage surface/volume

6.1 Présentation du problème

Lorsqu'on étudie un milieu hétérogène rugueux, peu de méthodes peuvent s'appliquer simplement. Les diffusions surfacique et volumique sont alors souvent calculées séparément avec deux méthodes adaptées à chacune des contributions. Par exemple, on peut utiliser l'équation du transfert radiatif pour traiter la diffusion volumique et l'approximation de Kirchhoff pour calculer la contribution de la surface rugueuse [53, 33, 127]. Il s'agit ensuite de connaître les interactions entre ces deux sous-problèmes pour pouvoir calculer la diffusion par le problème total. Calvo Perez [14] et Sentenac *et al* [112] proposent une méthode de découplage basée sur une somme directe des deux contributions. Ils proposent ainsi de calculer :

- la diffusion par l'interface rugueuse séparant le milieu homogénéisé à l'aide d'un indice effectif pour tenir compte de la présence des particules. Ils utilisent l'indice effectif défini pour décrire la propagation de l'intensité cohérente.
- la diffusion incohérente par l'ensemble des particules placées sous un plan dans le milieu hôte.

Il s'agit ensuite de faire la somme de l'intensité diffusée $I_{surface}$ par la surface homogénéisée et de l'intensité incohérente diffusée I^{incoh}_{volume} par le volume pour obtenir l'intensité diffusée totale I_{total} par le milieu hétérogène rugueux :

$$I_{total}(\theta_r) = I_{surface}(\theta_r) + I^{incoh}_{volume}(\theta_r) \tag{6.1}$$

Durant [33] montre une limitation de cette approche lorsque la rugosité augmente. Pour les cas qu'il étudie, il définit un domaine de validité pour :

$$\frac{ks}{kL} < 0.2 \tag{6.2}$$

Il propose d'utiliser l'indice du milieu hôte comme indice effectif lorsque ce critère n'est pas atteint.

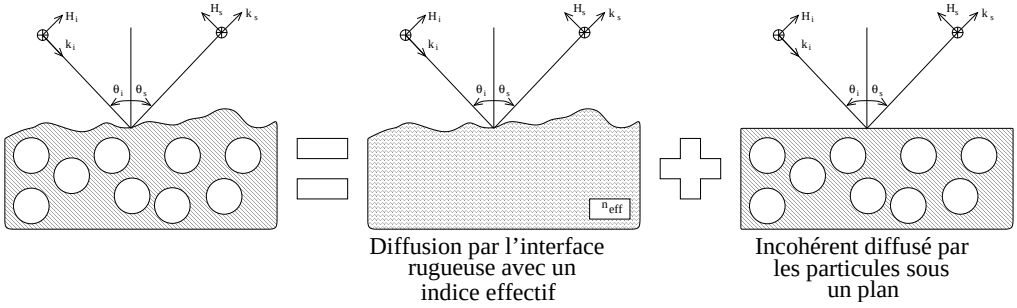


FIG. 6.1 – Découplage surface/volume

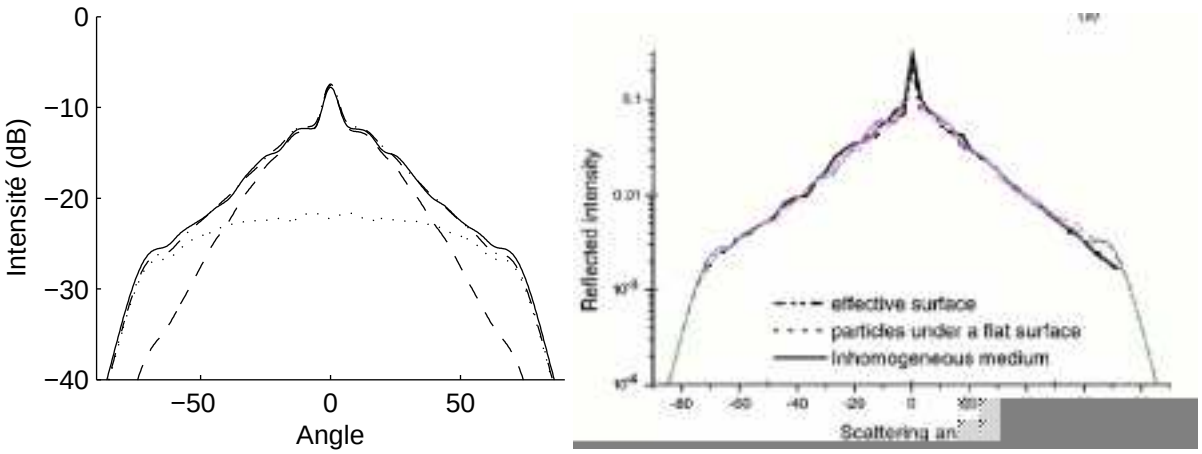
Dans une première partie, nous allons valider notre algorithme FDTD pour le calcul de la diffusion par un matériau hétérogène rugueux par comparaison avec un résultat publié dans l'article de Sentenac *et al.* Nous présenterons ensuite une extension de cette étude pour des surfaces plus rugueuses et pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Nous présenterons ensuite une étude originale de la validité de l'hypothèse de découplage en faisant varier la fraction volumique et la taille des particules.

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous utiliserons des surfaces dont la rugosité est liée à la position des particules. Il s'agit, à notre connaissance, de la première étude de la diffusion par ce type de surface. Nous étudierons l'évolution de l'erreur commise en utilisant l'hypothèse de découplage en fonction de la fraction volumique.

6.2 Comparaisons de résultat FDTD/MoM Hybride

La MoM hybride utilisée dans l'article de Sentenac *et al* est surtout adaptée aux particules dont la taille est petite devant la longueur d'onde et la rugosité puisqu'elle est basée sur le formalisme des matrices S [45]. Nous comparerons les deux méthodes pour une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètres statistiques $ks = 0.63$ et $kL = 2\pi$; les particules ont un rayon $r_i = 0.035\lambda_0$ et un indice optique $n_i = 3.05 + i0.57$, le milieu hôte a pour indice $n_h = 1.41$. Ces particules sont de trop petite taille devant le maillage et elles ne peuvent pas être traitées de manière exacte par la FDTD (approximation en marche d'escalier). Nous utilisons donc un rayon effectif pour les représenter par des carrés de même surface que le disque afin d'avoir la même intensité diffusée. Le pas de maillage est pris égal au rayon effectif et vaut $\lambda_0/28$. L'indice effectif utilisé est celui obtenu dans la partie précédente par FDTD. Nous trouvons par notre approche $n_{eff} = 1.6574 + i0.0845$. L'article de Sentenac *et al* propose un indice de $n_{eff} = 1.5473 + i0.21$. Les deux méthodes donnent un indice effectif différent car elles sont basées sur des méthodes de détermination différente. Comme on peut le voir sur la Figure 6.2, elles donnent in fine des résultats identiques pour la diffusion.

On observe, sur cette figure, que la diffusion par la surface est prépondérante autour



(a) Résultats FDTD (b) Comparaison avec les résultats publiés

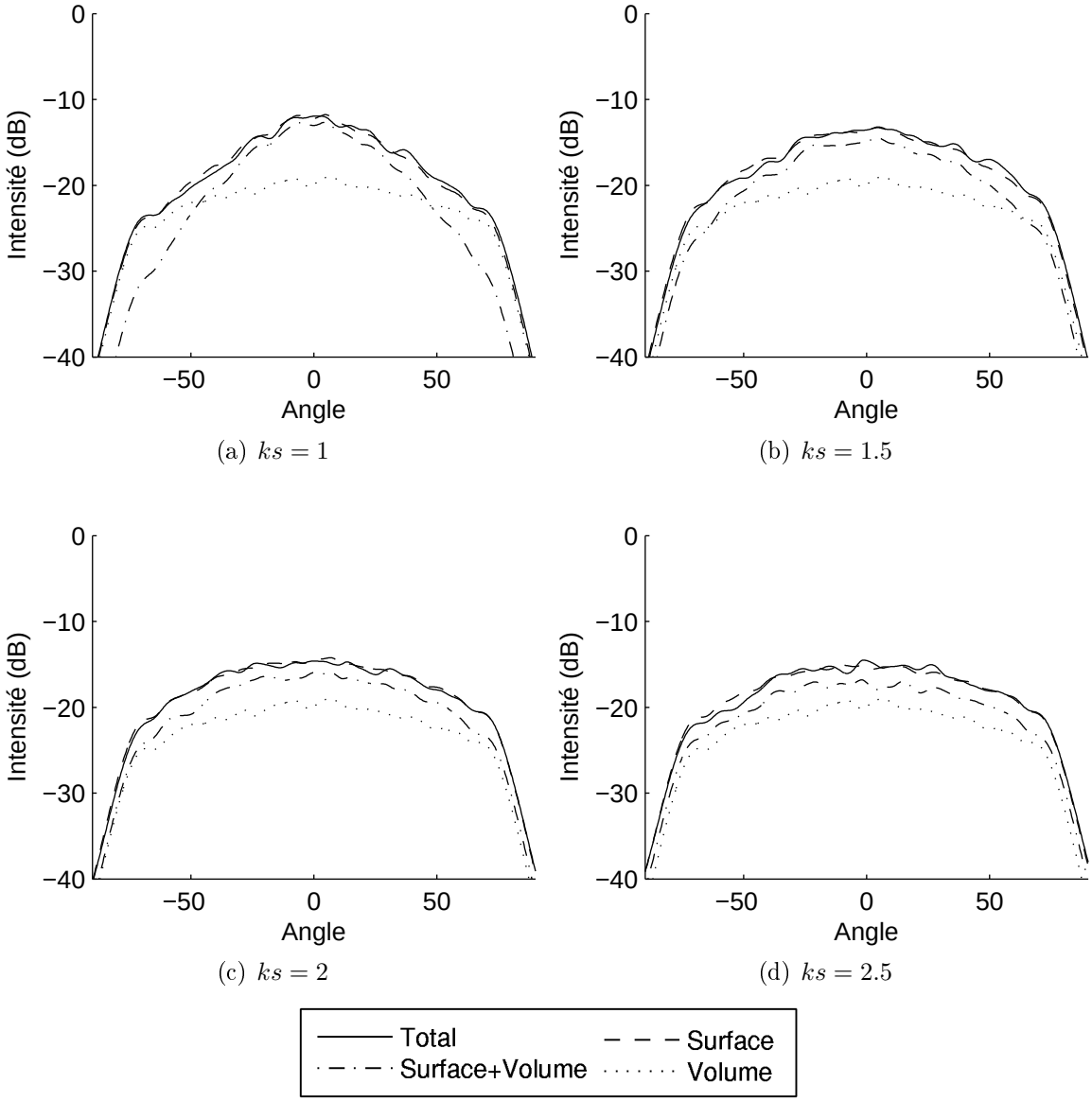
FIG. 6.2 – Diagramme de l'intensité diffusée par l'ensemble (petites particules et surface) pour des particules de rayon $r = 0.035\lambda$ et d'indice $n = 3 + 0.57i$ pour une fraction volumique de 20% dans un milieu d'indice $n = 1.42$ pour une surface rugueuse de fonction d'auto-corrélation gaussienne avec $ks = 0.6$ et $kl = 2\pi$ en polarisation TE. Les résultats par notre méthode sont à gauche (a) et la comparaison avec les résultats de Sentenac à droite (b) (les résultats FDTD sont en couleur).

du pic spéculaire et décroît rapidement ensuite. La diffusion volumique est beaucoup plus faible mais reste stable sur tout le domaine angulaire. Elle devient prépondérante pour les angles supérieurs à 40^o. Lorsque nous additionnons les deux contributions, nous retrouvons l'intensité totale diffusée par l'ensemble. Ainsi, la somme des deux problèmes simplifiés permet de représenter correctement la diffusion par le milieu hétérogène rugueux. Les deux approches donnent le même résultat et dans ce cas l'hypothèse de découplage est vérifiée. Ainsi, nous avons validé notre outil pour l'étude d'un problème surface/volume. Nous allons pouvoir l'appliquer sur des milieux plus complexes.

6.3 Influence de la rugosité de surface

Dans une première étape, nous avons augmenté la rugosité de surface jusqu'à des ks importants (ks compris entre 1 et 2.5 et $kL = 2\pi$) (c.f. Figure 6.3) tous les autres paramètres restant identiques. La diffusion par les petites particules est la même dans les quatre cas traités, néanmoins l'influence de la diffusion par la surface varie. En effet, la diffusion surfacique devient de plus en plus isotrope à mesure que la rugosité augmente. Ainsi, pour un $ks = 2.5$, le comportement des deux contributions est semblable mais la diffusion par la surface rugueuse reste supérieure à la diffusion par le volume sur tout le domaine angulaire. Dans tous ces cas, la décomposition surface/volume donne de très bons résultats même pour des rugosités qui peuvent être importantes.

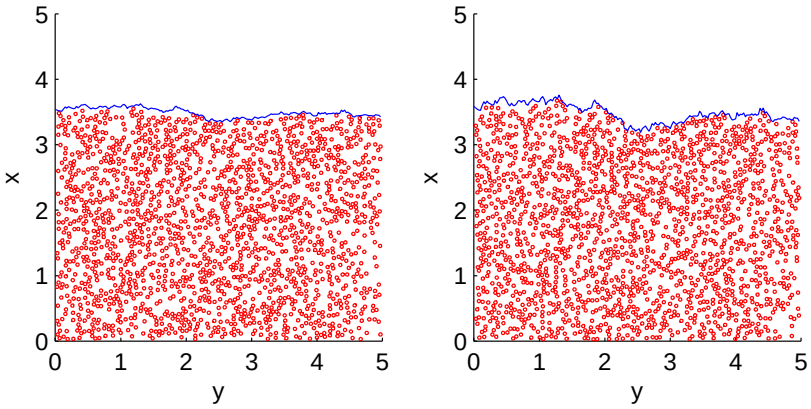
Ce résultat est important puisqu'il prouve que le critère développé par Durant [33] est



(a) $ks = 1$ (b) $ks = 1.5$

(c) $ks = 2$ (d) $ks = 2.5$

FIG. 6.3 – Diagramme de l'intensité diffusée par l'ensemble (petites particules et surface) pour des particules de rayon $r = 0.035\lambda$ et d'indice $n_i = 3 + i0.57$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.42$ pour une fraction volumique de 20%, et pour une surface de fonction d'autocorrélation gaussienne avec $ks = 1$, $ks = 1.5$, $ks = 2$ et $ks = 2.5$ avec $kL = 2\pi$ en polarisation TE.



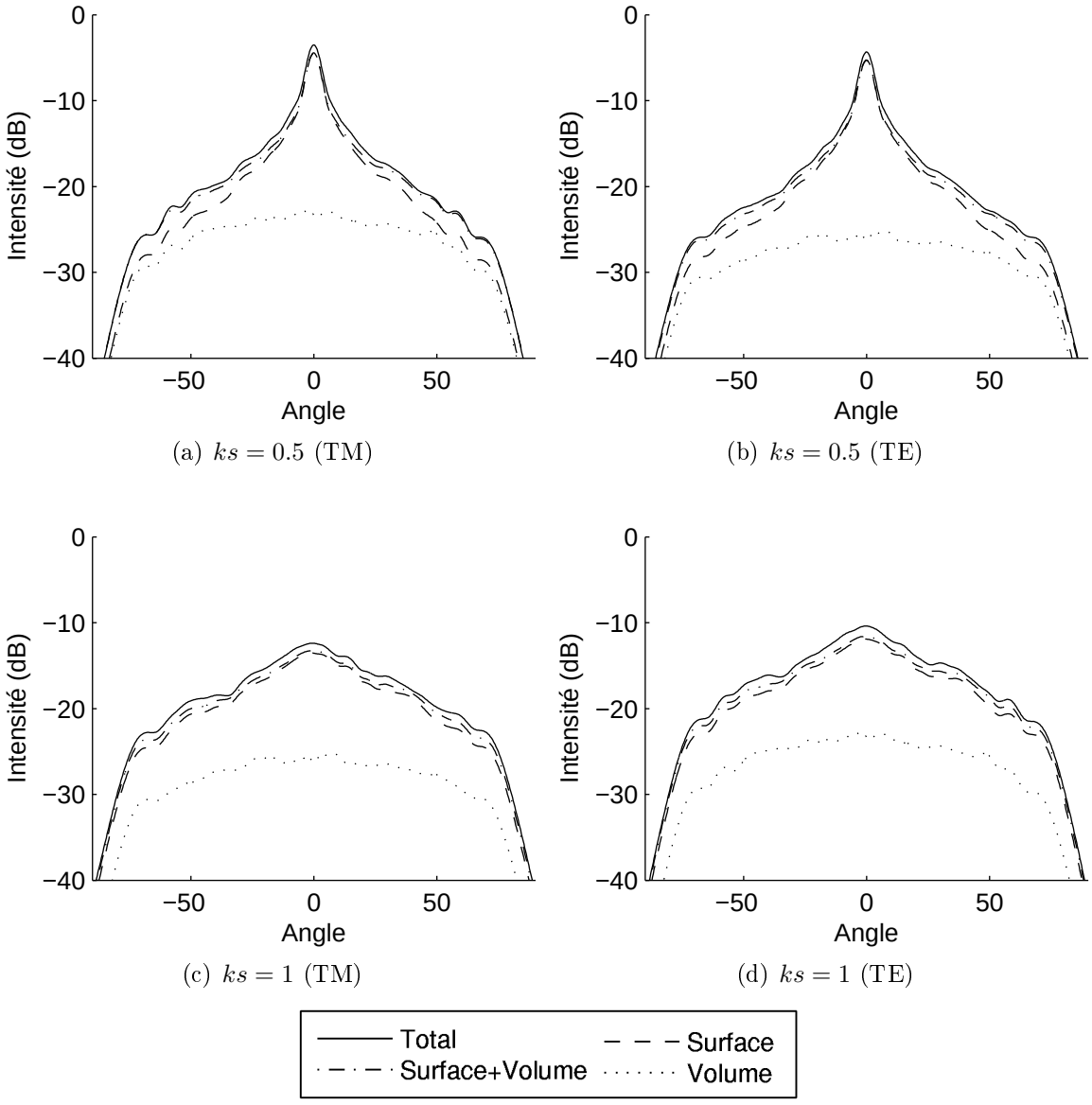
(a) $ks = 0.5$ (b) $ks = 1$

FIG. 6.4 – Visualisation d'un morceau d'un milieu utilisé pour les calculs dans le cas des particules de rayon $r_i = \lambda_0/40$ pour une fraction volumique de 20% pour une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle de paramètres $ks = 0.5$ et $ks = 1$ avec $kL = 2\pi$.

suffisant mais pas nécessaire. En effet, dans ce cas, le découplage donne toujours de bons résultats même pour un rapport $\frac{ks}{kL} > 0.2$. La validité de l'hypothèse de découplage n'est donc pas uniquement régie par la rugosité de surface.

Nous nous sommes pour l'instant intéressés à des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne. Nous allons utiliser des surfaces d'auto-corrélation exponentielle comme celles montrées sur la Figure 6.4. On observe des variations rapides des hauteurs de la surface caractéristiques de ce type de surface. Les résultats sont présentés sur la Figure 6.5 pour $ks = 0.5$ et $ks = 1$ et pour $kL = 2\pi$. On remarque que l'hypothèse de découplage est moins précise que pour les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne dans le cas $ks = 0.5$, et des différences significatives apparaissent à proximité du pic spéculaire dans les deux polarisations. Lorsque la rugosité augmente le diagramme total est sous-estimé par l'hypothèse de découplage. Une partie de ce phénomène peut être expliquée en considérant l'énergie transmise par la surface. En effet, nous avons vu, dans le chapitre 4, que les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle modifiaient largement l'énergie transmise et réfléchie en se comportant comme une couche d'adaptation d'impédance, alors que dans le cas d'une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne ces énergies restaient assez stables en fonction de la rugosité. Les petites rugosités ont donc un rôle fondamental en interagissant fortement avec les particules situées sous la surface et en redistribuant différemment l'énergie diffusée.

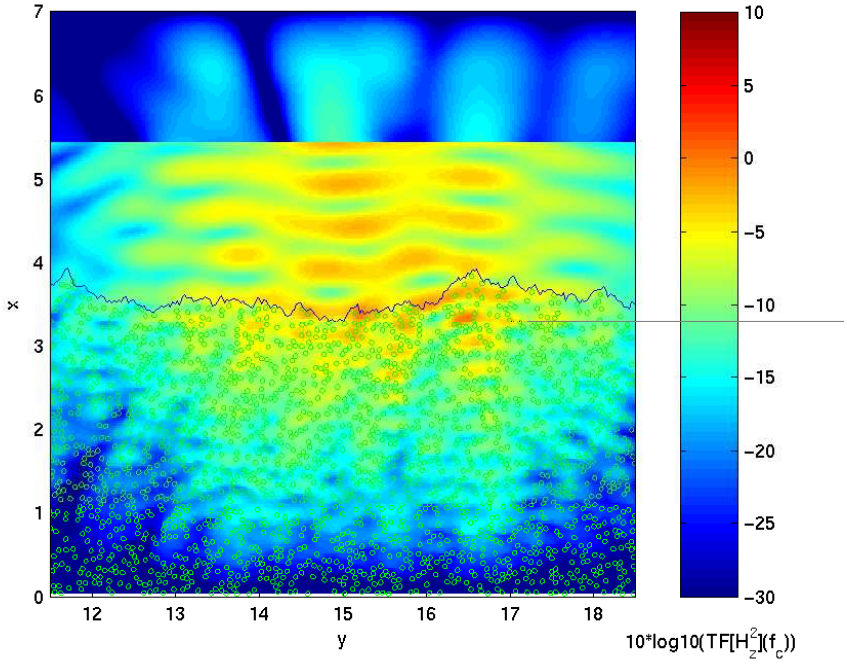
La Figure 6.6 donne le module des champs à la fréquence étudiée dans le domaine de calcul pour le cas traité. Nous observons un comportement très différent dans les deux polarisations. En effet, en polarisation TE, le champ se propage assez loin alors qu'il reste limité à une fine couche en polarisation TM dans le milieu hétérogène. On observe des fluctuations du champ dues à l'indice élevé des particules.



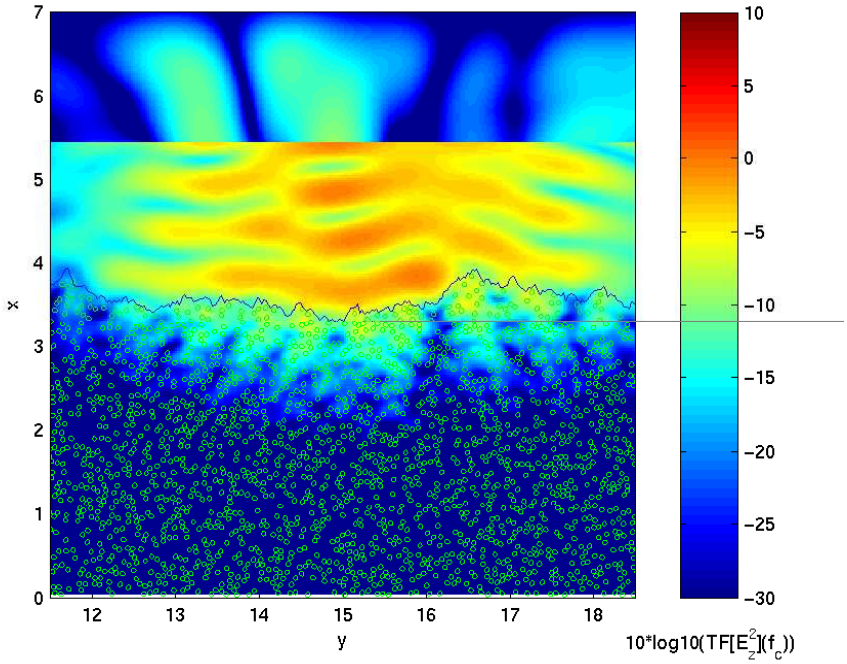
(a) $ks = 0.5$ (TM) (b) $ks = 0.5$ (TE)

(c) $ks = 1$ (TM) (d) $ks = 1$ (TE)

FIG. 6.5 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = 0.035\lambda$ et d'indice $n_i = 3 + i0.57$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.42$ pour une fraction volumique de 20%, et pour une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle avec $ks = 0.5$ $ks = 1$ et $kL = 2\pi$ en polarisation TM et TE.



(a) Polarisation TE



(b) Polarisation TM

FIG. 6.6 – Champ E_z en TM et H_z en TE dans le domaine de calcul à la fréquence étudiée pour des particules de rayon $r = 0.035\lambda_0$ et d'indice $n_i = 3.05 + i0.57$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.42$ pour une fraction volumique de 20%. La surface est de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Les particules sont entourées d'un trait vert et la surface est représentée par un trait bleu.

6.4 Influence de la fraction volumique et de la taille des particules

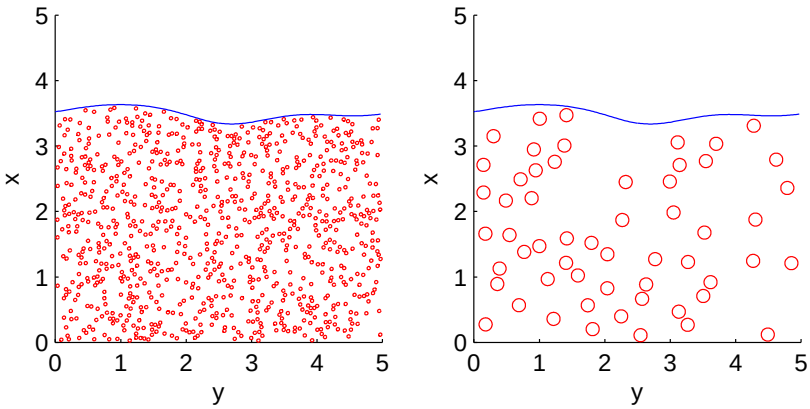
Le paragraphe précédent présentait une extension des résultats publiés en augmentant la rugosité de surface. Nous allons désormais utiliser des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètres statistiques fixes ($ks = 0.6$ et $kL = 2\pi$) et faire varier la fraction volumique et la taille des particules. Pour cela, nous avons retenu trois fractions volumiques (10%, 20% et 30%) ainsi que deux tailles de particules ($\lambda_0/40$ et $\lambda_0/10$). Ainsi, comme montré sur la Figure 6.7, nous accédons à différentes géométries. Dans le cas des particules de rayon $\lambda_0/40$, on observe de nombreuses particules par unité de volume dans le milieu hôte : on trouve seulement 56 particules sur la Figure 6.7b contre 892 sur la Figure 6.7a.

Les calculs seront effectués dans deux configurations. Dans la première, le milieu hôte présente une absorption forte (0.2) et les interactions entre les particules et la surface seront donc limitées. L'absorption sera alors équivalente à l'extinction. Dans le second cas, les pertes seront faibles (0.02) et l'influence de la diffusion dans l'extinction importante.

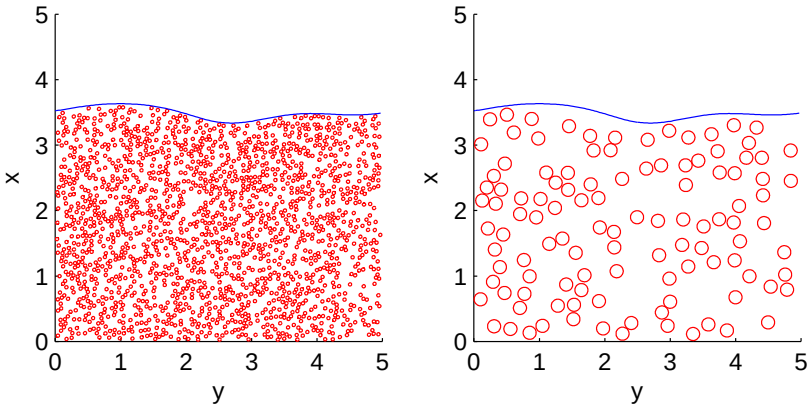
6.4.1 Milieu hôte à pertes

Pour cette étude, nous utiliserons un milieu à pertes d'indice $n_h = 1.63 + i0.2$. Les particules sont de rayon $r_i = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$. Ces résultats sont présentés dans les deux polarisations et pour diverses fractions volumiques (10%, 20% et 30%) sur la Figure 6.8. Pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètres $ks = 0.6$ et $kL = 2\pi$, les deux polarisations ont un diagramme de diffusion quasiment identique. Ainsi, sur ces 6 courbes, la diffusion surfacique est uniquement modifiée par l'indice effectif utilisé. Les effets de la diffusion volumique restent très faibles. Pour la Figure 6.8(a et b), l'effet de la diffusion incohérente du volume est faible. Son influence n'est visible que au dessus d'un angle d'observation de 50^o. La diffusion par la surface reste largement supérieure à la diffusion par le volume sur le reste du domaine angulaire. Ainsi, la somme des deux contributions est quasiment égale à la diffusion par la surface seule. Lorsque la fraction volumique augmente, l'effet de la diffusion incohérente du volume augmente mais son impact reste très faible. En effet, elle n'apparaît qu'au dessus d'un angle de 45^o pour une fraction volumique de 20% et de 40^o pour une fraction volumique de 30%. Les variations du pic cohérent en fonction de la fraction volumique sont récapitulées dans le tableau suivant :

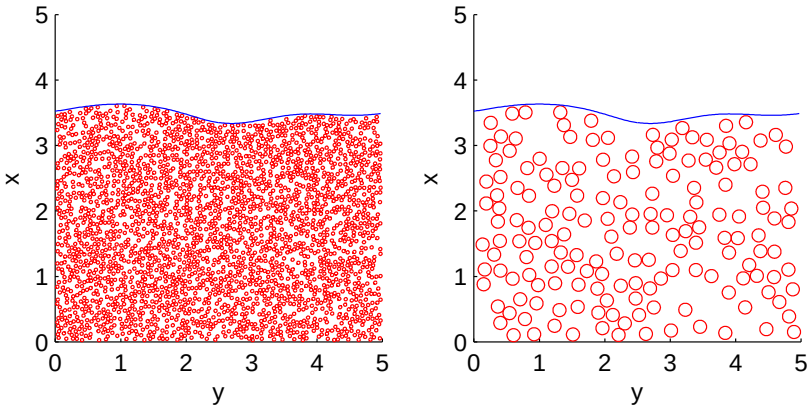
Fraction volumique	n_{eff}[TM]	$I^{total}(0)$[TM]	$n_{eff}[TE]$	$I^{total}(0)$[TE]
10%	$1.73 + i0.16$	-6.9 dB	$1.69 + i0.18$	-7.2 dB
20%	$1.83 + i0.13$	-5.9 dB	$1.76 + i0.16$	-6.4 dB
30%	$1.9 + i0.1$	-5.7 dB	$1.82 + i0.14$	-6.2 dB



(a) $f_v = 10\%$ $r_i = \lambda_0/40$ (b) $f_v = 10\%$ $r_i = \lambda_0/10$



(c) $f_v = 20\%$ $r_i = \lambda_0/40$ (d) $f_v = 20\%$ $r_i = \lambda_0/10$



(e) $f_v = 30\%$ $r_i = \lambda_0/40$ (f) $f_v = 30\%$ $r_i = \lambda_0/10$

FIG. 6.7 – Visualisation d'un morceau d'un milieu utilisé pour les calculs surfaces volume dans le cas des particules de rayon $r_i = \lambda_0/40$ et $r_i = \lambda_0/10$ pour différentes fractions volumiques (10%, 20% et 30%) pour une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètres $ks = 0.6$ et $kL = 2\pi$.

L'utilisation d'un indice effectif permet de prendre en compte l'évolution de la diffusion de surface. L'hypothèse de découplage surface/volume est ici très précise. Nous pouvons, de plus, remarquer sur la Figure 6.9 que le champ s'atténue rapidement lors de sa propagation dans le milieu hétérogène. La polarisation TM présente des fluctuations plus marquées du champ dans le milieu que la polarisation TE.

Lorsque nous augmentons la taille des particules ($r_i = \lambda_0/10$ - Figure 6.10), la contribution du volume est plus importante. Les indices effectifs sont :

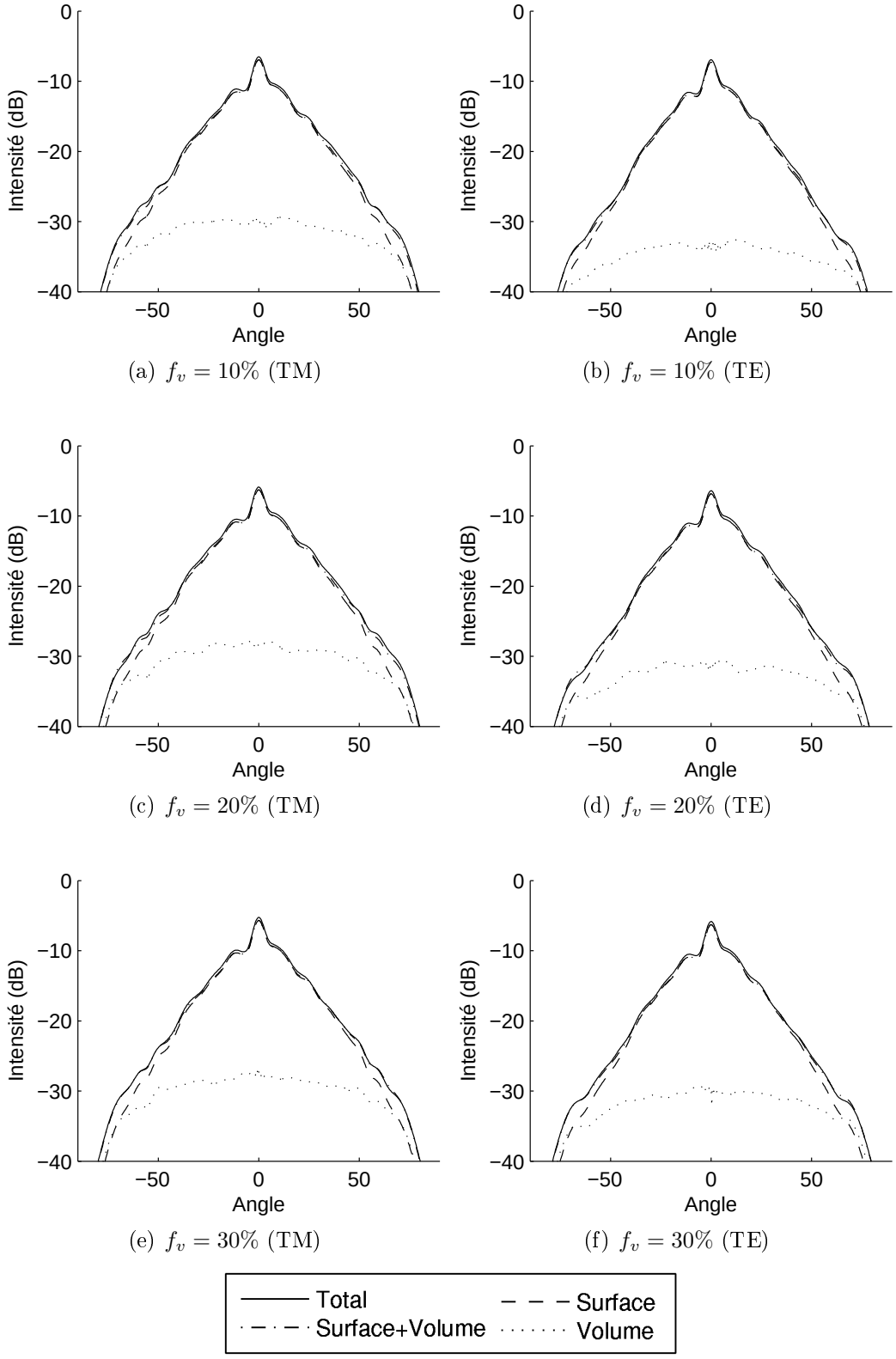
Fraction volumique	n_{eff}[TM]	$n_{eff}[TE]$
10%	$1.73 + i0.19$	$1.69 + i0.19$
20%	$1.83 + i0.17$	$1.76 + i0.18$
30%	$1.9 + i0.15$	$1.82 + i0.16$

Ils sont quasiment identiques au calcul précédent. Ainsi la surface homogénéisée donne les mêmes résultats pour toutes les fractions volumiques que le cas des particules de rayon $\lambda_0/40$. Nous pourrons donc étudier l'influence du volume. Pour une fraction volumique de 10%, les effets du volume sont importants au delà d'un angle d'observation de 40^o. Le niveau de la diffusion incohérente est bien plus fort en TM qu'en TE (5 dB de différence). Nous observons que le découplage est toujours précis pour la fraction volumique la plus faible (10%) et donne de très bons résultats. On note ensuite, pour une fraction volumique de 20 puis de 30% une surévaluation progressive de la diffusion par la surface. La différence est plus visible en polarisation TM, car la diffusion par les particules et l'indice effectif y sont beaucoup plus forts. Ainsi, la différence ne devient vraiment significative qu'à partir d'une fraction volumique de 30% en polarisation TE (entre 1 dB et 2 dB d'écart). La taille des particules a donc un rôle important sur l'erreur commise en utilisant l'hypothèse de découplage.

La Figure 6.11 présente des fluctuations du champ dans le milieu beaucoup plus importantes que sur la figure 6.9 surtout en polarisation TM. Le comportement de l'onde lors des interactions avec les particules est donc beaucoup plus complexe et il en est vraisemblablement de même pour l'interaction avec la surface. On note, comme précédemment que la polarisation TM présente des fluctuations beaucoup plus importantes que la polarisation TE. Notamment, on observe un renforcement local du champ dans les particules pour cette polarisation.

6.4.2 Milieu hôte à faibles pertes

Dans ce cas les pertes sont beaucoup plus faibles dans le milieu hôte ($n_h = 1.63 + i0.02$). Les résultats pour des particules de rayon $r_i = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ sont présentés Figure 6.12. La diffusion incohérente due aux particules n'est plus négligeable et devient fortement prépondérante pour les angles supérieurs à 50^o. Les deux contributions ont ici un rôle important sur l'ensemble du diagramme. Les indices effectifs utilisés sont :

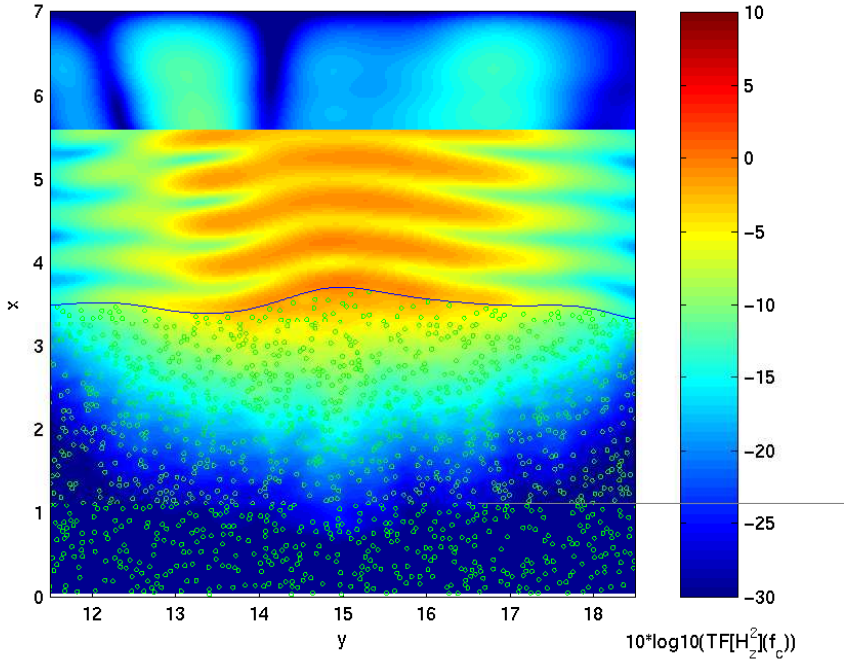


(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

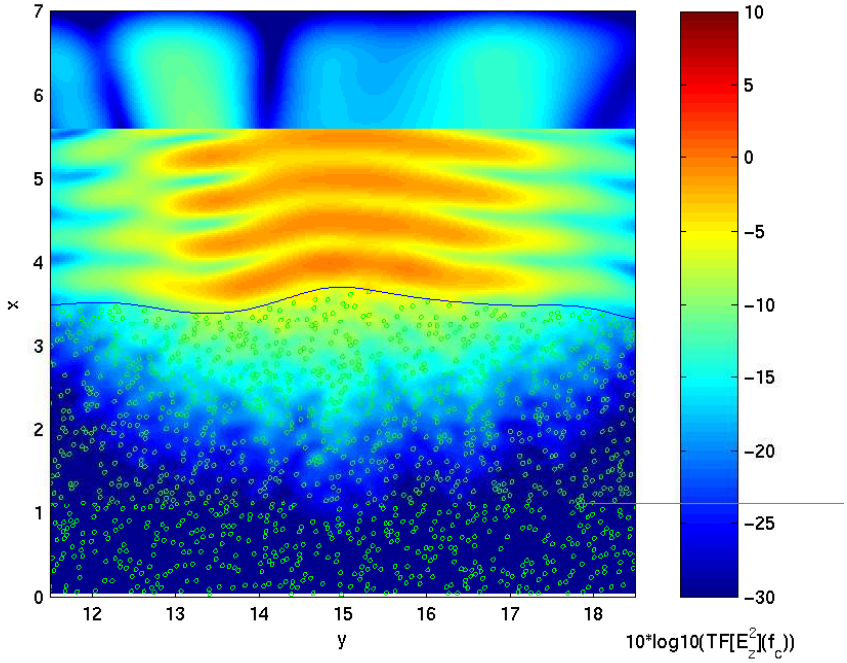
(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.8 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n = 1.63 + i0.2$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE. La surface est de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètres $ks = 0.6$ et $kL = 2\pi$.

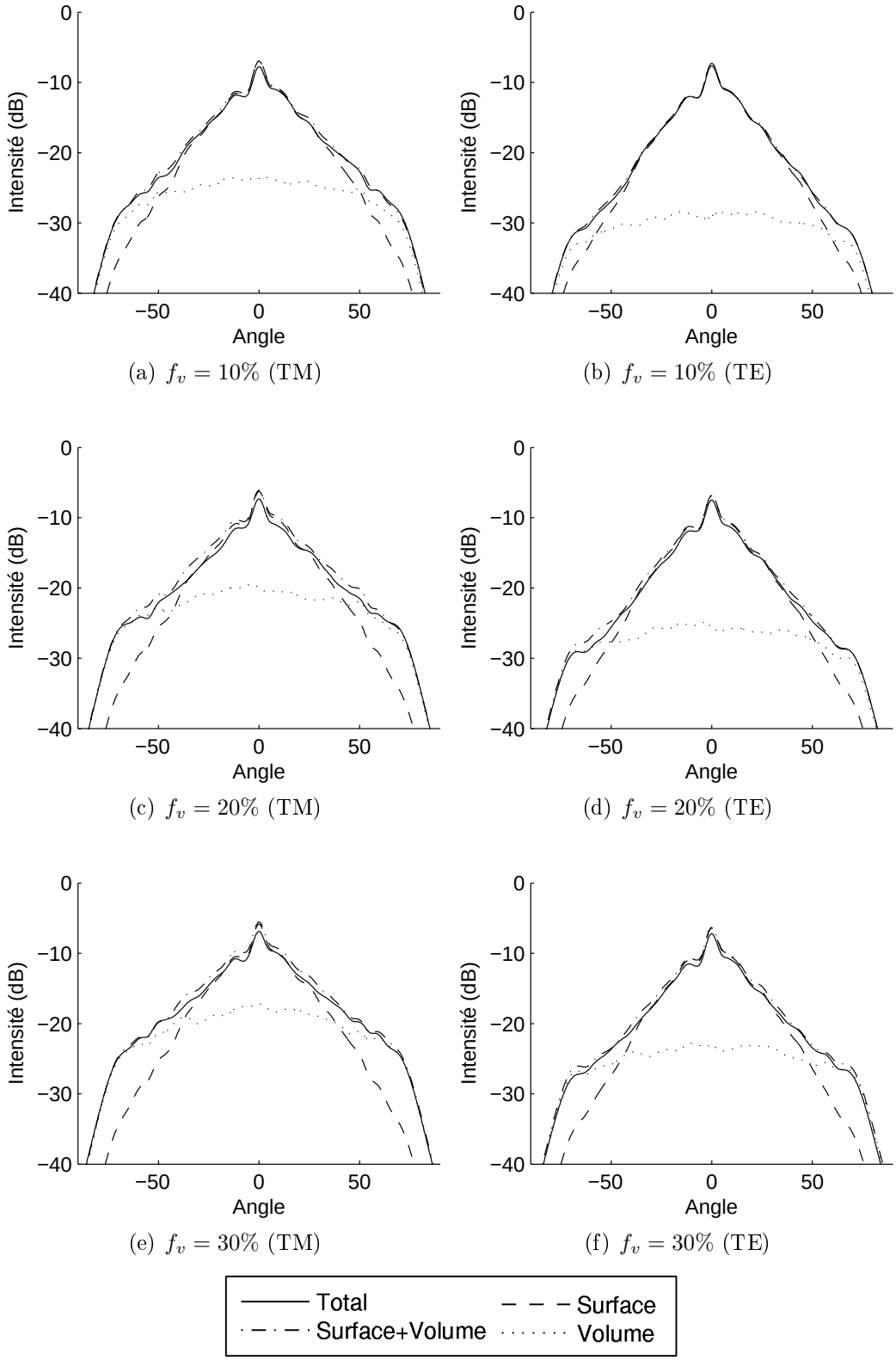


(a) Polarisation TE



(b) Polarisation TM

FIG. 6.9 – Champs E_z en TM et H_z en TE dans le domaine de calcul pour des particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.2$ pour une fraction volumique de 10%. La surface est de fonction d'auto-corrélation gaussienne. Les particules sont entourées d'un trait vert et la surface est représentée par un trait bleu.

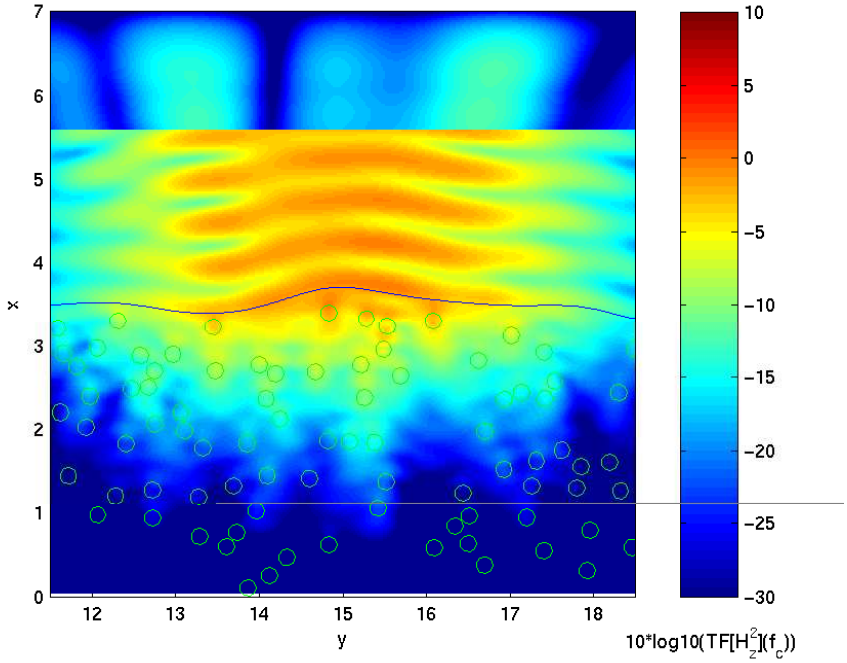


(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

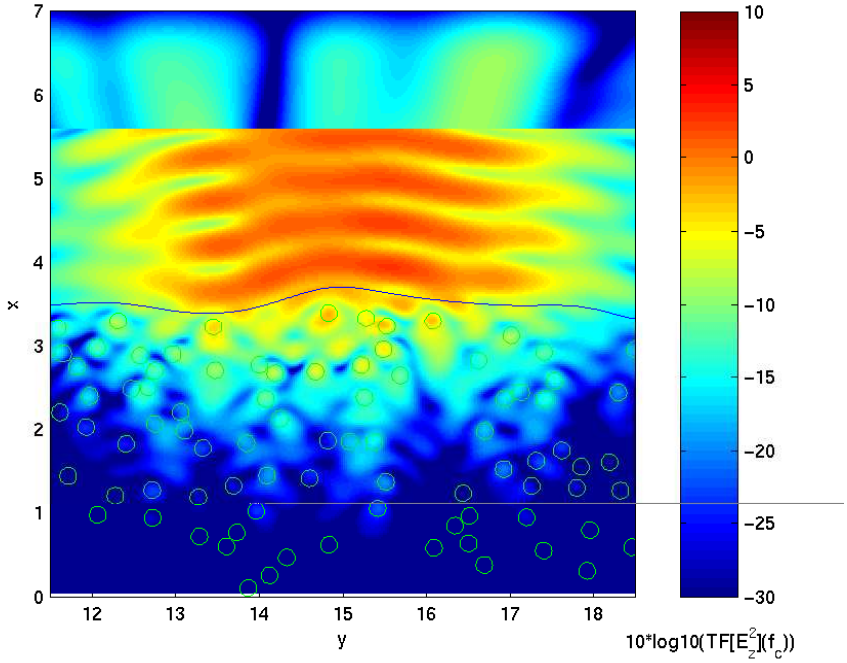
(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.10 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/10$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.2$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE.



(a) Polarisation TE



(b) Polarisation TM

FIG. 6.11 – Champs E_z en TM et H_z en TE dans le domaine de calcul pour des particules de rayon $r = \lambda_0/10$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.2$ pour une fraction volumique de 10%. La surface est de fonction d'auto-corrélation gaussienne. Les particules sont entourées d'un trait vert et la surface est représentée par un trait bleu.

Fraction volumique	n_{eff}[TM]	$n_{eff}[TE]$
10%	$1.72 + i0.02$	$1.69 + i0.019$
20%	$1.82 + i0.017$	$1.76 + i0.017$
30%	$1.9 + i0.015$	$1.82 + i0.015$

La partie réelle de l'indice effectif reste très proche des calculs précédents. Le découplage surface/volume donne de très bons résultats pour les trois fractions volumiques et dans les deux polarisations. On observe trois régimes pour ces courbes :

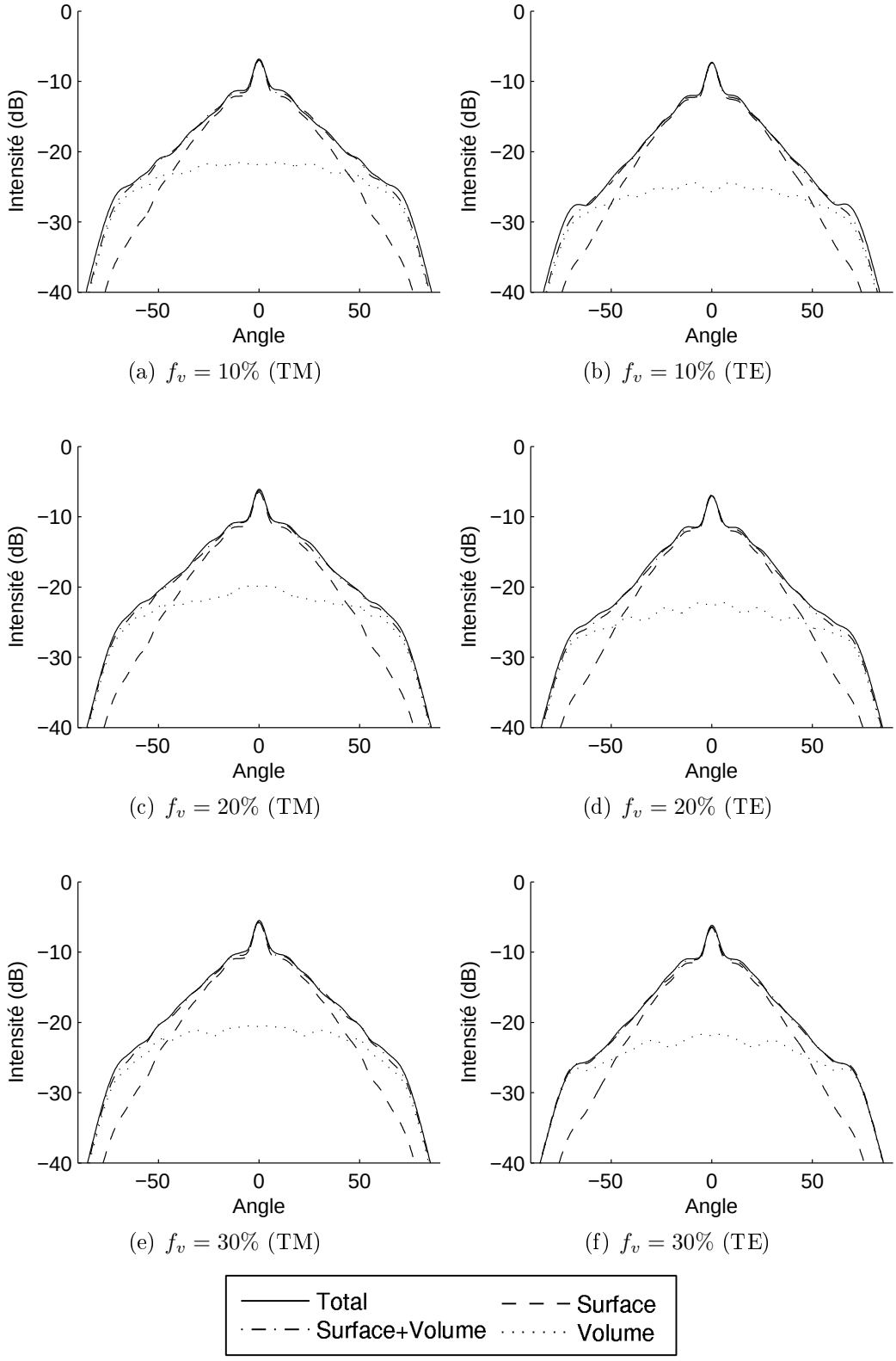
- Un régime de diffusion surfacique pour $\theta_r < 10^o$, avec $I_{total}(\theta_r) \approx I_{surface}(\theta_r)$;
- Un régime mixte pour $10^o < \theta_r < 55^o$;
- Un régime de diffusion volumique pour $\theta_r > 55^o$, avec $I_{total}(\theta_r) \approx I_{volume}(\theta_r)$.

On remarque, là encore, que l'évolution de la diffusion par la surface est bien reproduite en utilisant l'indice effectif pour la propagation de l'énergie cohérente. Le niveau du diffus est approximativement le même que pour un milieu hôte d'indice $n_h = 2.25 + i0.2$ et des particules de rayon $\lambda_0/10$.

Pour des particules de rayon $\lambda_0/10$ (Figure 6.13), la partie incohérente de l'énergie diffusée par les particules est très forte. Les indices effectifs utilisés sont :

Fraction volumique	n_{eff}[TM]	$n_{eff}[TE]$
10%	$1.7 + i0.036$	$1.69 + i0.026$
20%	$1.78 + i0.042$	$1.75 + i0.028$
30%	$1.83 + i0.046$	$1.8 + i0.029$

La diffusion est très importante dans ce cas et influe beaucoup sur l'indice effectif (on a $\Im m(n_{eff}) > \Im m(n_h)$). Pour une fraction volumique de 10% (Figure 6.13(1)), la diffusion par la surface n'est plus prépondérante quel que soit l'angle θ_r en polarisation TM et ne l'est plus que pour des angles inférieurs à 5^o en polarisation TE. Le découplage surface/volume donne toujours des résultats corrects. Lorsque la fraction volumique augmente pour atteindre 20%, la diffusion surfacique ne permet plus que de représenter le cohérent en polarisation TM ($I_{total}(\theta_r) = I_{volume}(\theta_r)$ sauf pour le cohérent) et diminue d'importance en polarisation TE. L'effet de la surface est exalté par l'indice effectif et la somme des deux contributions est supérieure au résultat attendu dans les deux polarisations (environs 2 dB en polarisation TM et 1 dB en polarisation TE). Finalement, pour une fraction volumique de 30%, on a $I_{total}(\theta_r) = I_{volume}(\theta_r)$ en polarisation TM pour tout le domaine angulaire, la polarisation TE présente un régime mixte mais largement dû à la contribution volumique. L'erreur commise par l'hypothèse de découplage est d'environ 3 dB en polarisation TM et entre 1 et 2 dB en polarisation TE.

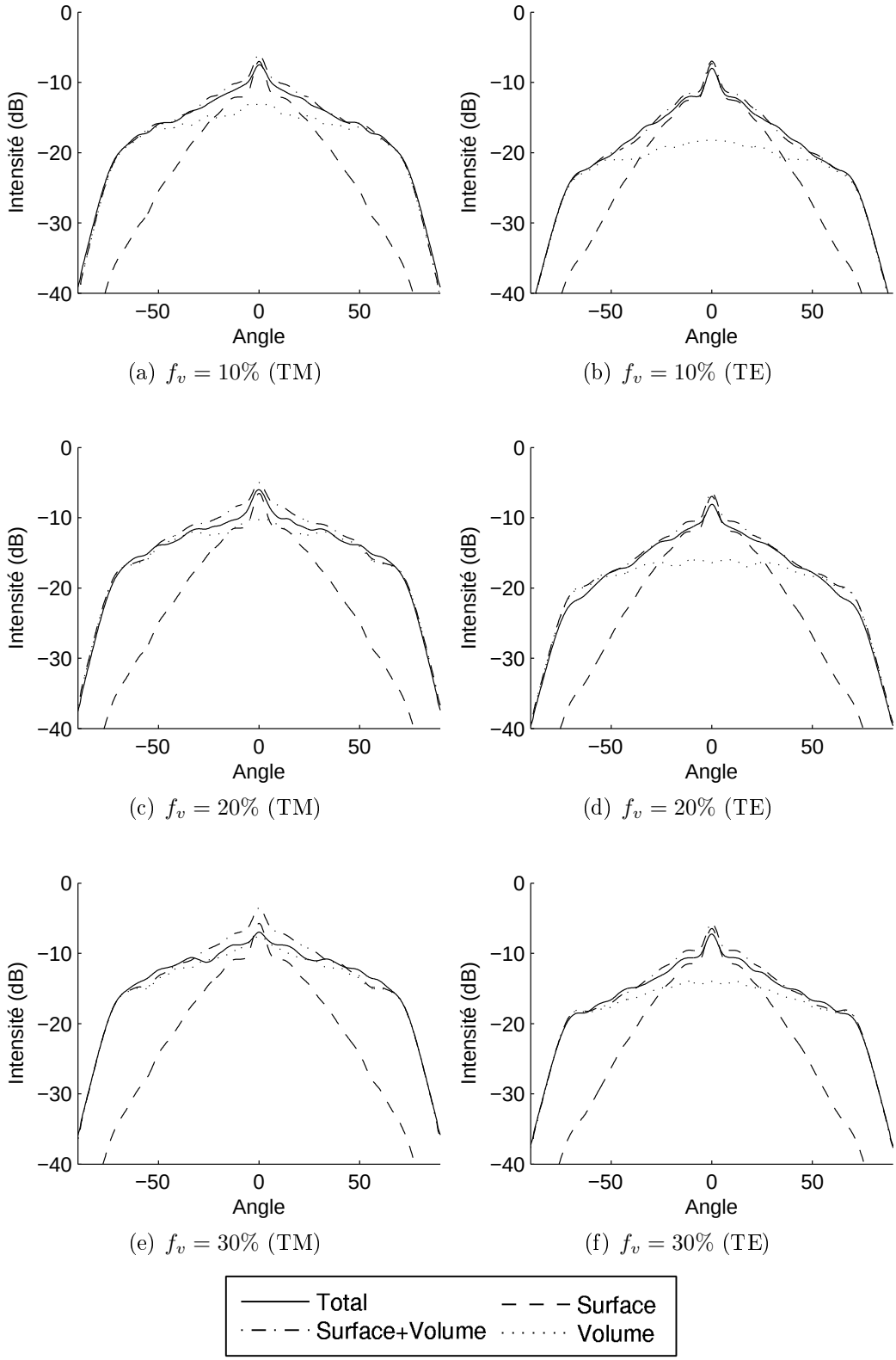


(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.12 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n = 1.63 + i0.02$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE. La surface est de fonction d'auto-corrélation gaussienne de paramètres $ks = 0.6$ et $kL = 2\pi$.



(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.13 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/10$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.02$ pour une fraction volumique de 10% , 20% et 30% en polarisation TM et TE.

6.5 Limites de l'hypothèse de découplage

Pour ce dernier exemple, nous avons augmenté la différence d'indice optique entre le milieu hôte et les particules afin de mettre en défaut l'hypothèse de découplage. L'indice optique des particules est $n_i = 3 + i0.57$ et elles ont un rayon $r_i = \lambda_0/10$ avec une fraction volumique $f_v = 0.2$ et le milieu hôte est d'indice $n_h = 1.42$. Les résultats sont présentés Figure 6.14.

La Figure 6.14(a) utilise l'indice effectif $n_{eff} = 1.6574 + i0.0845$. On observe une différence significative comprise entre 2 et 3 dB entre le problème complet et le problème découplé. L'indice effectif utilisé renforce trop la contribution surfacique. Elle est alors trop élevée et supérieure à la diffusion totale.

Lorsque nous utilisons l'indice du milieu hôte comme indice effectif, c'est-à-dire $n_{eff} = 1.42$, la somme des contributions de la surface et du volume permet de représenter précisément l'évolution de la diffusion totale. Ainsi, quel que soit l'indice effectif utilisé tel que $n_{eff} > n_h$, l'hypothèse de découplage conduira à des erreurs dans le résultat final. Toutes les théories d'homogénéisation présentées ne peuvent donc pas être ici utilisées pour représenter l'influence du volume sur la surface. En particulier, il apparaît que l'indice effectif défini pour décrire la propagation du champ cohérent n'est pas toujours la meilleure caractéristique permettant de rendre compte simplement de la présence des particules selon une hypothèse de découplage.

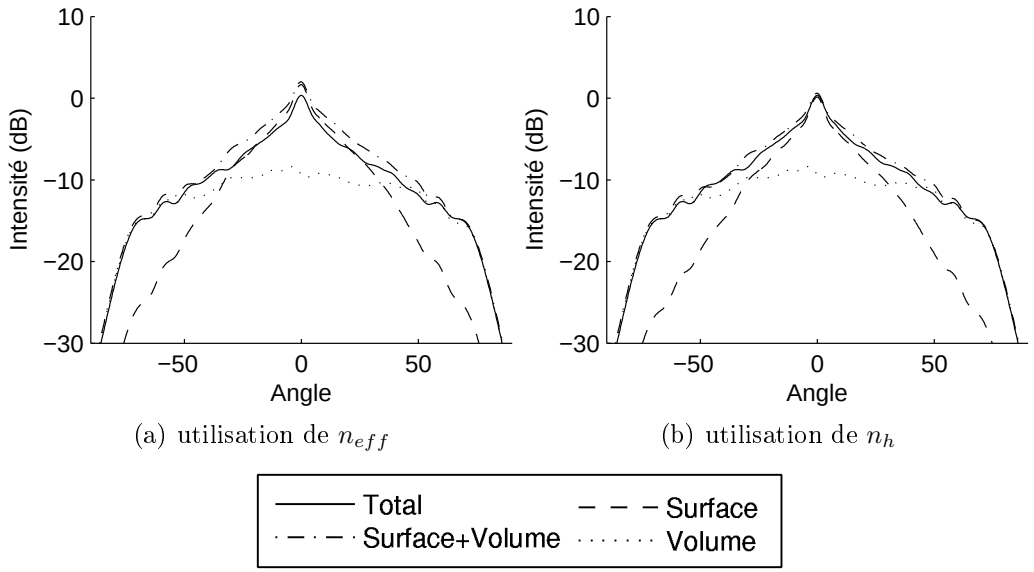
Durant [33] avait déjà remarqué ce phénomène en augmentant la rugosité des surfaces qu'il utilisait, ce qui l'avait amené à séparer deux cas selon les valeurs de ks et kL pour représenter l'interaction entre la surface et les particules :

- Si $\frac{ks}{kL} < 0.2$, il utilisait l'indice effectif pour la propagation du cohérent ;
- Si $\frac{ks}{kL} > 0.2$, il utilisait l'indice du milieu hôte.

Comme nous l'avons vu, ce critère est insuffisant. On retiendra que dans tous les cas étudiés, pour des particules de rayon $r_i < \lambda_0/40$, nous pouvons découpler en utilisant cette approche la contribution de la surface et du volume. L'indice effectif à utiliser pour représenter au mieux l'interaction entre le milieu hôte et les particules est mal défini lorsque leur rayon est $r_i = \lambda_0/10$.

6.6 Surfaces corrélées à la position des particules

Dans cette partie, la génération de la surface est corrélée à la position des particules. L'algorithme de génération a été présenté dans le chapitre 3 de ce manuscrit. La forme de la surface dépend de la taille des particules et de la fraction volumique. On peut voir sur la Figure 6.15 les surfaces générées pour une élasticité $l = 5$ et des particules de rayon $\lambda_0/40$ et $\lambda_0/10$ pour trois fractions volumiques (10%, 20% et 30%). L'effet de la taille des particules et de la fraction volumique sur la surface est évident. On peut ainsi observer



(a) utilisation de n_{eff} (b) utilisation de n_h

FIG. 6.14 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = 0.1\lambda$ et d'indice $n_i = 3 + i0.57$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.42$ pour une fraction volumique de 20% et pour une surface rugueuse d'auto-corrélation gaussienne avec $ks = 0.6$ et $kL = 2\pi$ en polarisation TE. L'indice équivalent est n_{eff} (a) ou n_h (b).

que la surface est pratiquement plane pour des surfaces générées sur les particules de rayon $\lambda_0/40$ tandis qu'elle présente de larges variations des hauteurs pour des particules de rayon $\lambda_0/10$. Pour une élasticité constante, la surface est beaucoup plus rugueuse pour les grosses particules que pour les petites particules.

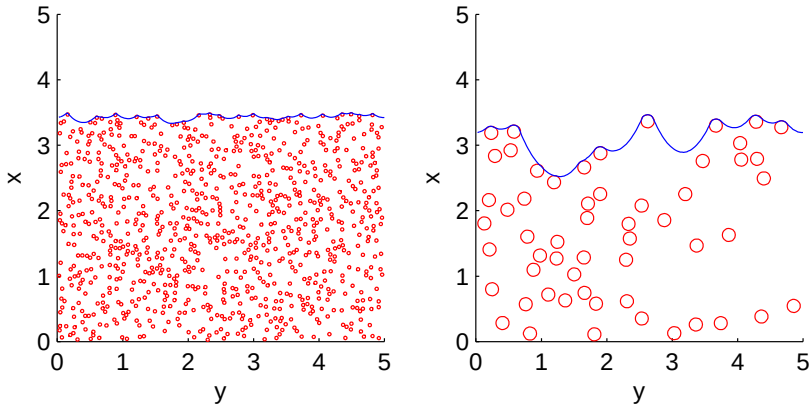
Dans cette configuration, il est alors difficile de séparer l'influence de la surface de celle du volume. En effet, lorsque nous augmentons la fraction volumique pour augmenter sa contribution, nous baissons dans le même temps la contribution de la surface puisque les rugosités seront de plus petite échelle.

Dans cette partie, nous commencerons par l'étude d'un milieu hôte à pertes ($n_h = 1.63 + i0.2$) dans le premier paragraphe puis nous poursuivrons par l'étude d'un milieu hôte avec des pertes faibles ($n_h = 1.63 + i0.02$). Nous étudierons l'influence de la taille des particules et de la fraction volumique. L'élasticité est choisie fixe avec $l = 5$.

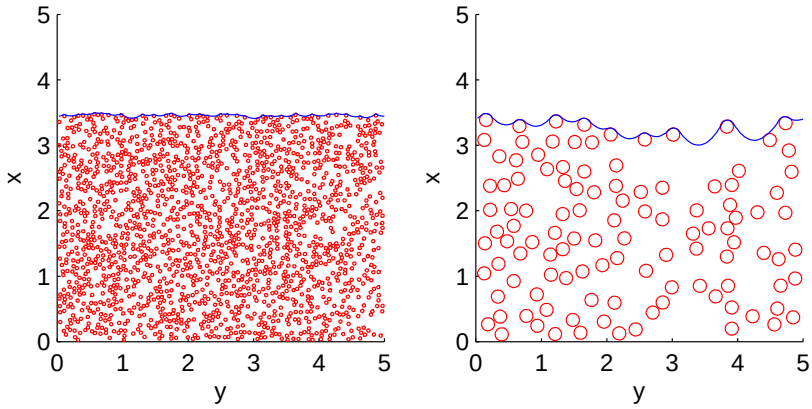
Les indices effectifs utilisés sont les mêmes que dans la section précédente.

6.6.1 Milieu hôte à pertes

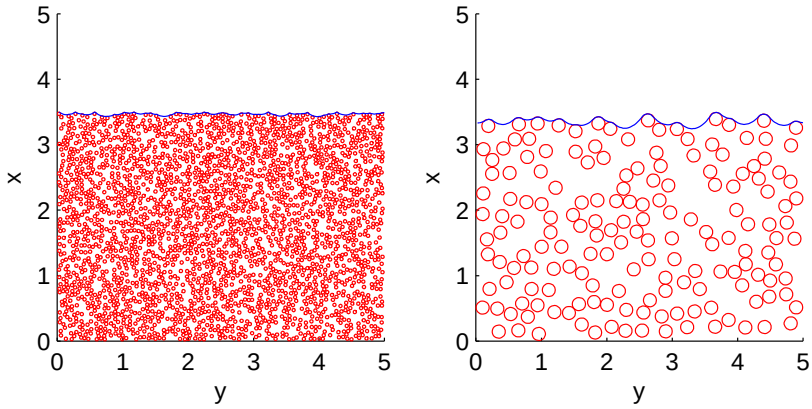
Dans ce cas, l'indice du milieu hôte est $n_h = 1.63 + i0.2$. Les résultats, pour des particules de rayon de $r_i = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$, sont présentés Figure 6.16 pour trois fractions volumiques (10%, 20% et 30%) dans les deux polarisations. La diffusion surfacique est isotrope et garde un cohérent fort. Son comportement est donc largement différent de celui des surfaces de fonctions d'auto-corrélation gaussienne ou exponentielle.



(a) $f_v = 10\%$ $r_i = \lambda_0/40$ (b) $f_v = 10\%$ $r_i = \lambda_0/10$



(c) $f_v = 20\%$ $r_i = \lambda_0/40$ (d) $f_v = 20\%$ $r_i = \lambda_0/10$



(e) $f_v = 30\%$ $r_i = \lambda_0/40$ (f) $f_v = 30\%$ $r_i = \lambda_0/10$

FIG. 6.15 – Visualisation d'un morceau d'un milieu utilisé pour les calculs surfaces volume dans le cas des particules de rayon $r_i = \lambda_0/40$ et $r_i = \lambda_0/10$ pour différentes fractions volumiques (10%, 20% et 30%) pour une surface corrélée à la position des particules avec une élasticité $l = 5$.

En effet, pour les surfaces étudiées précédemment, la diffusion est centrée autour du pic spéculaire et décroît en fonction de l'angle. Lorsque la rugosité augmente, la diffusion devient plus isotrope mais le cohérent n'est plus présent. De plus, on remarque que pour ces courbes, le niveau de la diffusion surfacique est plus élevé en polarisation TE que TM.

Comme nous l'avions annoncé, on observe sur ces courbes une décroissance de la diffusion incohérente de la surface rugueuse en fonction de la fraction volumique de particules. Par exemple, en polarisation TM, le niveau de la diffusion est autour de -22 dB pour $f_v = 10\%$ puis -30 dB pour $f_v = 20\%$ et finalement -33 dB pour $f_v = 30\%$. Dans le même temps, la diffusion par le volume croît pour atteindre un niveau équivalent à la diffusion surfacique autour de $f_v = 20\%$ en polarisation TM et $f_v = 30\%$ en polarisation TE.

Ainsi, pour la fraction volumique la moins élevée ($f_v = 10\%$), la diffusion par l'ensemble est uniquement due à la diffusion surfacique ($I_{total}(\theta_r) = I_{surface}(\theta_r)$) dans les deux polarisations. On remarque que le problème total est bien représenté par la somme des deux contributions.

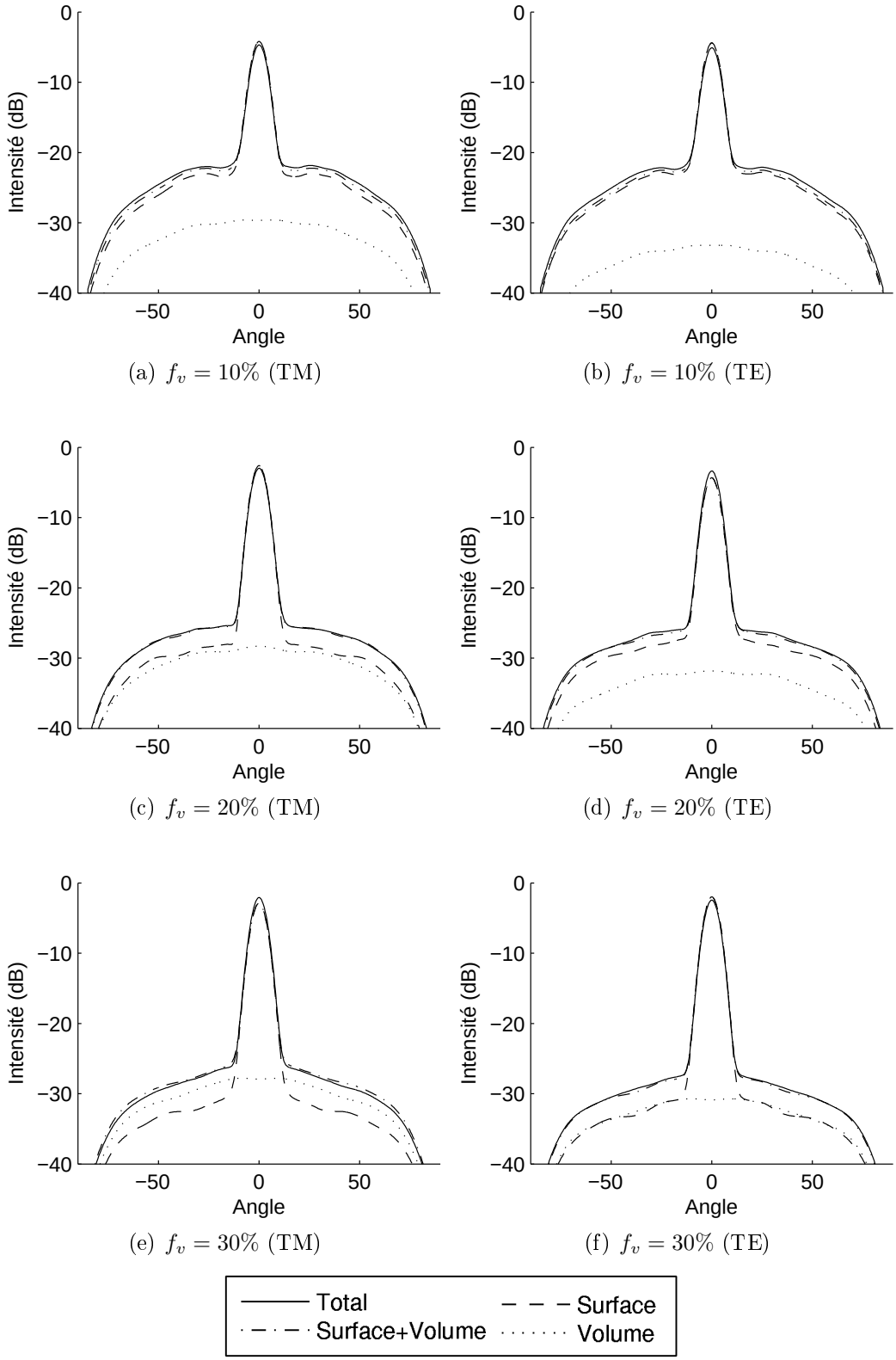
Lorsque la fraction volumique croît, les deux contributions atteignent une intensité équivalente sur tout le domaine angulaire en polarisation TM. c'est-à-dire que l'on a, dans ce cas $I_{volume}(\theta_r) = I_{surface}(\theta_r)$. En polarisation TE, la diffusion par le volume est toujours largement inférieure à la diffusion par la surface. Dans les deux cas, l'hypothèse de découplage surface/volume permet de retrouver exactement la diffusion totale. Ce résultat confirme que la précision de l'hypothèse de découplage n'est pas liée au niveau relatif de la diffusion volumique par rapport à la diffusion surfacique.

Dans le dernier cas traité pour cette taille de particules, pour une fraction volumique de 30%, la diffusion volumique est devenue supérieure à la diffusion surfacique en polarisation TM. Les deux contributions sont égales en polarisation TE. L'hypothèse de découplage est toujours précise.

Les résultats obtenus pour une taille de particules de rayon $\lambda_0/10$ sont présentés Figure 6.17. On observe que le comportement de la diffusion est toujours isotrope pour les deux contributions. Les diffusions par le volume et la surface sont plus élevées que pour des particules de rayon $\lambda_0/40$. Néanmoins, dans ce cas, la contribution du volume reste inférieure à la contribution de la surface pour toutes les fractions volumiques étudiées.

Dans le cas d'une fraction volumique $f_v = 10\%$, on observe une absence de champ cohérent diffusé dans les deux polarisations. Le niveau du champ diffusé par les particules sous un plan est très faible par rapport à la contribution de la surface rugueuse avec un indice effectif. La somme des deux sous estime le résultat du calcul total. Cette différence est très grande en polarisation TM (de l'ordre de 5 dB). L'hypothèse de découplage surface/volume n'est donc pas valable dans ce cas.

Lorsque nous augmentons la fraction volumique (20%), on note l'apparition d'une composante cohérente dans le champ total diffusé correspondant à l'aplanissement de la surface. La contribution du volume, bien qu'ayant augmenté reste faible. Le champ total



(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.16 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.02$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE. La surface est corrélée à la positon des particules ($e = 5$).

diffusé est toujours sous-estimé dans ce cas par l'hypothèse de découplage (environ 4 dB en polarisation TM et 2 dB en polarisation TE).

Dans le dernier cas ($f_v = 30\%$), la contribution du volume devient significative en polarisation TM mais reste très faible en polarisation TE. L'hypothèse de découplage surface/volume est toujours imprécise et la différence entre le champ total diffusé et la somme des deux contributions présente toujours de grandes différences en polarisation TM (environ 3 dB).

Nous avons donc vu que l'hypothèse de découplage permet de représenter précisément dans tous les cas la diffusion par le système complet pour des particules de rayon $\lambda_0/40$. Le niveau de la diffusion par la surface est inférieur au niveau de la diffusion par les surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne utilisées dans la section précédente.

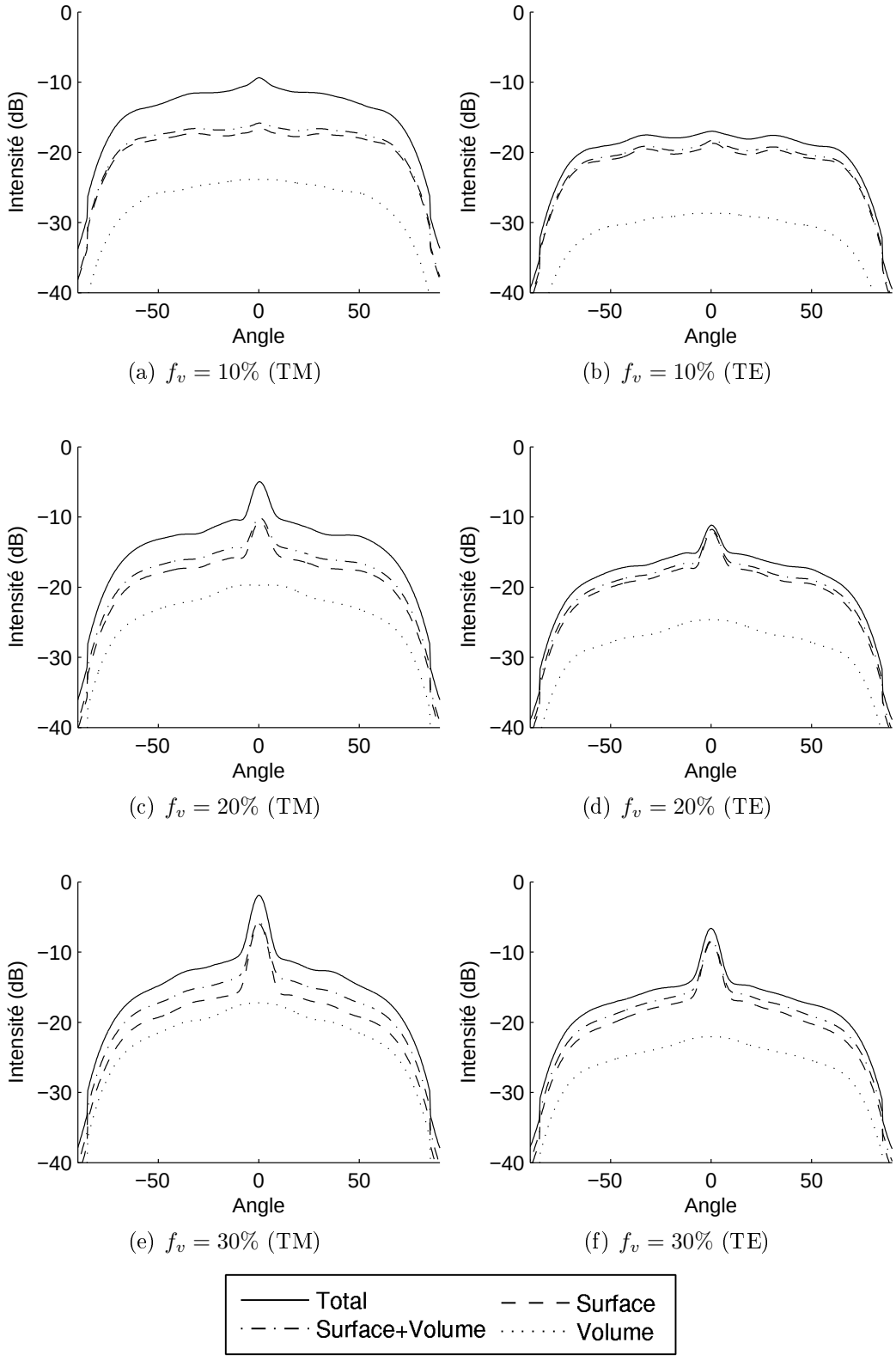
Lorsque nous utilisons des particules de rayon $\lambda_0/10$, l'hypothèse de découplage conduit à des erreurs significatives. Ces erreurs baissent lorsque la fraction volumique augmente puisque la surface se rapproche alors du comportement d'une surface plane. Les erreurs sont souvent plus grandes en polarisation TM car la diffusion par les particules est beaucoup plus importante dans ce cas.

6.6.2 Milieu hôte à faibles pertes

Dans ce cas les pertes sont beaucoup plus faibles dans le milieu hôte ($n_h = 1.63+i0.02$). Les résultats pour des particules de rayon $r_i = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ sont présentés Figure 6.18 pour les deux polarisations. Dans ce cas, le niveau de la diffusion par le volume est beaucoup plus important, ainsi que les interactions entre la surface et les particules. Dès une fraction volumique de 10%, la surface et le volume sont du même niveau en polarisation TM. Pour la polarisation TE, l'équivalence est atteinte pour une fraction volumique comprise entre 10% et 20%. Cette étape nous permettra donc d'évaluer l'influence sur l'hypothèse de découplage de la diffusion volumique.

Dans le premier cas ($f_v = 10\%$), le niveau de la diffusion des deux contributions est identique en polarisation TM et le niveau de la diffusion surfacique est toujours supérieure à la diffusion volumique en polarisation TE. On retrouve donc un cas similaire à la fraction volumique de 20% avec le milieu hôte à pertes mais avec un niveau de diffusion beaucoup plus fort. On remarque que l'hypothèse de découplage surface/volume permet de représenter précisément la diffusion par l'ensemble.

Lorsque nous augmentons la fraction volumique ($f_v = 20\%$), on assiste logiquement à une baisse de la contribution surfacique combinée à l'augmentation de la contribution volumique. La contribution volumique devient alors supérieure à la contribution surfacique dans les deux polarisations. La différence entre les deux contributions est néanmoins toujours moindre en polarisation TE qu'en polarisation TM. L'hypothèse de découplage donne toujours d'excellents résultats.



(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.17 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/10$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.2$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE. La surface est corrélée à la position des particules ($e = 5$).

Pour le dernier cas ($f_v = 30\%$), la diffusion surfacique baisse énormément. En effet, le diffus total est alors uniquement dû à la contribution du volume, la surface n'intervenant plus que pour le cohérent ($I_{total}(\theta_r) = I_{volume}(\theta_r)$). L'hypothèse de découplage surface/volume permet toujours de représenter efficacement la diffusion par l'ensemble.

Lorsque nous augmentons la taille des particules ($r_i = \lambda_0/10$ - Figure 6.19), nous augmentons les deux contributions. En effet, les particules plus grosses diffusent plus et la taille des rugosités de surface est augmentée. Ainsi, le niveau initial des deux contributions est proche du cas précédent avec une diffusion surfacique et volumique du même ordre de grandeur.

Dans le premier cas ($f_v = 10\%$), la rugosité de la surface est suffisante pour supprimer le cohérent. Le niveau du diffus dû au volume est du même niveau que le niveau dû à la surface. Dès cette fraction volumique, nous observons que l'hypothèse de découplage conduit à une sous-estimation importante de la diffusion par le problème total (environ 4 dB en polarisation TM et 2 dB en polarisation TE). En polarisation TM, la valeur du champ E_z à la fréquence étudiée est représentée Figure 6.20. On observe que la pénétration du champ est limitée aux premières particules situées dans le même domaine que la surface rugueuse. Ainsi, l'onde ne peut pas voir un volume et une surface séparée mais les deux sont intimement liées. Cette caractéristique explique sans doute l'amplitude de l'erreur commise en utilisant l'hypothèse de découplage surface/volume.

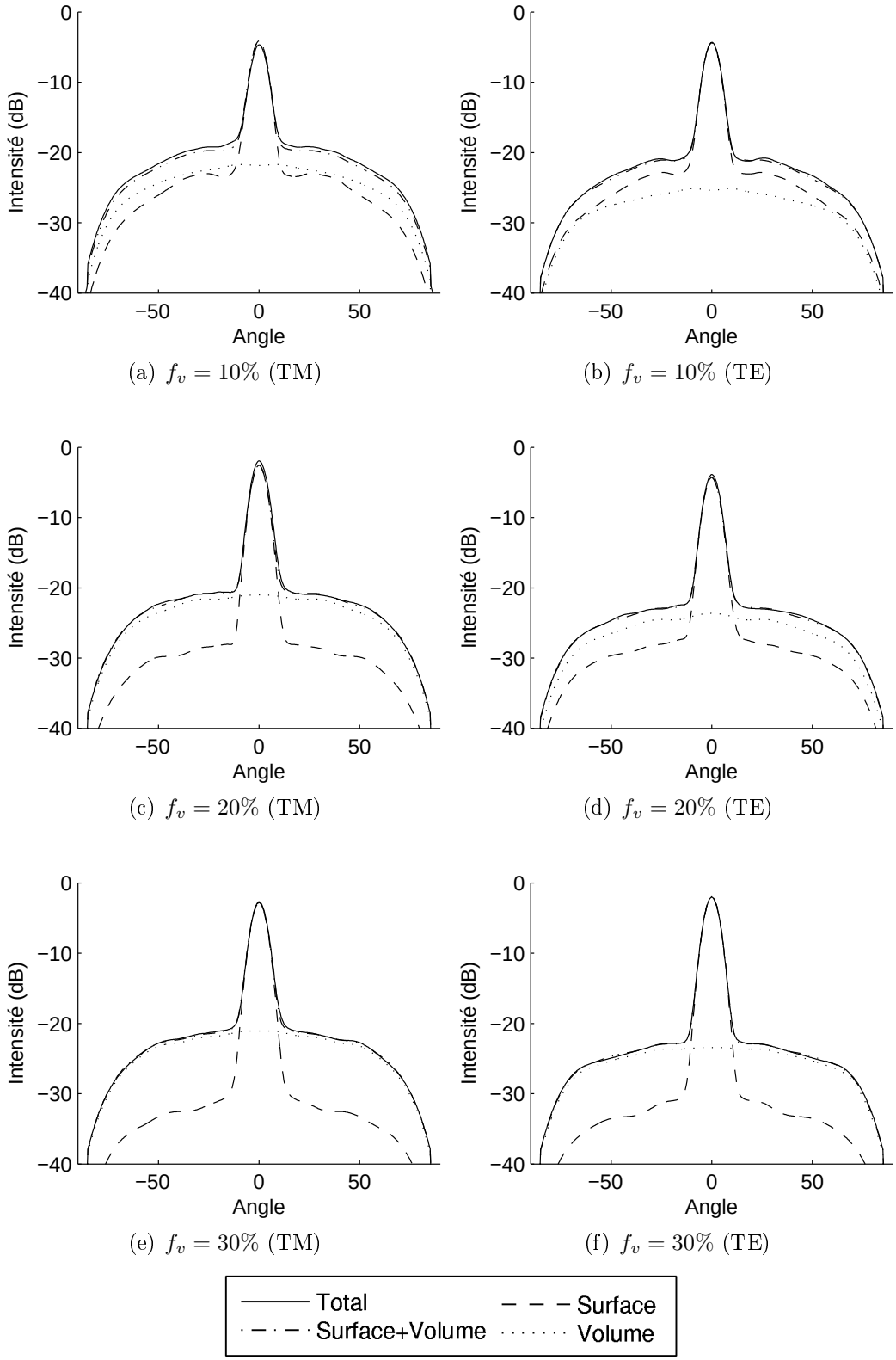
Dans le second cas ($f_v = 20\%$) la contribution du volume devient supérieure à la contribution de la surface en polarisation TM mais reste du même ordre de grandeur en polarisation TE. L'hypothèse de découplage sous-estime toujours le résultat attendu (environ 2 dB en polarisation TM et 1 dB en polarisation TE).

Finalement, dans le dernier cas, la diffusion est principalement volumique sauf pour le cohérent, notamment en polarisation TM. La somme des deux contributions présente toujours de légères différences avec le calcul de la diffusion par le problème total.

6.7 Synthèse

Dans le cadre de ce chapitre, nous avons vu plusieurs cas d'utilisation de l'hypothèse de découplage. Dans le premier cas, la fraction volumique est de 20%, l'indice des particules est $n_i = 3 + i0.57$, l'indice du milieu hôte est $n_h = 1.42$. Les erreurs obtenues en utilisant l'hypothèse de découplage sont récapitulées dans le tableau suivant :

Type de la surface	Paramètres de calcul	$r_i = \lambda_0/30$	$r_i = \lambda_0/10$
Gaussienne	$ks = 0.6$, $kL = 2\pi$	≈0 dB	2 dB
	$ks = 1$ à $ks = 2.5$, $kL = 2\pi$	≈0 dB	
Exponentielle	$ks = 0.5$ et $ks = 1$, $kL = 2\pi$	1 dB	

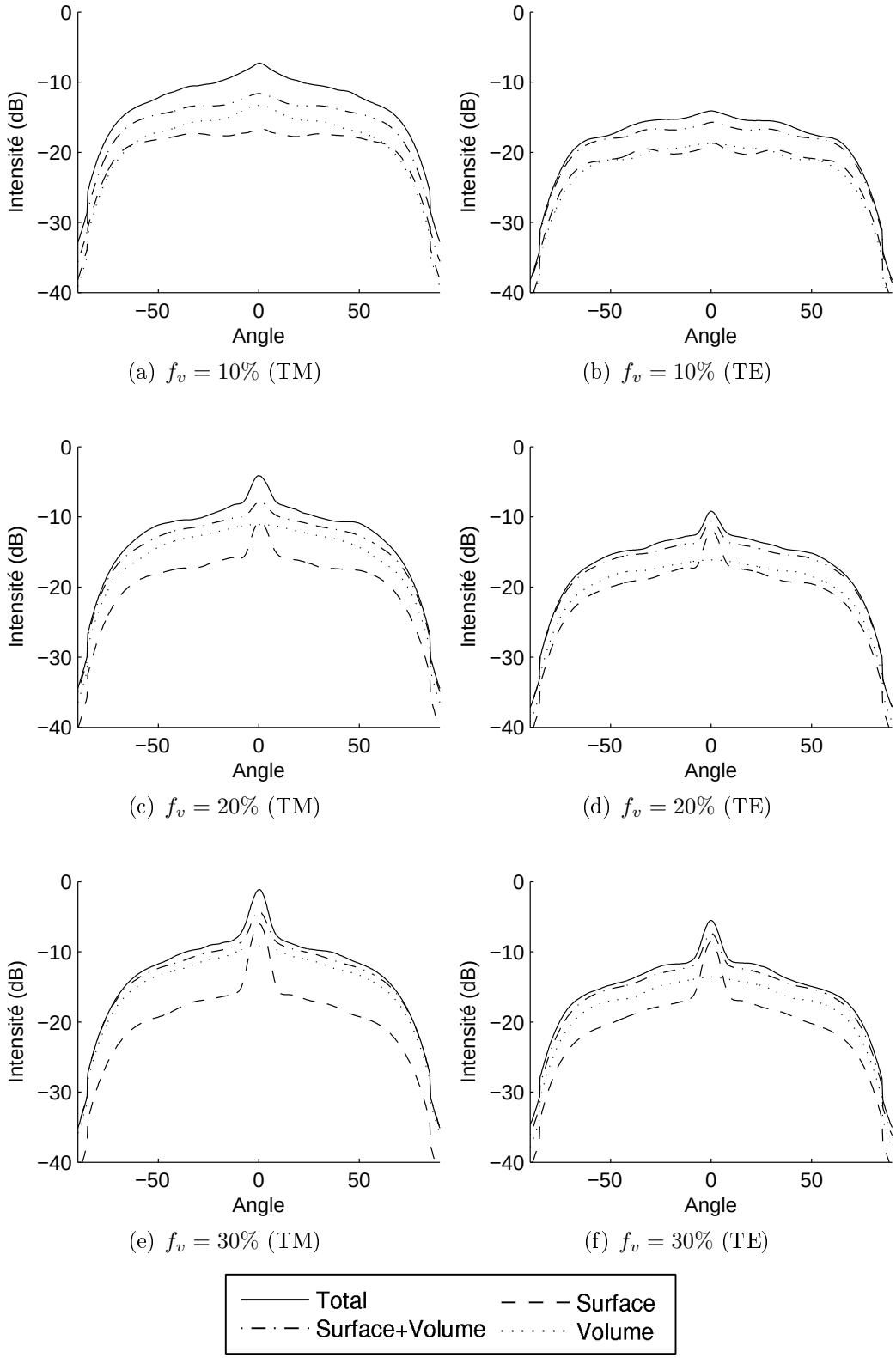


(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.18 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/40$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.02$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE. La surface est corrélée à la position des particules ($l = 5$).

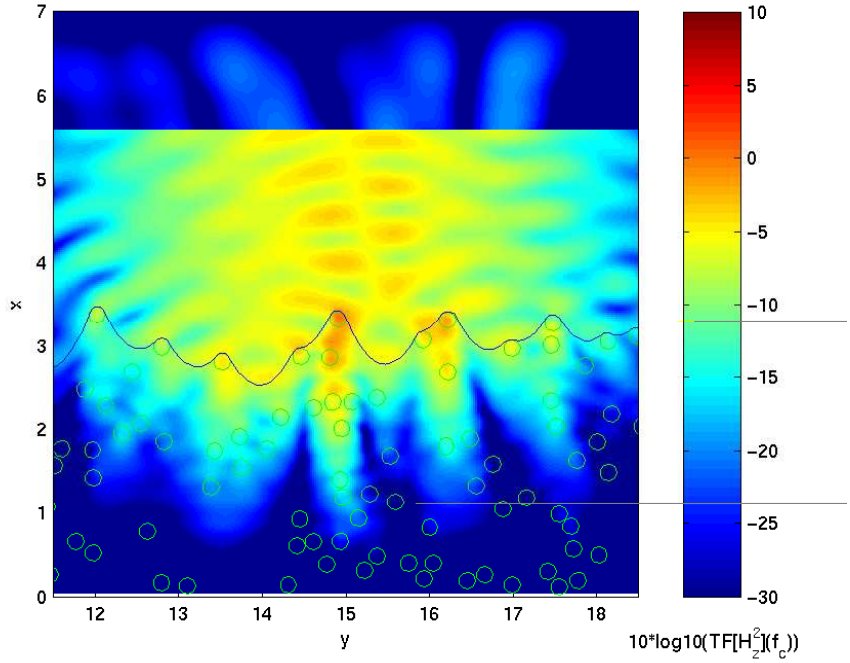


(a) $f_v = 10\%$ (TM) (b) $f_v = 10\%$ (TE)

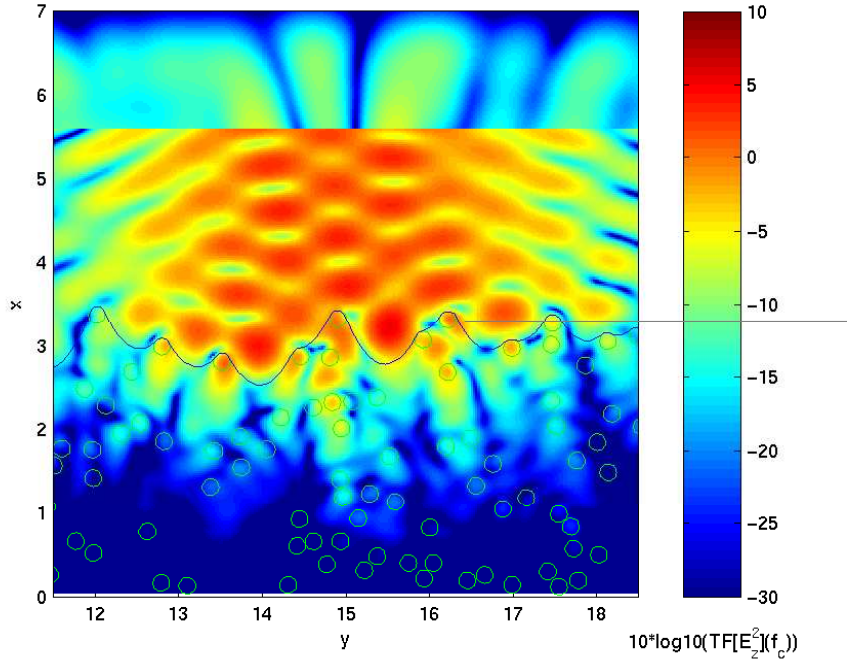
(c) $f_v = 20\%$ (TM) (d) $f_v = 20\%$ (TE)

(e) $f_v = 30\%$ (TM) (f) $f_v = 30\%$ (TE)

FIG. 6.19 – Diagramme de l'intensité diffusée pour des particules de rayon $r = \lambda_0/10$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.02$ pour une fraction volumique de 10%, 20% et 30% en polarisation TM et TE. La surface est corrélée à la positon des particules ($l = 5$).



(a) Polarisation TE



(b) Polarisation TM

FIG. 6.20 – Champ E_z en TM et H_z en TE dans le domaine de calcul pour des particules de rayon $r = \lambda_0/10$ et d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu d'indice $n_h = 1.63 + i0.2$ pour une fraction volumique de 10%. La surface est corrélée à la position des particules ($l = 5$). Les particules sont entourées d'un trait vert et la surface est représentée par un trait bleu.

Dans une seconde partie, nous avons utilisé des particules d'indice $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice $n_h = 1.63 + ik$ où k est le niveau des pertes. Ce cas correspond aux calculs d'indice effectif calculés dans le chapitre 5. Les résultats sur la précision de l'hypothèse de découplage sont présentés dans le tableau suivant :

Différences (dB) ($\mp$.5 dB)		$r_i = \lambda_0/40$				$r_i = \lambda_0/10$			
		$k = 0.02$		$k = 0.2$		$k = 0.02$		$k = 0.2$	
Surface	f_v	TM	TE	TM	TE	TM	TE	TM	TE
Gaussienne	$f_v = 10\%$	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	.5	.5	$\approx$0	$\approx$0
($ks = 0.6$,	$f_v = 20\%$	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	1	1	1	0.5
$kL = 2\pi$)	$f_v = 30\%$	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	3	1.5	1.5	1
Corrélée ($l = 5$)	$f_v = 10\%$	1	1	$\approx$0	$\approx$0	4	2	6.5	2
	$f_v = 20\%$	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	3	1	5	1.5
	$f_v = 30\%$	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	$\approx$0	1.5	1	3	1.5

On peut donc toujours découpler les contributions de la surface et du volume lorsque les particules sont petites devant la longueur d'onde $r_i < \lambda_0/30$ sauf lorsque la surface est de fonction d'auto-corrélation exponentielle. Pour des particules plus grosses, la précision de cette hypothèse décroît rapidement lorsque la fraction volumique augmente ($f_v < 10\%$). Sur l'ensemble des résultats que nous avons obtenus, elle ne donne des résultats corrects que pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne.

6.8 Conclusion

A titre de validation, nous avons traité un milieu hétérogène rugueux par la FDTD et nous avons comparé avec succès les résultats obtenus avec une MoM hybride. Puis, nous avons testé l'hypothèse de découplage proposée par Sentenac *et al* sur des milieux plus rugueux dans le cas de surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne. Nous avons vu que cette hypothèse permettait de reproduire le comportement du champ total diffusé par la surface et le volume. Lorsque nous avons utilisé des surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle, nous avons vu que la somme des deux contributions sous-estimait la diffusion. Nous avons attribué ce comportement principalement aux interactions fortes entre les petites rugosités et les particules.

Ensuite, nous avons fait varier la fraction volumique et la taille des particules pour deux niveaux de pertes (fortes et faibles). Nous avons vu que l'hypothèse de découplage permettait de représenter avec précision le champ total diffusé pour les particules de petite taille devant la longueur d'onde. Mais, nous avons remarqué des différences significatives lorsque la taille des particules et la fraction volumique augmentent.

Afin de mieux comprendre ce phénomène, nous avons augmenté la différence d'indice optique entre les particules et le milieu hôte. L'utilisation de l'indice optique effectif pour la

propagation du cohérent donne, dans ce cas, des résultats médiocres alors que l'utilisation de l'indice optique du milieu hôte permet de retrouver le champ total diffusé par la surface et le volume. Ainsi, nous avons vu que l'indice optique effectif pour représenter le couplage entre la surface et le volume n'est pas le plus adapté dans tous les cas traités.

Puis, nous avons utilisé des surfaces dont la rugosité est liée à la position des particules. Dans ce cas, les diffusions volumique et surfacique incohérente sont isotropes. Nous avons vu que la précision de l'hypothèse de découplage n'était pas liée au niveau respectif de chaque contribution mais était, dans ce cas, liée à la taille des particules combinée à la rugosité de la surface (élasticité). De plus, dans cette géométrie et contrairement au cas précédent, l'hypothèse de découplage sous-estime la diffusion totale. Ces calculs confirment la complexité du phénomène étudié.

Finalement, au vu des expériences numériques menées ici, on remarque que nous avons toujours pu découpler précisément le problème pour des petites particules sous une surface de fonction d'auto-corrélation gaussienne quelle que soit la taille des rugosités et le niveau des pertes dans le matériau. Lorsque nous avons utilisé une surface d'auto-corrélation exponentielle, cette hypothèse n'était plus aussi précise. L'utilisation de particules plus grosses, de rayon $\lambda_0/10$, a conduit à des erreurs sensibles sur cette hypothèse lorsque nous avons utilisé des fractions volumiques supérieures à 10% pour des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne. La précision des résultats a été améliorée en utilisant un autre indice effectif pour représenter les particules. Pour les surfaces corrélées à la position des particules, nous avons obtenu des différences significatives qui ne peuvent être corrigées par un indice effectif. Il apparaît donc que l'on ne peut pas considérer dans tous les cas que l'interaction entre les particules et la surface puisse être uniquement représentée par une surface de même caractéristiques statistiques avec un indice effectif lorsque l'interaction devient complexe.

Ces résultats originaux montrent le bien fondé de l'utilisation d'une méthode numérique telle que celle développée ici pour traiter ces problèmes lorsque la surface est d'un type particulier ou que les particules sont de taille relativement importante.

Conclusion

Dans ce manuscrit, nous avons présenté une étude numérique de l'interaction de la lumière avec un milieu hétérogène rugueux. Compte tenu de la complexité de ce problème, la première partie de ce manuscrit présente le développement d'une méthode originale d'étude. La seconde partie est dédiée aux applications que nous avons étudiées.

Dans le premier et le deuxième chapitre, nous avons décrit l'objet de notre étude. Nous avons introduit la BRDF et la géométrie des matériaux modélisés. Puis nous avons étudié une implémentation de la FDTD adaptée à ce problème. Il s'agit d'une méthode numérique qui nous permet de pouvoir traiter n'importe quelle géométrie et matériau au prix de ressources informatiques importantes. Nous avons présenté les différents éléments constitutifs de notre algorithme FDTD bidimensionnel pour l'étude de milieux semi-infinis comme l'implémentation du faisceau gaussien et le calcul du champ lointain. Puis, nous avons validé notre approche en étudiant la diffusion en espace libre et en champ lointain de cylindres homogènes et en comparant ces résultats avec le modèle analytique exact de Rayleigh. Nous avons ensuite testé l'hypothèse de diffusion dépendante/diffusion indépendante sur un cas simple.

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté le générateur de milieu aléatoire. Nous avons décrit la création d'une surface aléatoire de distribution des hauteurs gaussienne à partir de sa fonction d'auto-corrélation. Cet algorithme a été appliqué à des surfaces de fonction d'auto-corrélation gaussienne et exponentielle. Ces résultats ont été utilisés pour étudier l'effet de la discrétisation et nous avons notamment vu que nous ne pouvions représenter exactement les variations d'une surface de fonction d'auto-corrélation exponentielle. En effet, de nouvelles échelles de rugosité apparaissent à mesure que nous raffinons le pas de maillage. Nous avons ensuite décrit notre algorithme de génération des positions des particules. Pour cela, nous nous sommes basés sur l'algorithme de Metropolis et le modèle des sphères dures. Nous avons montré son extension à des modèles physiques plus complexes (attraction en $1/r^2$). Puis nous avons présenté le calcul numérique de la fonction de corrélation de paires en géométrie bidimensionnelle et tridimensionnelle. Nous avons validé cette approche en comparant ses résultats avec le modèle analytique de Percus-Yevick en géométrie tridimensionnelle. Nous avons finalement présenté l'algorithme utilisé pour générer des surfaces corrélées à la position des particules pour être à même d'étudier des géométries sortant des représentations habituellement utilisées.

Au chapitre 4, nous avons étudié la diffusion par des surfaces rugueuses de fonction d'auto-corrélation gaussienne ou exponentielle. Nous avons comparé nos résultats avec une autre méthode numérique : la méthode des moments. Notre méthode et la méthode des moments donnent des résultats identiques lorsque les surfaces ont une fonction d'auto-corrélation gaussienne. Pour les surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle, nous avons vu que pour des $ks \leq 1.5$ et $kl = 2\pi$ les deux méthodes donnaient des résultats identiques mais que des différences significatives apparaissaient au delà. Nous avons attribué celles-ci aux traitements effectués lors de la discrétisation de la surface. Ces comparaisons sont les premières effectuées sur ce type de surface.

Ensuite, dans le cinquième chapitre, nous avons présenté une méthode originale de détermination d'un indice effectif pour la propagation de l'énergie cohérente basée sur la FDTD. C'est une méthode simple et robuste car elle est directement liée à l'observation directe des champs dans le milieu hétérogène. Nous l'avons utilisée pour tester la validité de deux lois de mélange : Maxwell-Garnett et Bruggeman et de deux modèles perturbatifs : les modèles de Keller et de Foldy-Twersky. Nous avons remarqué un comportement différent suivant la polarisation. En effet, en polarisation TM le modèle de Keller est correct sur toutes les fractions volumiques et pour des différences d'indice optique inférieures à 1. Le modèle de Foldy-Twersky est limité à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. Les lois de mélanges donnent un bon ordre de grandeur. En polarisation TE, le modèle de Keller ne peut pas s'appliquer car la diffusion par les particules n'est pas isotrope. Le Foldy-Twersky reste correct jusqu'à des fractions volumiques de l'ordre de 10%. La loi de Maxwell-Garnett donne de meilleurs résultats lorsque la diffusion incohérente est faible. Nous avons ensuite utilisé cet ensemble de résultats pour étudier la diffusion en champ lointain par un ensemble bidisperse de particules et notamment savoir si nous pouvions remplacer les petites particules par le milieu homogénéisé décrit précédemment. Nous avons pour déterminer dans quels cas cette décomposition est possible.

Enfin, dans le sixième chapitre, nous avons étudié le problème du couplage surface/volume. Nous avons testé une hypothèse de découplage basée sur l'indice effectif pour représenter les petites particules dans l'estimation de la diffusion surfacique. Nous avons vu que cette approximation dépendait de nombreux paramètres et que l'indice effectif choisi ne permettait pas de représenter le couplage entre la surface et les particules lorsque celui-ci devenait trop fort (grosses particules, surfaces de fonction d'auto-corrélation exponentielle ou corrélées à la position des particules).

Pour conclure, nous avons présenté une méthode numérique originale adaptée à l'étude de matériaux hétérogènes rugueux. Il s'agit de la première fois que l'on dispose d'une méthode aussi complète pour une étude de ce type. En effet, elle peut traiter sans approximation toutes les géométries et matériaux (diélectriques, absorbants, parfaitement conducteur).

Ainsi, cette méthode basée sur la FDTD peut servir pour calculer directement la diffusion par un milieu homogène rugueux, hétérogène ou hétérogène rugueux. Nous pouvons, de plus, déterminer l'extinction d'un milieu hétérogène. Cette méthode peut donc couvrir deux domaines d'application. Tout d'abord, elle permet d'obtenir des résultats de référence. Elle permet, dès lors, de déterminer le domaine de validité de méthodes approchées ou d'hypothèses simplificatrices. Par exemple, dans ce manuscrit, nous avons pu étudier le domaine de validité du modèle de Keller ou de Foldy-Twersky dans des domaines de taille et de fraction volumique nouveaux par rapport à la littérature existante. Cette méthode peut aussi être utilisée en tant que telle lorsque les méthodes approchées ne s'appliquent pas. Nous pouvons alors étudier des géométries complexes comme lorsque la rugosité des surfaces est liée à la présence des particules ou calculer des matrices de phase d'agrégat pour le transfert radiatif.

Nous disposons maintenant d'un outil performant qui peut être utilisé dans de nouvelles études. Nous pourrons ainsi étudier le comportement de la diffusion ou de la propagation par des milieux polydisperses et polymatériaux. En effet, de nombreux effets de couplage entres les différents éléments devraient apparaître. Leur prise en compte est complexe dans les modèles approchés et leur validité mal déterminée. L'utilisation d'une méthode de référence permettra ainsi de connaître leur domaine d'application et de pouvoir les utiliser extensivement pour des études systématiques.

Finalement, nous avons choisi, dans le cadre de cette thèse, d'utiliser une géométrie bidimensionnelle pour l'étude de matériaux hétérogènes rugueux. Ce choix nous a permis d'étudier des phénomènes physiques et les interpréter avec un temps de calcul raisonnable. Ainsi, nous avons pu développer des méthodes d'étude originales à notre connaissance qui pourront être utilisées lorsque l'ensemble de la chaîne de modélisation utilisera une géométrie tridimensionnelle. En effet, c'est après ce passage que l'on pourra accéder aux comparaisons expérimentales et effectuer des validations dans des cas réalistes.

Annexes

Annexe A

Diffusion par un cylindre cylindrique éclairé en incidence normale en milieu absorbant

A.1 Géométrie du problème

Nous considérons un cylindre homogène infini de rayon a et d'indice optique n_i dans un milieu d'indice n_h éclairé sous incidence normale. L'axe z est la direction d'invariance et l'onde se propage suivant l'axe x. La géométrie du calcul est présentée Figure A.1 en polarisation TM.

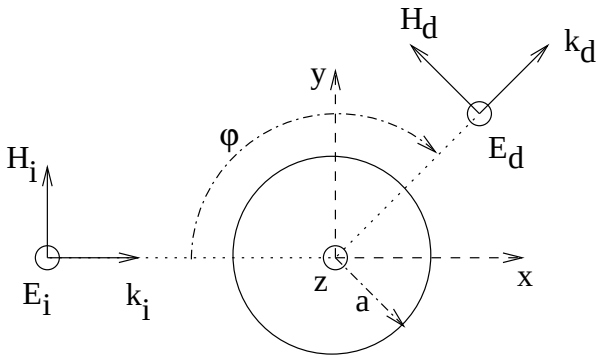


FIG. A.1 – Géométrie pour le calcul de la diffusion par un cylindre cylindrique éclairé en incidence normale. a est le rayon du cylindre, (E_i, H_i) l'onde incidente de vecteur d'onde k_i, (E_d, H_d) l'onde diffusée de vecteur d'onde k_r.

L'onde incidente (E_i, H_i) arrive d'une direction $\varphi = 0^o$ et une amplitude du champ électrique incident E_0. Le point d'observation P est situé à une distance r du centre de la particule. La base des coordonnées cylindriques est notée $(\vec{e_r}, \vec{e_\varphi}, \vec{e_z})$.

Nous allons chercher à exprimer la matrice de diffusion S pour une particule cylindrique en milieu absorbant dans les deux polarisations. Puis nous exprimerons les valeurs de

l'efficacité d'absorption de diffusion et d'extinction. Ces résultats seront utilisés pour valider l'algorithme FDTD en champ lointain et pour le modèle de Foldy-Twersky ou de Keller.

A.2 Résolution analytique

A.2.1 Matrice de diffusion

A.2.1.1 Solution générale

Ce problème a été résolu dans le livre de Bohren et Huffman [8] et dans l'article de Sun *et al* [121]. Nous allons en reprendre ici les principales étapes. Dans leur étude, ils développent le champ incident, diffusé et interne en harmoniques cylindriques vectorielles. En polarisation TM, cela donne :

$$\vec{E}_i = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n \vec{N}_n^{(1)} \tag{A.1}$$

$$\vec{H}_i = -\frac{ik}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n \vec{M}_n^{(1)} \tag{A.2}$$

$$\vec{E}_d = -\sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n b_n \vec{N}_n^{(3)} \tag{A.3}$$

$$\vec{H}_d = \frac{ik}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n b_n \vec{M}_n^{(3)} \tag{A.4}$$

où

$$E_n = (-i)^n \frac{E_0}{k} \tag{A.5}$$

avec $k = 2\pi n_h/\lambda_0$, λ_0 la longueur d'onde dans le vide, μ la perméabilité du milieu et ω la pulsation de l'onde incidente. Les harmoniques cylindriques $\vec{M}_n$ et $\vec{N}_n$ sont données par :

$$\vec{M}_n = k\exp(in\theta)\left[in\frac{z_n(\rho)}{\rho}\vec{e}_r - z_n'(\rho)\vec{e}_\varphi\right] \tag{A.6}$$

$$\vec{N}_n = k\exp(in\theta)z_n(\rho)\vec{e}_z \tag{A.7}$$

où $\rho = kr$, z_n représente une fonction de Bessel et le ' représente la dérivation. L'exposant (1) des fonctions $\vec{M}_n$ et $\vec{N}_n$ désigne z_n comme la fonction de Bessel du premier ordre J_n et l'exposant (3) comme la fonction de Hankel $H_n^{(1)}$.

Le coefficient de diffusion b_n est alors obtenu à partir des équations (A.1) à (A.4) et

des équations de continuité à l'interface entre le cylindre et le milieu :

$$b_n = \frac{n_h J_n(n_i\alpha)J'_n(n_h\alpha) - n_i J'_n(n_i\alpha)J_n(n_h\alpha)}{n_h J_n(n_i\alpha)H_n^{(1)}(n_h\alpha) - n_i J'_n(n_i\alpha)H_n^{(1)'}(n_h\alpha)} \tag{A.8}$$

où $\alpha = 2\pi a/\lambda_0$. Comme on a, de plus :

$$J_{-n} = (-1)^n J_n \tag{A.9}$$
$$H_{-n} = (-1)^n H_n \tag{A.10}$$

On a donc :

$$b_{-n} = b_n \tag{A.11}$$

On trouve des solutions similaires en polarisation TE :

$$\vec{E}_i = -i\sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n \vec{M}_n^{(1)} \tag{A.12}$$
$$\vec{H}_i = -\frac{ik}{\omega\mu}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n \vec{N}_n^{(1)} \tag{A.13}$$
$$\vec{E}_d = i\sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n a_n \vec{M}_n^{(3)} \tag{A.14}$$
$$\vec{H}_d = \frac{ik}{\omega\mu}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_n a_n \vec{N}_n^{(3)} \tag{A.15}$$

Le coefficient de diffusion a_n est alors :

$$a_n = \frac{n_i J_n(n_i\alpha)J'_n(n_h\alpha) - n_h J'_n(n_i\alpha)J_n(n_h\alpha)}{n_i J_n(n_i\alpha)H_n^{(1)'}(n_h\alpha) - n_h J'_n(n_i\alpha)H_n^{(1)}(n_h\alpha)} \tag{A.16}$$

Et, de la même façon :

$$a_{-n} = a_n \tag{A.17}$$

.

Les éléments de la matrice de phase S sont, en utilisant une approximation de champ lointain, en polarisation TM :

$$S(\theta) = b_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} b_n cos(n\theta) \tag{A.18}$$

Et en polarisation TE :

$$S(\theta) = a_0 + 2\sum_{n=1}^{\infty} a_n cos(n\theta) \tag{A.19}$$

avec $\theta = \pi - \varphi$.

A.2.1.2 Approximation des petits cylindres

Lorsque le cylindre est de taille très petite devant la longueur d'onde, seul le terme d'ordre 0 intervient en polarisation TM [70]. On a donc :

$$S(\theta) \approx b_0 \tag{A.20}$$
$$\approx i\frac{\pi\alpha^2}{4} n_h^2 (n_i^2 - n_h^2) \tag{A.21}$$

Et en polarisation TE en présence de pertes, ce sont les termes a_1 et a_{-1} qui sont prépondérants :

$$S(\theta) \approx 2a_1 \tag{A.22}$$
$$\approx i\frac{\pi\alpha^2}{4}\frac{(n_i^2 - n_h^2)}{(n_i^2 + n_h^2)} \tag{A.23}$$

A.2.2 Extinction, diffusion et absorption

En polarisation TM, l'énergie diffusée W_d par unité de longueur du cylindre est :

$$W_d = \frac{1}{2}\Re e\left[\int_0^{2\pi} (\vec{E}_d \times \vec{H}_{d*})_r a d\varphi\right] \tag{A.24}$$
$$= -2aI_0\Im m\left\{\pi\left(1 - i\frac{\Im m(n_h)}{\Re e(n_h)}\right)\left[b_0 b_0^* H_0^{(1)}(n_h\alpha)H_0^{(1)'*}(n_h\alpha)\right.\right.$$
$$\left.\left. +2\sum_{n=1}^{+\infty} b_n b_n^* H_n^{(1)}(n_h\alpha)H_n^{(1)'*}(n_h\alpha)\right]\right\} \tag{A.25}$$

et l'énergie atténuée W_e par unité de longueur du cylindre est :

$$W_e = \frac{1}{2}\Re e\left[\int_0^{2\pi}(\vec{E}_i\times\vec{H}_i*+\vec{E}_i\times\vec{H}_d*+\vec{E}_d\times\vec{H}_i*)_r ad\varphi\right] \quad (A.26)$$

$$\begin{aligned} &= -2aI_0\Im m\left\{\pi\left(1-i\frac{\Im m(n_h)}{\Re e(n_h)}\right)\left[J_0(n_h\alpha)J_0^{'*}(n_h\alpha)\right.\right.\\ &-b_0^*J_0(n_h\alpha)H_0^{(1)'*}(n_h\alpha)-b_0J_0^{'*}(n_h\alpha)H_0^{(1)}(n_h\alpha)\\ &+2\sum_{n=1}^{+\infty}\left(J_n(n_h\alpha)J_n^{'*}(n_h\alpha)-b_n^*J_n(n_h\alpha)H_n^{(1)'*}(n_h\alpha)\right.\\ &\left.\left.\left.-b_nJ_n^{'*}(n_h\alpha)H_n^{(1)}(n_h\alpha)\right)\right]\right\} \end{aligned} \quad (A.27)$$

où $I_0 = 1/2(\Re e(n_h)/c\mu)\left|E_0\right|^2$ et c est la vitesse de la lumière. L'indice r dans les équations (A.24) et (A.26) signifie la composante radiale du vecteur.

On trouve des expressions similaires en polarisation TE. L'énergie diffusée W_d par unité de longueur du cylindre est donnée par :

$$W_d = \frac{1}{2}\Re e\left[\int_0^{2\pi}(\vec{E}_d\times\vec{H}_d*)_r ad\varphi\right] \quad (A.28)$$

$$\begin{aligned} &= -2aI_0\Im m\left\{\pi\left(1-i\frac{\Im m(n_h)}{\Re e(n_h)}\right)\left[a_0a_0^*H_0^{(1)'}(n_h\alpha)H_0^{(1)*}(n_h\alpha)\right.\right.\\ &\left.\left.+2\sum_{n=1}^{+\infty}a_na_n^*H_n^{(1)'}(n_h\alpha)H_n^{(1)*}(n_h\alpha)\right]\right\} \end{aligned} \quad (A.29)$$

et l'énergie atténuée W_e par unité de longueur du cylindre est :

$$W_e = \frac{1}{2}\Re e\left[\int_0^{2\pi}(\vec{E}_i\times\vec{H}_i*+\vec{E}_i\times\vec{H}_d*+\vec{E}_d\times\vec{H}_i*)_r ad\varphi\right] \quad (A.30)$$

$$\begin{aligned} &= -2aI_0\Im m\left\{\pi\left(1-i\frac{\Im m(n_h)}{\Re e(n_h)}\right)[J_0'(n_h\alpha)J_0*(n_h\alpha)\right.\\ &-b_0^*J_0'(n_h\alpha)H_0^{(1)*}(n_h\alpha)-b_0J_0^*(n_h\alpha)H_0^{(1)'}(n_h\alpha)\\ &+2\sum_{n=1}^{+\infty}\left(J_n'(n_h\alpha)J_n^*(n_h\alpha)-b_n^*J_n'(n_h\alpha)H_n^{(1)*}(n_h\alpha)\right.\\ &\left.\left.\left.-b_nJ_n^*(n_h\alpha)H_n^{(1)'}(n_h\alpha)\right)\right]\right\} \end{aligned} \quad (A.31)$$

Le taux d'énergie sur une unité de longueur du cylindre peut être évalué par :

$$f = 2aI_0\int_0^{\pi/2}\exp(2\Im m(n_h)\alpha cos\psi)cos\psi d\psi \quad (A.32)$$

On peut alors définir l'efficacité d'extinction, de diffusion et d'absorption par :

$$Q_e = \frac{W_e}{f} \tag{A.33}$$

$$Q_d = \frac{W_d}{f} \tag{A.34}$$

$$Q_a = \frac{W_e - W_d}{f} \tag{A.35}$$

Annexe B

Lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman en géométrie bidimensionnelle

B.1 Théorie

Afin d'obtenir les lois de Maxwell-Garnett et de Bruggeman, Nicklasson définit le milieu effectif comme un milieu dans lequel un échantillon du milieu hétérogène serait invisible, c'est à dire avec une extinction nulle. Pour faire ce calcul, il se base sur des géométries équivalentes au problème précédent (Figure B.1). Il montre tout d'abord que le premier cas (a), représentant la géométrie utilisée dans le formalisme de Maxwell-Garnett, peut être représenté par deux sphères concentriques. La sphère intérieure de rayon r a un indice n_A et la sphère extérieure de rayon R a un indice n_B. Le rapport entre le volume des deux sphères vaut la fraction volumique f_v du milieu hétérogène. C'est-à-dire que l'on a, en géométrie tridimensionnelle :

$$f_v = \left(\frac{r}{R}\right)^3 \tag{B.1}$$

Le rôle des deux composantes du milieu n'est donc pas symétrique. Niklasson propose une autre géométrie équivalente pour le formalisme de Bruggeman. Il considère une sphère d'indice n_A avec une probabilité f_v et n_B avec une probabilité $1 - f_v$. Dans ce cas, le comportement des deux matériaux est bien symétrique.

Dans notre géométrie, la sphère est remplacée par un cylindre. Nous présenterons, ici, les calculs en géométrie bidimensionnelle. Ainsi, le formalisme de Bruggeman repose sur un cylindre d'indice n_A avec une probabilité f_v et d'indice n_B avec une probabilité $(1 - f_v)$. Le formalisme de Maxwell-Garnett utilise deux cylindres concentriques de rayon r et R dont le rapport des surfaces vaut la fraction volumique :

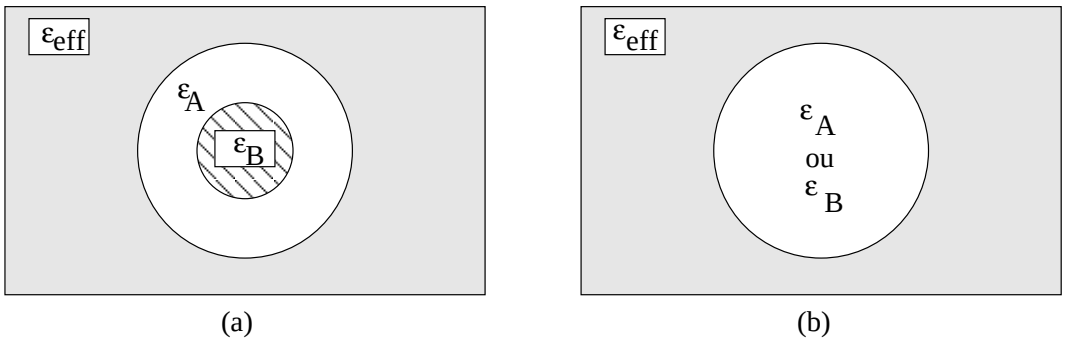


FIG. B.1 – Géométries équivalentes pour la loi de mélange de Maxwell-Garnett comportant deux composants A (hachuré) et B (blanc) (a) et pour la loi de mélange de Bruggeman comportant un composant (en blanc) pouvant être A ou B (b)

$$f_v = \left(\frac{r}{R}\right)^2 \tag{B.2}$$

Notre définition du milieu effectif suppose que le milieu hétérogène plongé dans le milieu effectif ne doit pas être détectable aux longueurs d'ondes utilisées. En d'autres termes, l'extinction du milieu hétérogène doit être la même que si elle est remplacé par le milieu homogénéisé. Nous allons pour cela utiliser une généralisation du théorème optique pour un milieu absorbant [21]. Ce théorème relie l'extinction C_{ext} à l'intensité diffusée vers l'avant $S(0)$ par une petite particule par :

$$C_{ext} = 4\Re e\left(\frac{S(0)}{k_{eff}}\right) \tag{B.3}$$

où k_{eff} représente le vecteur d'onde dans le milieu effectif, soit :

$$k_{eff} = \frac{2\pi n_{eff}}{\lambda_0} \tag{B.4}$$

A partir de cette définition, on a $C_{ext} = 0$ si :

$$S_k(0) = 0 \tag{B.5}$$

Nous commençons par le formalisme de Bruggeman. Nous avons vu que, dans ce cas, le problème peut être assimilé à la diffusion d'un cylindre d'indice optique n_A ou n_B dans un milieu d'indice inconnu n_{eff}. En appelant n l'indice n_A ou n_B, l'intensité diffusée vers l'avant dans le cas d'un petit cylindre de rayon r s'écrit [70], en polarisation TM :

$$S^{TM}(0) = -i\frac{\pi\alpha^2}{4}\frac{1}{n_{eff}^2}(n^2 - n_{eff}^2) + o(\alpha^4) \tag{B.6}$$

où $\alpha = k_{eff}r$. On utilise alors l'équation (B.5) et les probabilités introduites par Nicklasson :

$$f_v S(0)|_{n=n_A} + (1 - f_v) S(0)|_{n=n_B} = 0 \tag{B.7}$$

La loi de mélange de Bruggeman en polarisation TM est alors, en remplaçant $S(0)$ par sa valeur :

$$f(n_A^2 - n_{eff}^2) + (1 - f)(n_B^2 - n_{eff}^2) = 0 \tag{B.8}$$

Nous faisons le même calcul en polarisation TE. La diffusion vers l'avant dans le cas des petits cylindres s'écrit [70] alors :

$$S^{TE}(0) = -i\frac{\pi\alpha^2}{2}\left(\frac{n^2 - n_{eff}}{n^2 + n_{eff}}\right) + o(\alpha^4) \tag{B.9}$$

La loi de mélange de Bruggeman en polarisation TE s'écrit donc :

$$f_v\left(\frac{n_A^2 - n_{eff}^2}{n_A^2 + n_{eff}^2}\right) + (1 - f_v)\left(\frac{n_B^2 - n_{eff}^2}{n_B^2 + n_{eff}^2}\right) = 0 \tag{B.10}$$

Les équations (B.8) et (B.10) sont symétriques. En géométrie bidimensionnelle, on trouve deux équations d'homogénéisation suivant la polarisation.

La loi de mélange de Maxwell-Garnett est un peu plus complexe à déterminer. En effet, il nous faut obtenir la diffusion vers l'avant de petit cylindres concentriques. Kerker a effectué ce calcul pour des cylindres de taille quelconque [71]. Nous allons partir de ces résultats pour obtenir la loi de Maxwell-Garnett. Kerker montre que les coefficients a_n et b_n intervenant dans le calcul de S_k. s'écrivent sous la forme des déterminants suivants :

$$a_n = \frac{\begin{vmatrix} n_A J_n(n_A t\alpha) & n_B H_n(n_B t\alpha) & n_B J_n(n_B t\alpha) & 0 \\ J_n'(n_A t\alpha) & H_n'(n_B\alpha) & J_n(n_B\alpha) & 0 \\ 0 & n_B H_n(n_B\alpha) & n_B J_n(n_B\alpha) & n_{eff} J_n(n_{eff}\alpha) \\ 0 & H_n'(n_B\alpha) & J_n'(n_B\alpha) & J_n'(n_{eff}\alpha) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n_A H_n(n_A t\alpha) & n_B H_n(n_B t\alpha) & n_B J_n(n_B t\alpha) & 0 \\ H_n'(n_A t\alpha) & H_n'(n_B\alpha) & J_n(n_B\alpha) & 0 \\ 0 & n_B H_n(n_B\alpha) & n_B J_n(n_B\alpha) & n_{eff} J_n(n_{eff}\alpha) \\ 0 & H_n'(n_B\alpha) & J_n'(n_B\alpha) & J_n'(n_{eff}\alpha) \end{vmatrix}} \tag{B.11}$$

$$b_n = \frac{\begin{vmatrix} J_n(n_A t\alpha) & H_n(n_B t\alpha) & J_n(n_B t\alpha) & 0 \\ n_A J'_n(n_A t\alpha) & n_B H'_n(n_B \alpha) & n_B J_n(n_B \alpha) & 0 \\ 0 & H_n(n_B \alpha) & J_n(n_B \alpha) & J_n(n_{eff}\alpha) \\ 0 & n_B H'_n(n_B \alpha) & n_B J'_n(n_B \alpha) & n_{eff} J'_n(n_{eff}\alpha) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} H_n(n_A t\alpha) & H_n(n_A t\alpha) & J_n(n_A t\alpha) & 0 \\ n_A H'_n(n_A t\alpha) & n_B H'_n(n_B \alpha) & n_A J_n(n_B \alpha) & 0 \\ 0 & H_n(n_B \alpha) & J_n(n_B \alpha) & J_n(n_{eff}\alpha) \\ 0 & n_B H'_n(n_B \alpha) & n_B J'_n(n_B \alpha) & n_{eff} J'_n(n_{eff}\alpha) \end{vmatrix}} \tag{B.12}$$

où $\alpha = k_{eff}R$ avec R rayon du cylindre extérieur et t le rapport entre le rayon des deux cylindres. Dans le cas de petits cylindres concentriques, les termes b_0 et a_1 du développement en harmoniques cylindriques de la matrice de diffusion présenté en annexe A sont en α^2 et les termes a_0 et b_1 en α^4. On a donc en polarisation TM [70] :

$$S_k^{TM}(0) \approx b_0 \tag{B.13}$$

et en polarisation TE :

$$S_k^{TE}(0) \approx 2a_1 \tag{B.14}$$

Il s'agit maintenant de faire les développements limités en 0 de a_0 et de b_1 et de déterminer le premier terme non nul. Grâce à un logiciel de calcul formel (Maple) et les formules itératives disponibles dans le Radar Cross Section, on trouve :

$$b_0 = i\frac{\pi\alpha^2}{4}\frac{1}{n_{eff}^2}(n_B^2 - n_{eff}^2 + (n_B^2 - n_A^2)t^2) + o(\alpha^4) \tag{B.15}$$

$$a_1 = -i\frac{\pi\alpha^2}{4}\frac{(n_B^4 - n_{eff}^2 n_B^2 + n_B^2 n_A^2 - n_A^2 n_{eff}^2 + t^2(n_A^2 n_B^2 - n_A^4 - n_A^2 n_{eff}^2))}{(-n_B^4 + n_{eff}^2 n_B^2 + n_B^2 n_A^2 - n_A^2 n_{eff}^2 + t^2(n_A^2 n_B^2 + n_A^4 + n_A^2 n_{eff}^2))} + o(\alpha^4) \tag{B.16}$$

Par conséquent, pour la polarisation TM, l'équation (B.5) devient :

$$n_B^2 - n_{eff}^2 + (n_B^2 - n_A^2)t^2 = 0 \tag{B.17}$$

On a par définition du problème équivalent en géométrie bidimensionnelle (équation (B.2)) :

$$f_v = t^2 \tag{B.18}$$

On trouve alors l'expression finale de Maxwell-Garnett en polarisation TM :

$$n_{eff}^2 = n_B^2 + f_v(n_B^2 - n_A^2) \tag{B.19}$$

En polarisation TE, à partir de l'équation (B.16), on trouve de la même manière :

$$n_B^4 - n_{eff}^2 n_B^2 + n_B^2 n_A^2 - n_A^2 n_{eff}^2 + t^2(n_A^2 n_B^2 - n_A^4 - n_A^2 n_{eff}^2) = 0 \tag{B.20}$$

Soit :

$$n_{eff}^2 = \frac{n_B^2(n_A^2 + n_B^2 + t^2(n_A^2 - n_B^2))}{n_A^2 + n_B^2 - t^2(n_A^2 - n_B^2)} \tag{B.21}$$

Ou encore, finalement :

$$n_{eff}^2 = n_B^2 + 2f_v n_B^2 \frac{n_A^2 - n_B^2}{n_A^2 + n_B^2 - f_v(n_A^2 - n_B^2)} \tag{B.22}$$

Cette équation n'est plus symétrique, et on ne trouve plus le même indice effectif suivant que les inclusions sont le milieu A ou le milieu B.

B.2 Résultats

Nous avons déterminé les lois de mélange en appliquant la démarche proposée par Nicklasson dans le cas bidimensionnel. Nous sommes arrivés aux lois de mélange suivantes :

	TE	TM
Maxwell-Garnett	$n_{eff}^2 = n_B^2 + 2f_v n_B^2 \frac{n_A^2 - n_B^2}{n_A^2 + n_B^2 - f_v(n_A^2 - n_B^2)}$	$n_{eff}^2 = n_B^2 + f_v(n_A^2 - n_B^2)$
Bruggeman	$f_v\left(\frac{n_A^2 - n_{eff}^2}{n_A^2 + n_{eff}^2}\right) + (1 - f_v)\left(\frac{n_B^2 - n_{eff}^2}{n_B^2 + n_{eff}^2}\right) = 0$	$n_{eff}^2 = n_B^2 + f_v(n_A^2 - n_B^2)$

Cette étude nous a permis de déterminer les équations des lois de mélange de Maxwell-Garnett et de Bruggeman en géométrie bidimensionnelle. Nous avons ainsi vu que le choix du modèle pour représenter un milieu hétérogène est important. Ainsi, même lorsque les dimensions des hétérogénéités sont très faibles devant la longueur d'onde, la structure du matériau a un rôle significatif dans le milieu homogène équivalent. Les formules en polarisation TE sont identiques à celles présentées dans les travaux de Karkkanen [68]. Nous voyons que les deux polarisations ont un comportement différent pour l'homogénéisation.

Annexe C

Modèle de Keller et de Foldy-Twersky

C.1 Introduction

Les modèles de Foldy-Twersky et de Keller sont des modèles perturbatifs de complexité croissante de détermination de la constante de propagation effective dans un milieu hétérogène. Le modèle de Foldy-Twersky est un modèle du premier ordre et ne prend en compte que l'atténuation due aux diffusions simples. Le modèle de Keller est plus complexe mais permet de prendre ne compte l'influence des diffusions doubles sur le cohérent. Ces modèles ont été développés en géométrie tridimensionnelle. Dans sa thèse, Durant redémontre ces deux approximations et développe leur équivalent en géométrie bidimensionnelle. Nous allons reprendre, dans cette annexe, les principales étapes de son calcul.

C.2 Théorie

L'équation de propagation pour le champ électrique $\vec{E}(\vec{r})$ dans un milieu de permittivité ϵ dépendante d'une variable d'espace $\vec{r}$ peut s'écrire :

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) = i\omega\mu_0\vec{J}_{ext} \tag{C.1}$$

où $\times$ représente le produit vectoriel et $\vec{J}_{ext}$ le courant extérieur créé par le champ incident. On introduit la notion d'hétérogénéité par rapport à un milieu de référence ϵ_{ref}. Il s'agit d'un scalaire indépendant de l'espace. On peut mettre l'équation (C.1) sous la forme :

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_{ref}\vec{E}(\vec{r}) = i\omega\mu_0\vec{J}_{ext} + \frac{\omega^2}{c^2}[\epsilon(\vec{r}) - \epsilon_{ref}]\vec{E}(\vec{r}) \tag{C.2}$$

On définit alors le champ de référence $\vec{E}_{ref}$ tel qu'il satisfasse à l'équation de propagation dans un milieu homogène de permittivité ϵ_{ref} :

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}_{ref}(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_{ref}\vec{E}_{ref}(\vec{r}) = i\omega\mu_0\vec{J}_{ext} \tag{C.3}$$

On définit le champ diffusé $\vec{E}_{sca}$ comme :

$$\vec{E}_{sca} = \vec{E} - \vec{E}_{ref} \tag{C.4}$$

Celui-ci satisfait donc à l'équation suivante :

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E}_{sca}(\vec{r}) - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_{ref}\vec{E}_{sca}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}[\epsilon(\vec{r}) - \epsilon_{ref}]\vec{E}_{sca}(\vec{r}) \tag{C.5}$$

Le tenseur de Green $\overleftrightarrow{G}$ qui correspond au problème de la recherche du champ électrique total dans le milieu hétérogène est :

$$\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}(\vec{r},\vec{r}') - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon(\vec{r})\overleftrightarrow{G}(\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}')\overleftrightarrow{I} \tag{C.6}$$

où $\overleftrightarrow{I}$ est l'opérateur tensoriel unité. Quand $\overleftrightarrow{G}$ est connu, le champ électrique total s'obtient simplement par :

$$\vec{E}(\vec{r}) = i\omega\mu_0 \int \overleftrightarrow{G}(\vec{r},\vec{r}')J_{ext}(\vec{r}')d^3r \tag{C.7}$$

Dans le cas d'un milieu hétérogène, le tenseur de Green est extrêmement complexe et dépend de la position exacte de toutes les particules. On introduit alors le tenseur de Green $\overleftrightarrow{G}_{ref}$ qui dans un milieu homogène de permittivité ϵ_{ref} est solution de l'équation :

$$\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r},\vec{r}') - \frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_{ref}\overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}')\overleftrightarrow{I} \tag{C.8}$$

L'invariance par translation du milieu de référence impose que le tenseur de Green ne dépende que de la distance entre $\vec{r}$ et $\vec{r}'$, on a alors :

$$\overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r},\vec{r}') = \overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r}-\vec{r}') \tag{C.9}$$

Les équations intégrales pour le champ de électrique s'écrivent alors :

$$\vec{E}_{ref}(\vec{r}) = i\omega\mu_0 \int \overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r}-\vec{r}')J_{ext}(\vec{r}')d^3r \tag{C.10}$$

$$\vec{E}_{sca}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}\int \overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r},\vec{r}')[\epsilon(\vec{r}') - \epsilon_{ref}]\vec{E}(\vec{r}')d^3r \tag{C.11}$$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_{ref}(\vec{r}) + \frac{\omega^2}{c^2}\int \overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r},\vec{r}')[\epsilon(\vec{r}') - \epsilon_{ref}]\vec{E}(\vec{r}')d^3r \tag{C.12}$$

On pose alors :

$$\vec{V} : \vec{E}(\vec{r}) \rightarrow \frac{\omega^2}{c^2}[\epsilon(\vec{r}) - \epsilon_{ref}]\vec{E}(\vec{r}) \tag{C.13}$$

Et :

$$\vec{G}_{ref} : \vec{E}(\vec{r}) \rightarrow \int \overleftrightarrow{G}_{ref}(\vec{r}, \vec{r}')\vec{E}(\vec{r}')d^3r \tag{C.14}$$

L'équation intégrale pour le champ électrique peu alors s'écrire sous forme compacte comme :

$$\vec{E} = \vec{E}_{ref} + \vec{G}_{ref}\vec{V}\vec{E} \tag{C.15}$$

On a de même pour la fonction de Green $\vec{G}$:

$$\vec{G} = \vec{G}_{ref} + \vec{G}_{ref}\vec{V}\vec{G} \tag{C.16}$$

ou encore :

$$\vec{G} = \vec{G}_{ref} + \vec{G}_{ref}\vec{L}\vec{G}_{ref} \tag{C.17}$$

avec :

$$\vec{L} = \sum_{n=0}^{+\infty}(\vec{V}\vec{G}_{ref})^n\vec{V} \tag{C.18}$$

Dans l'équation (C.17), les seuls opérateurs à variables aléatoires sont la fonction de Green du système complet $\vec{G}$ et l'opérateur $\vec{L}$. La valeur moyenne de l'équation (C.17) est donc :

$$\left\langle \vec{G} \right\rangle = \vec{G}_{ref} + \vec{G}_{ref} \left\langle \vec{L} \right\rangle \vec{G}_{ref} \tag{C.19}$$

En utilisant l'opérateur de masse $\vec{\Sigma}$, cette équation peut se mettre sous la forme suivante :

$$\left\langle \vec{G} \right\rangle = \vec{G}_{ref} + \vec{G}_{ref}\vec{\Sigma} \left\langle \vec{G} \right\rangle \tag{C.20}$$

On montre alors que le champs de Green moyen est le tenseur d'un milieu libre homogène de permittivité ϵ_{eff}. On montre aussi que l'on a, pour un milieu statistiquement isotrope :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_{ref} + \frac{\tilde{\Sigma}(k_{eff})}{k_0^2} \tag{C.21}$$

où k_{eff} est le nombre effectif et le tilde représente la transformée de Fourier.

On considère désormais des diffuseurs cylindriques d'indice ϵ_i de rayon a dans un

milieu hôte d'indice ϵ_h. Le milieu de référence est le milieu hôte d'indice n_h. Le tenseur de Green dans ce milieu est noté G_1. Le potentiel $\vec{V}$ s'écrit :

$$V_i(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}(\epsilon_i - \epsilon_h) \sum_{i=1}^{N} \theta_i(\vec{r}) \tag{C.22}$$

où $\theta_i(\vec{r})$ vaut 1 lorsque $\vec{r}$ est dans un diffuseur et 0 sinon. On définit alors :

$$V_i(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2}(\epsilon_i - \epsilon_h)\theta_i(\vec{r}) \tag{C.23}$$

Le champ de référence est alors le champ qui se propagerait dans le milieu hôte sans diffuseurs. On a donc d'après l'équation (C.15) :

$$\vec{E} = \vec{E}_{inc} + \vec{G}_1 \vec{V} \vec{E} \tag{C.24}$$

Son développement perturbatif est alors :

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \vec{E}_{inc} + \vec{G}_1 \sum_i^N \vec{V}_i \vec{E}_{inc} + \vec{G}_1 \sum_i^N \vec{V}_i \vec{G}_1 \sum_j^N \vec{V}_j \vec{E}_{inc} \\ &\quad + \vec{G}_1 \sum_i^N \vec{V}_i \vec{G}_1 \sum_j^N \vec{V}_j \vec{G}_1 \sum_j^N \vec{V}_k \vec{E}_{inc} + ... \end{aligned} \tag{C.25}$$

On définit l'opérateur de diffusion $\vec{T}$ comme :

$$\vec{T} = \sum_i^N \vec{V}_i + \sum_{i,j}^{N,N} \vec{V}_i \vec{G}_1 \vec{V}_j + \sum_{i,j,k}^{N,N,N} \vec{V}_i \vec{G}_1 \vec{V}_j \vec{G}_1 \vec{V}_k + ... \tag{C.26}$$

Ainsi, l'équation (C.17) se réécrit :

$$\vec{E} = \vec{E}_{inc} + \vec{G}_1 \vec{T} \vec{E}_{inc} \tag{C.27}$$

On définit alors l'opérateur de diffusion par une particule par :

$$\vec{t_i} = \vec{V}_i + \vec{V}_i \vec{G}_1 \vec{V}_i + \vec{V}_i \vec{G}_1 \vec{V}_i \vec{G}_1 V_i + ... \tag{C.28}$$

Comme toutes les particules sont identiques, on utilise $\vec{t}$ opérateur de diffusion pour une particule centrée sur l'origine. On a alors pour une particule centrée en $\vec{R}_i$:

$$\vec{t_i}(\vec{r}, \vec{r'}) = \vec{t}(\vec{r} - \vec{R}_i, \vec{r'} - \vec{R}_i) \tag{C.29}$$

L'opérateur $\vec{T}$ peut s'exprimer en fonction des $\vec{t_i}$ avec une condition de non-interpénétrabilité des diffuseurs :

$$\vec{T} = \sum_{i}^{N} \vec{t}_i + \sum_{i,j}^{N,N} \vec{t}_i \vec{G}_1 \vec{t}_j + \sum_{i,j,k}^{N,N,N} \vec{t}_i \vec{G}_1 \vec{t}_j \vec{G}_1 \vec{t}_k + ... \tag{C.30}$$

En moyenne, on a donc :

$$\left\langle \vec{E} \right\rangle = \vec{E}_{inc} + \vec{G}_1 \left\langle T \right\rangle \vec{E}_{inc} \tag{C.31}$$

L'expression de la moyenne est donc :

$$\left\langle \vec{T} \right\rangle = \left\langle \sum_{i}^{N} \vec{t}_i \right\rangle + \left\langle \sum_{i,j}^{N,N} \vec{t}_i \vec{G}_1 \vec{t}_j \right\rangle + \left\langle \sum_{i,j,k}^{N,N,N} \vec{t}_i \vec{G}_1 \vec{t}_j \vec{G}_1 \vec{t}_k \right\rangle + ... \tag{C.32}$$

Le premier terme est pour les diffusions simples et vaut :

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{i}^{N} \vec{t}_i \right\rangle &= \sum_{i}^{N} \left\langle \vec{t}_i \right\rangle & \text{(C.33)} \\ &= \sum_{i}^{N} \int \vec{t}(\vec{r} - \vec{R}_i, \vec{r}' - \vec{R}_i) P_1(\vec{R}_i) d^3\vec{R}_i & \text{(C.34)} \\ &= \frac{N}{V} \int \vec{t}(\vec{r} - \vec{R}_i, \vec{r}' - \vec{R}_i) d^3\vec{R}_i & \text{(C.35)} \end{aligned}$$

Le second terme représente les diffusions doubles :

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{i,j}^{N,N} \vec{t}_i \vec{G}_1 \vec{t}_j \right\rangle &= \sum_{i,j}^{N,N} \left\langle \vec{t}_i \vec{G}_1 \vec{t}_j \right\rangle & \text{(C.36)} \\ &= \sum_{i,j}^{N,N} \int \vec{t}(\vec{r} - \vec{R}_i, \vec{r}_1 - \vec{R}_i) \vec{G}_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{t}(\vec{r}_2 - \vec{R}_j, \vec{r}' - \vec{R}_j) \vec{P}_2(\vec{R}_i, \vec{R}_j) \\ &\quad d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 d^2\vec{R}_i d^2\vec{R}_j \\ &= \frac{N(N-1)}{V^2} \int \vec{t}(\vec{r} - \vec{R}_i, \vec{r}_1 - \vec{R}_i) \vec{G}_1(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{t}(\vec{r}_2 - \vec{R}_j, \vec{r}' - \vec{R}_j) \\ &\quad \vec{P}_2 g_2(\vec{R}_i, \vec{R}_j) d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 d^2\vec{R}_i d^2\vec{R}_j & \text{(C.37)} \end{aligned}$$

On peut écrire une équation équivalente à l'équation (C.31) pour le tenseur de Green :

$$\left\langle \vec{G} \right\rangle = \vec{G}_1 + \vec{G}_1 \left\langle \vec{T} \right\rangle \vec{G}_1 \tag{C.38}$$

Cette équation peut être mise sous la forme :

$$\left\langle \vec{G} \right\rangle = \vec{G}_1 + \vec{G}_1 \vec{\Sigma} \left\langle \vec{G} \right\rangle \tag{C.39}$$

On peut alors identifier T :

$$\left\langle \vec{T} \right\rangle = \vec{\Sigma} + \vec{\Sigma}\vec{G}_1\vec{\Sigma} + \vec{\Sigma}\vec{G}_1\vec{\Sigma}\vec{G}_1\vec{\Sigma} + ... \tag{C.40}$$

Si on utilise uniquement le premier terme de diffusion simple, on découvre l'approximation de Foldy-Twersky à partir de l'équation (C.21) :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_1 + \frac{N}{V}\frac{TF[t](k_1)}{k_0^2} \tag{C.41}$$

où le TF représente la transformation de Fourier. Dans le cas de diffuseurs isotropes petits devant la longueur d'onde, on a :

$$TF[t] = i4S(0) \tag{C.42}$$

où S est la matrice de diffusion. On a de plus :

$$\frac{N}{V} = \frac{f_v}{\pi a^2} \tag{C.43}$$

On trouve alors :

$$\epsilon_{eff} = \epsilon_1 + i4\frac{f_v}{\pi a^2 k_0^2}S(0) \tag{C.44}$$

Soit :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + i4\frac{f_v}{\pi a^2}S(0) \tag{C.45}$$

De même, le terme de diffusion double donné par l'équation (C.37) sous la forme lorsque les particules sont ponctuelles parfaitement cylindriques et pour des ondes scalaires :

$$\left[\frac{f}{\pi a^2}i4S(0)\right]^2 \int_0^{+\infty} \frac{i\pi}{2}H_0^{(1)}(k_1 r)J_0(kr)r[g(r)-1]dr \tag{C.46}$$

On obtient alors le modèle de Keller :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + i\frac{4f_v S(0)}{\pi a^2} - i\frac{\pi}{2}\left(\frac{4fS(0)}{\pi a^2}\right)^2 \int_0^{\infty} H_0^1(k_1 r)J_0(k_{eff}r)(g(r)-1)rdr \tag{C.47}$$

C.3 Conclusion

Nous avons, dans cette annexe, donné les grandes lignes des calculs effectués par Durant dans sa thèse. Nous avons obtenu le modèle de Foldy-Twersky et de Keller en faisant les approximations de :

- Particules de faibles tailles devant la longueur d'onde ;
- Diffuseurs isotropes

On obtient alors le modèle de Foldy-Twersky :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + i4\frac{f_v}{\pi a^2}S(0) \tag{C.48}$$

Et le modèle de Keller :

$$k_{eff}^2 = k_1^2 + i\frac{4f_v S(0)}{\pi a^2} - i\frac{\pi}{2}\left(\frac{4fS(0)}{\pi a^2}\right)^2 \int_0^\infty H_0^1(k_1 r)J_0(k_{eff}r)(g(r)-1)rdr \tag{C.49}$$

Annexe D

Diffusion par un milieu hétérogène

D.1 Introduction

Cette annexe présente l'intégralité des résultats obtenus pour le calcul d'un indice effectif pour la propagation du cohérent. Ces courbes font apparaître :

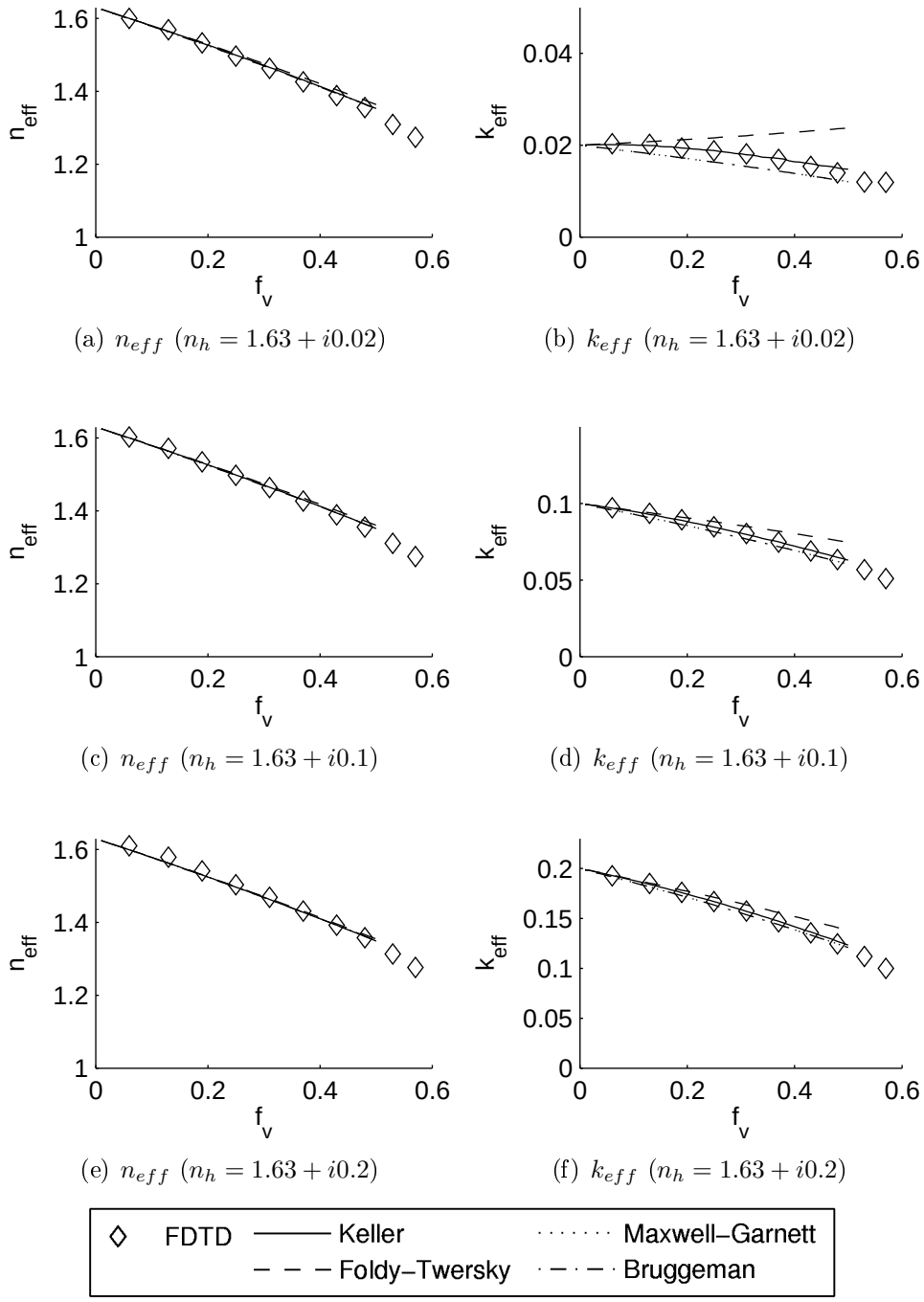
- Les résultats FDTD ;
- Le modèle de Keller ;
- Le modèle de Foldy-Twersky ;
- La loi de Maxwell-Garnett ;
- La loi de Bruggeman.

Ces calculs ont été fait en utilisant la moyenne des résultats pour 40 réalisations d'un milieu hétérogène de dimension $8.5\lambda_0 \times 10\lambda_0$ maillé à $\lambda_0/40$. Les courbes sont représentées en fonction de la fraction volumique f_v pour les variations de paramètre suivantes :

- La polarisation : TE et TM ;
- La taille des particules : $\lambda_0/40$, $\lambda_0/20$ et $\lambda_0/10$;
- L'indice des particules : 1, 2.25 et 4 ;
- L'indice du milieu hôte : $1.63 + i0.02$, $1.63 + i0.1$, $1.63 + i0.2$.

Lorsque les résultats numériques ne respectent pas le critère de convergence donné dans le chapitre 4, ils ne sont pas représentés. Ainsi certains points manquent dans le cas des particules de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice 4 en polarisation TM, et les courbes complètes pour les particules de rayon $\lambda_0/10$ et d'indice 4 ne sont pas incluses.

D.2 Résultats

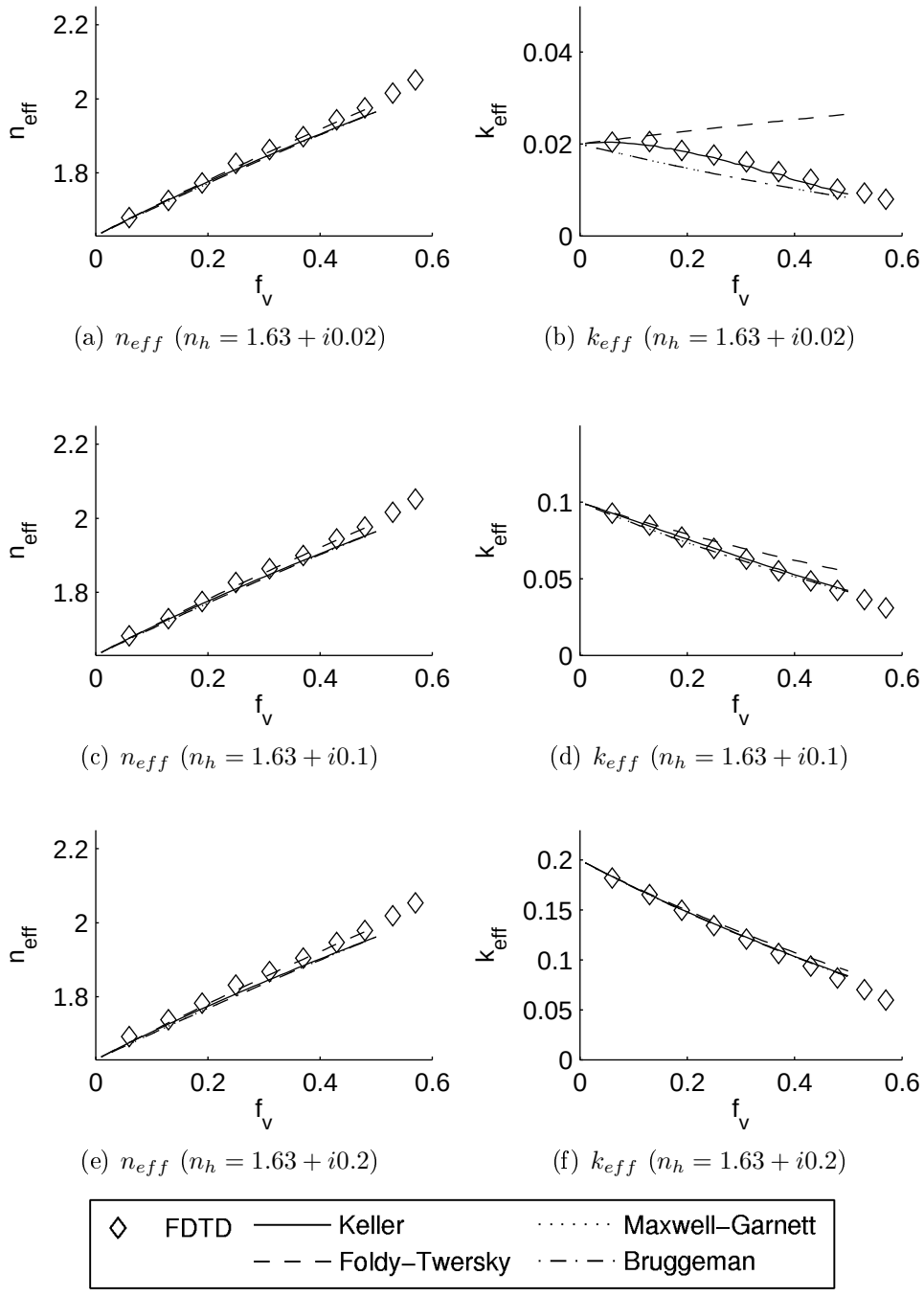


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.1 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 1$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

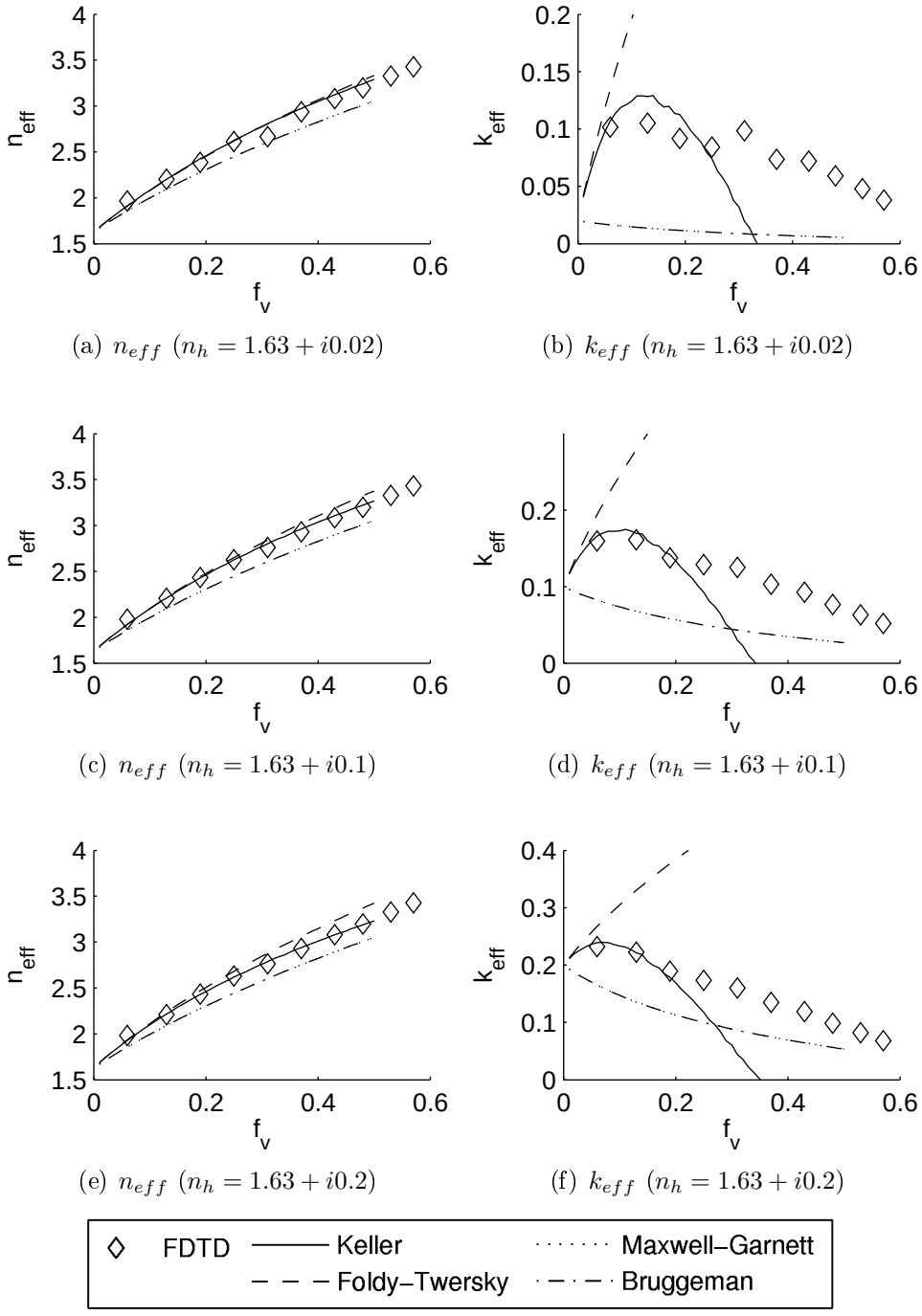


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.2 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

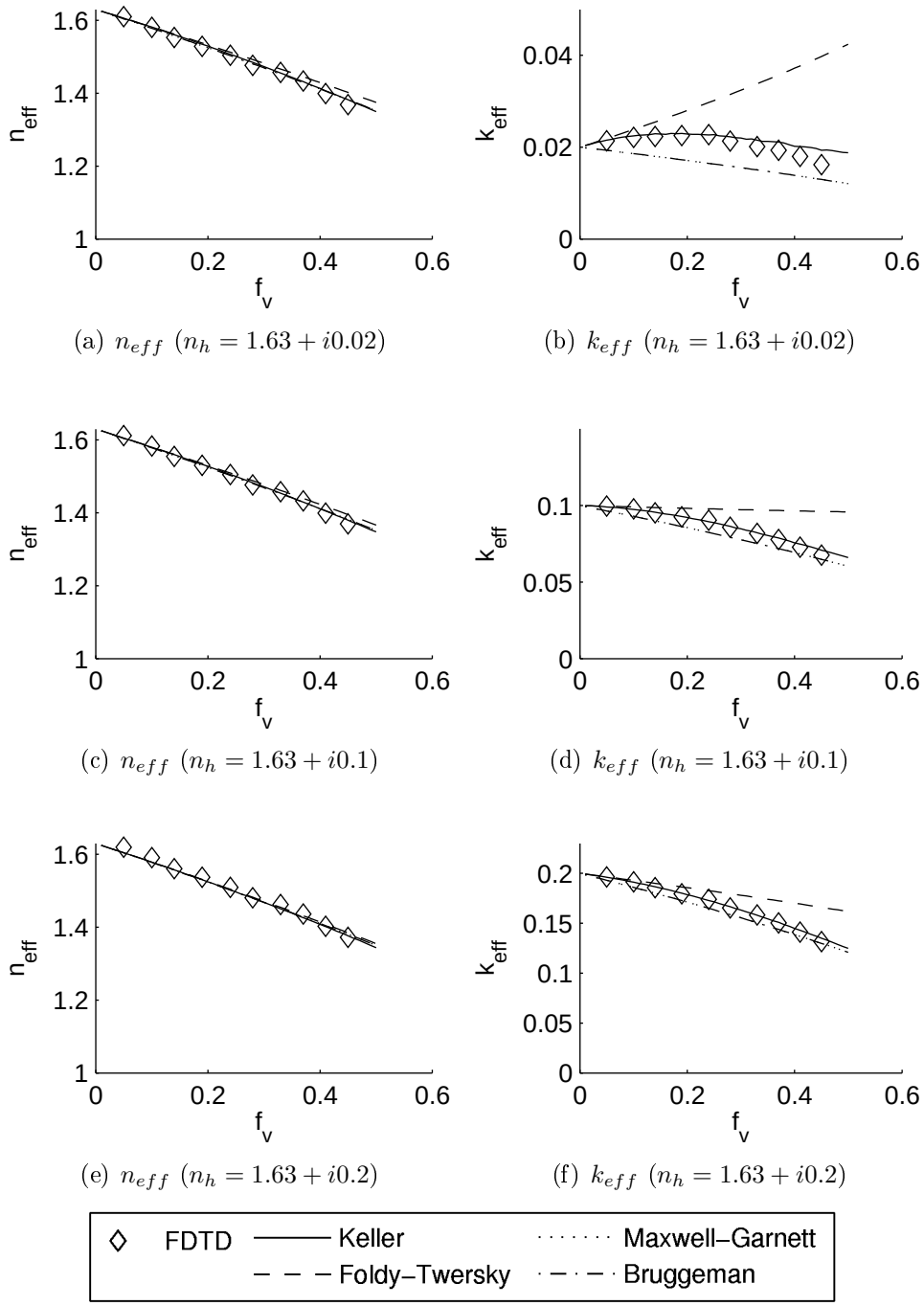


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.3 – Partie réelle (a) et imaginaire (b) de l'indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 4$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

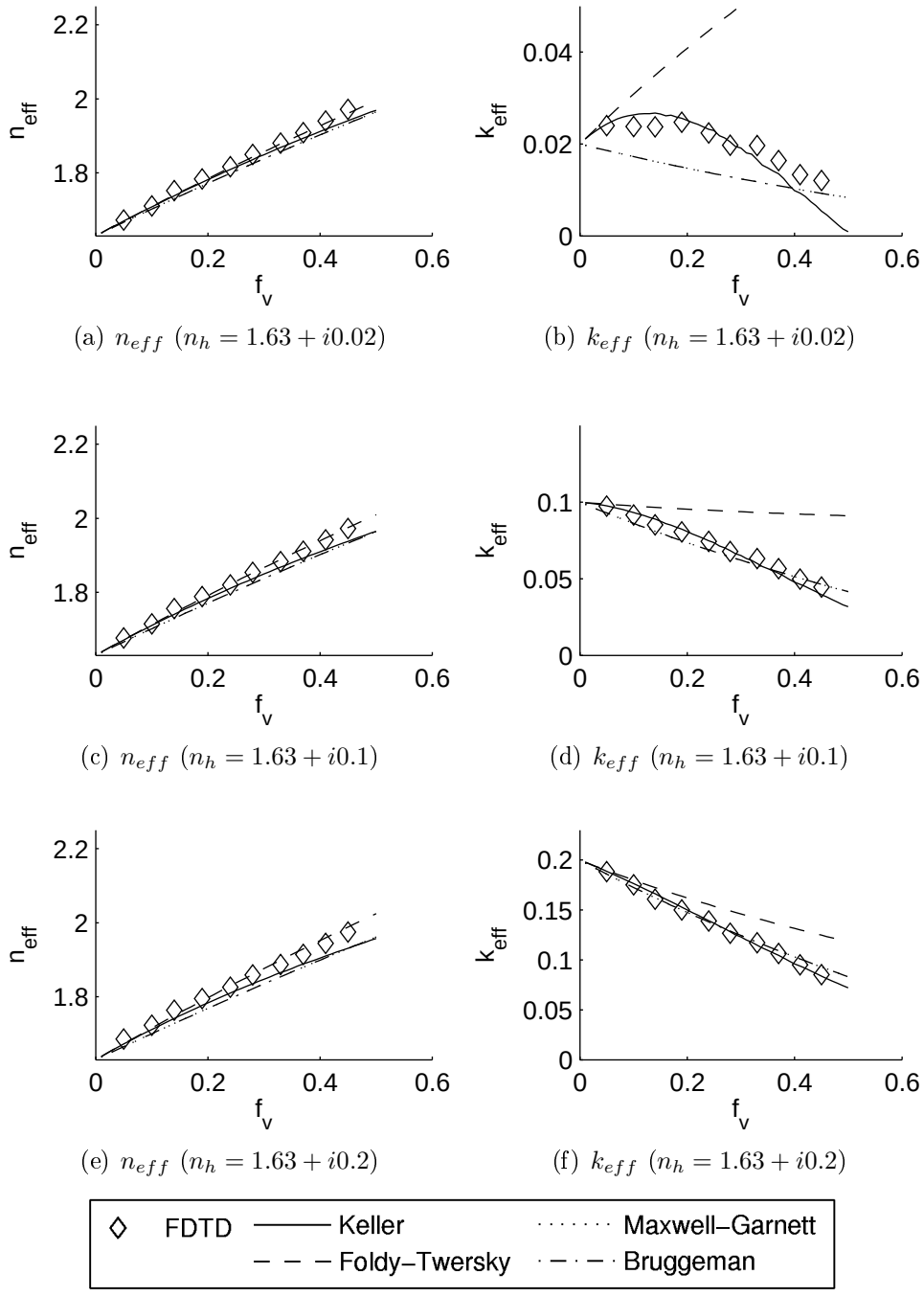


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.4 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 1$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

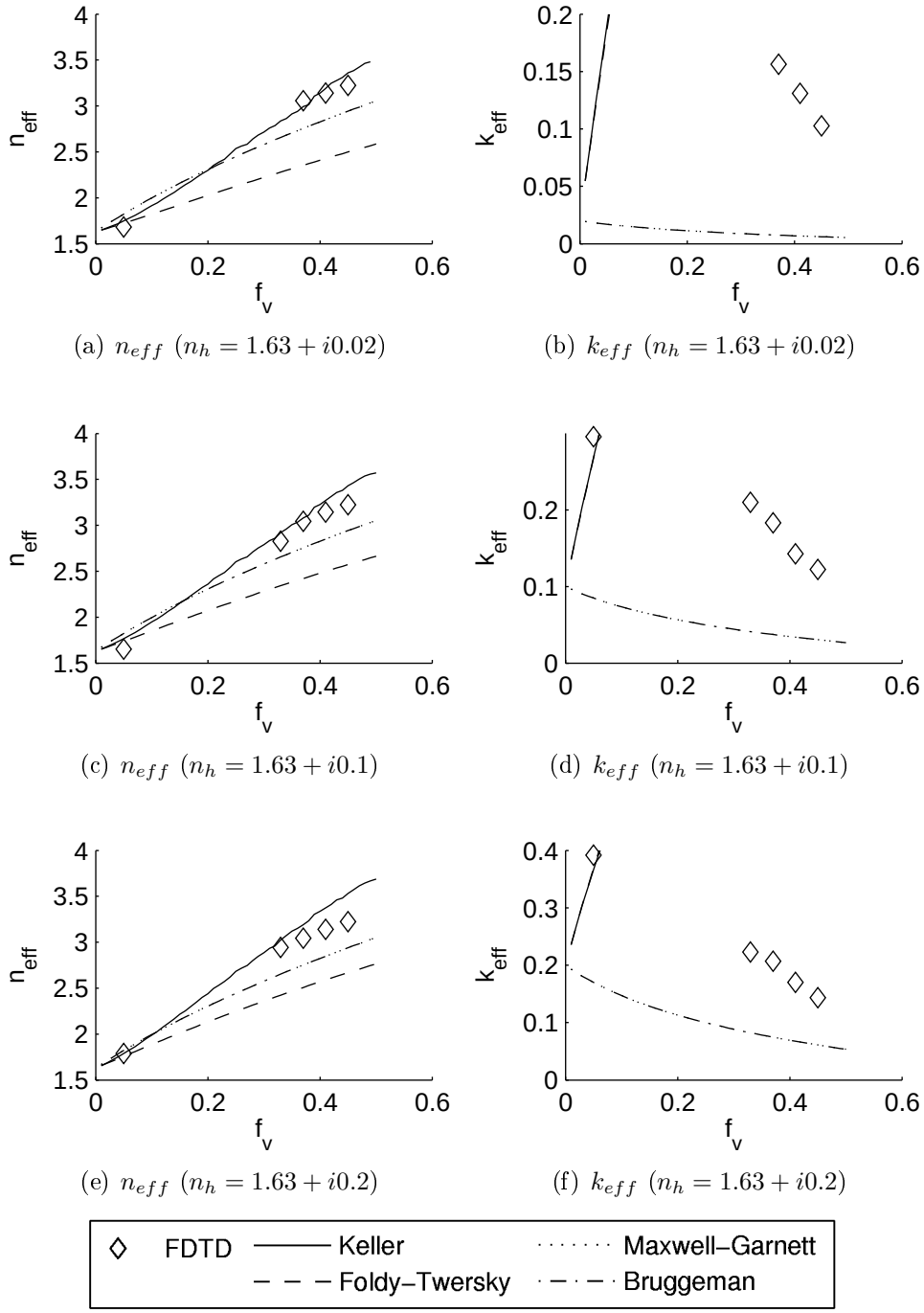


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.5 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

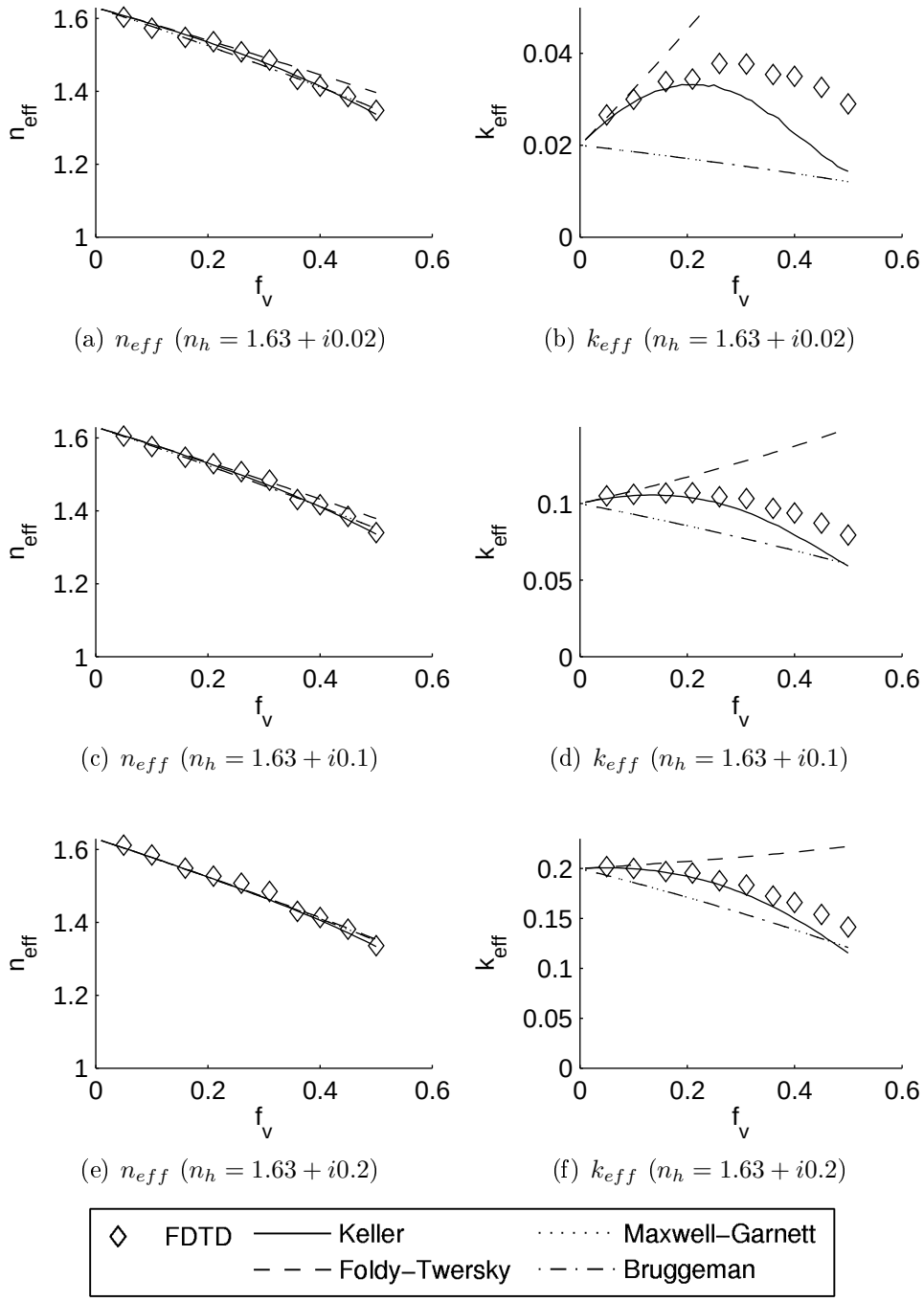


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.6 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 4$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

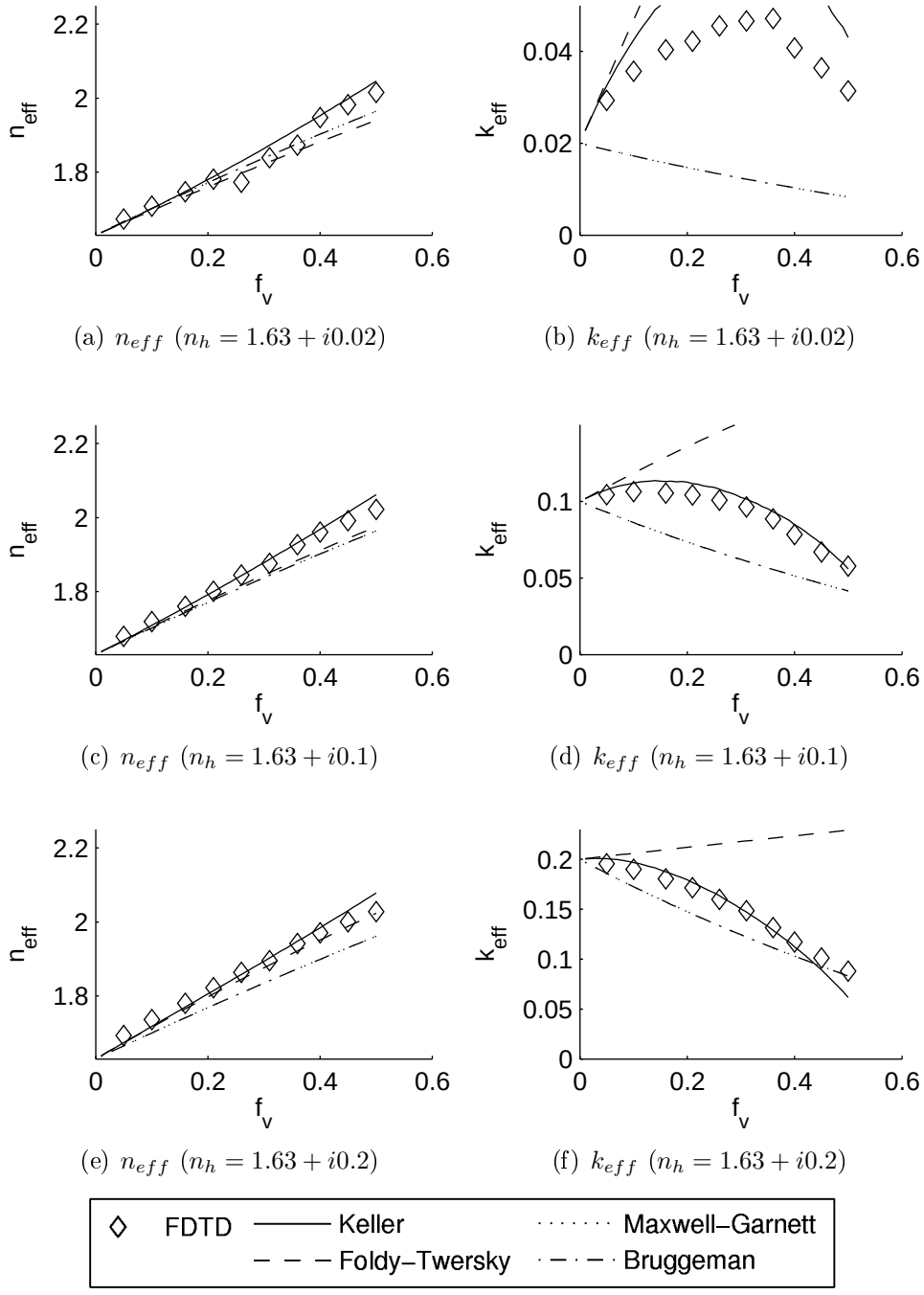


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.7 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/10$ et d'indice optique $n_i = 1$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

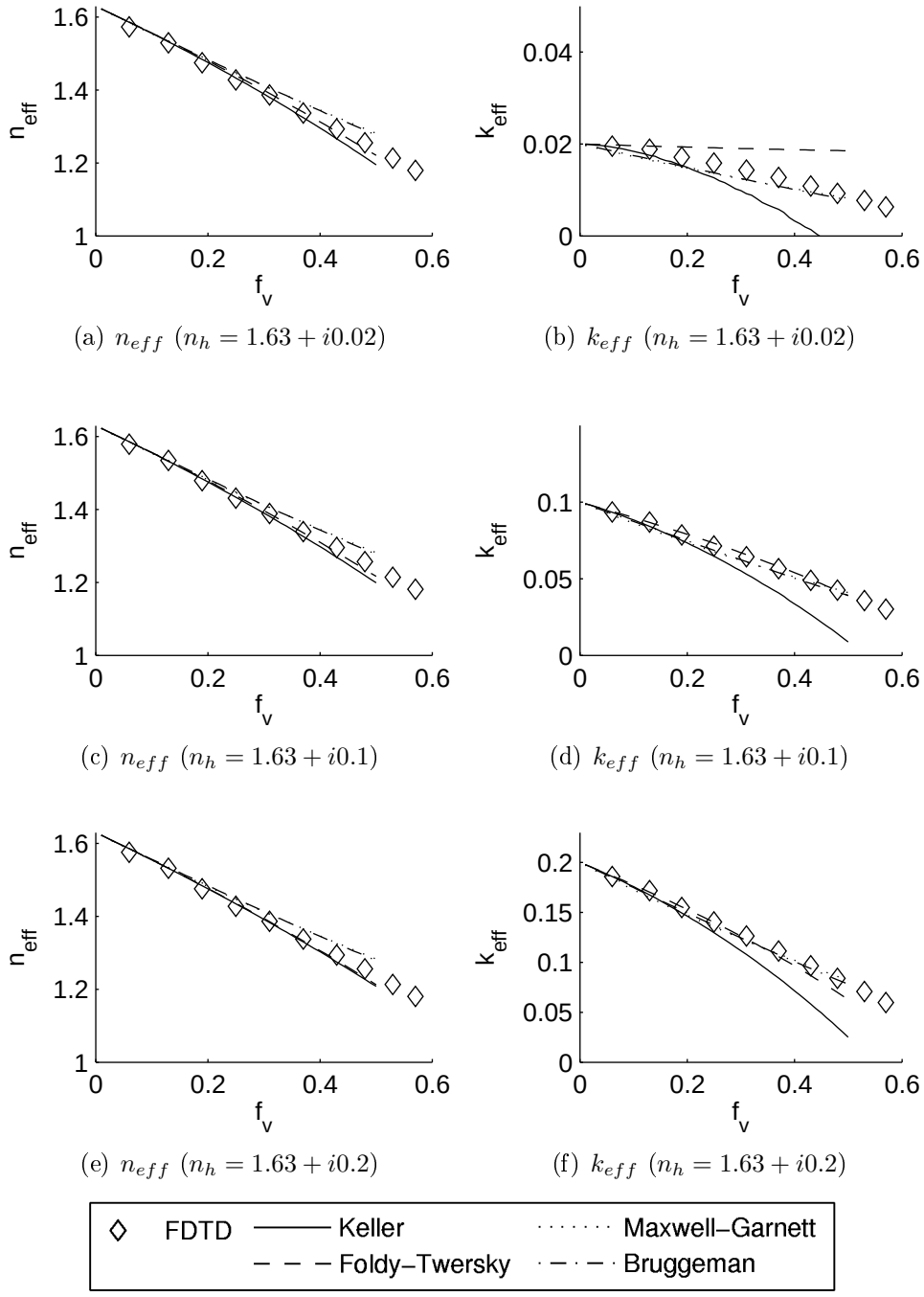


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.8 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/10$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

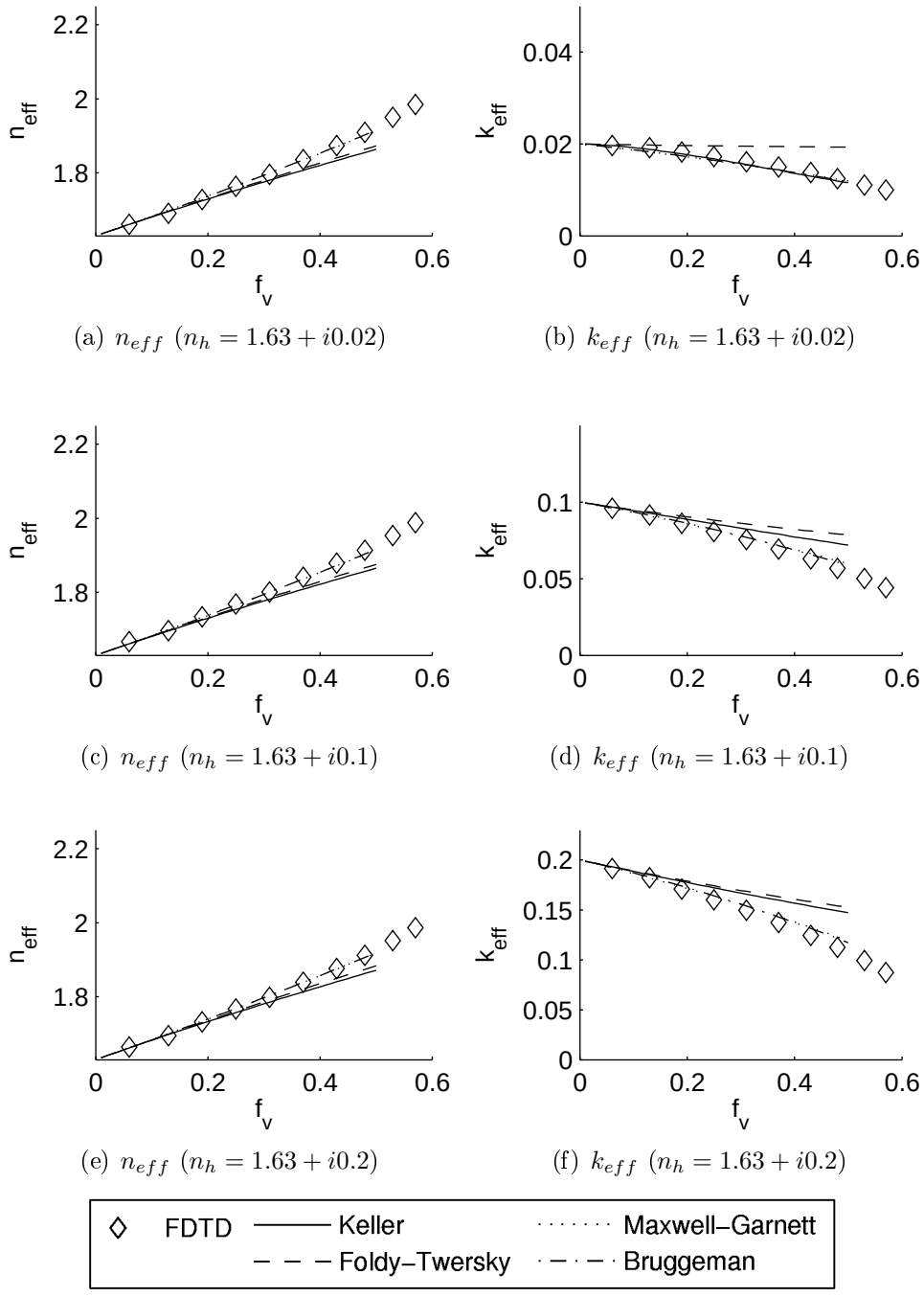


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.9 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 1$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

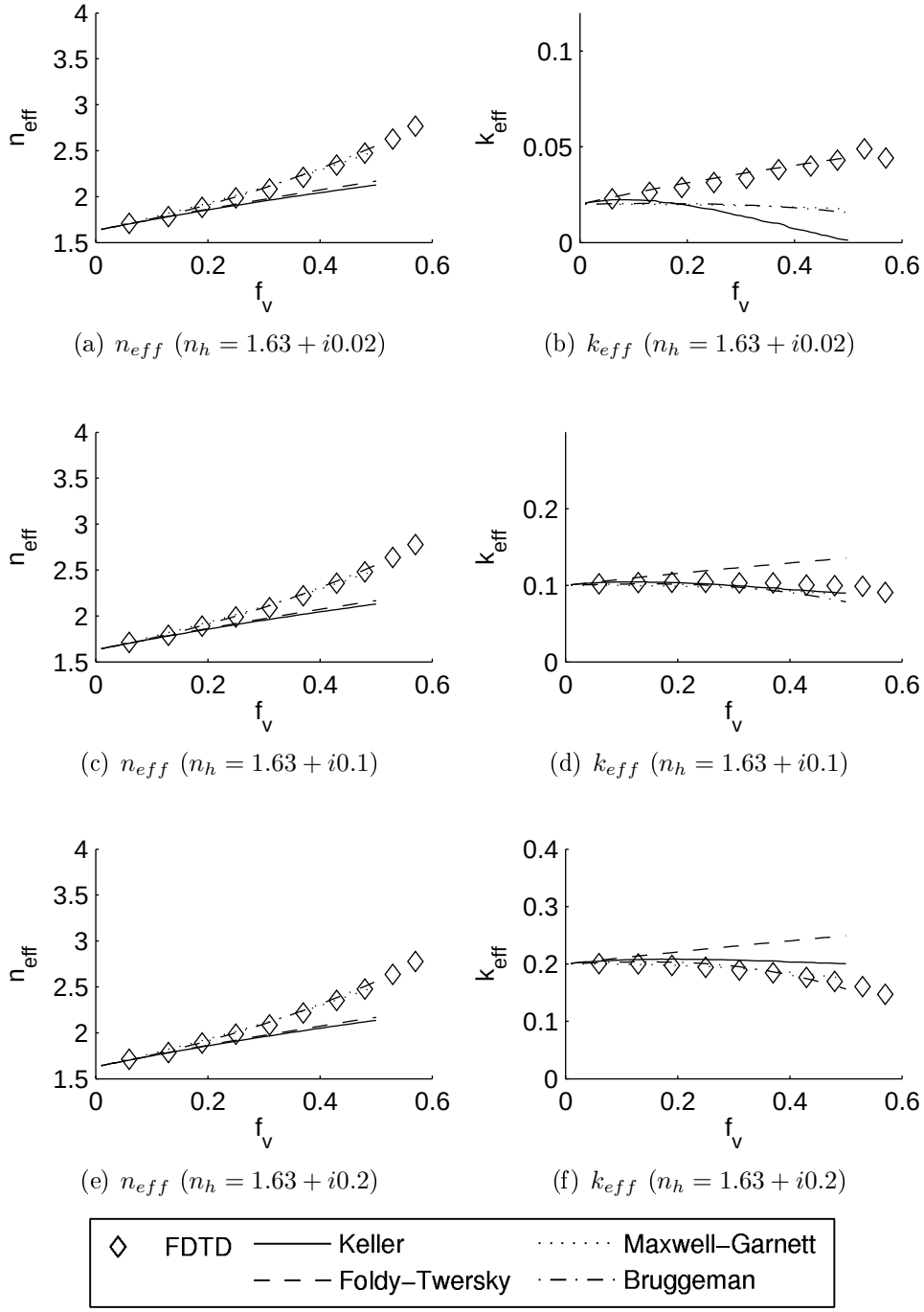


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.10 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

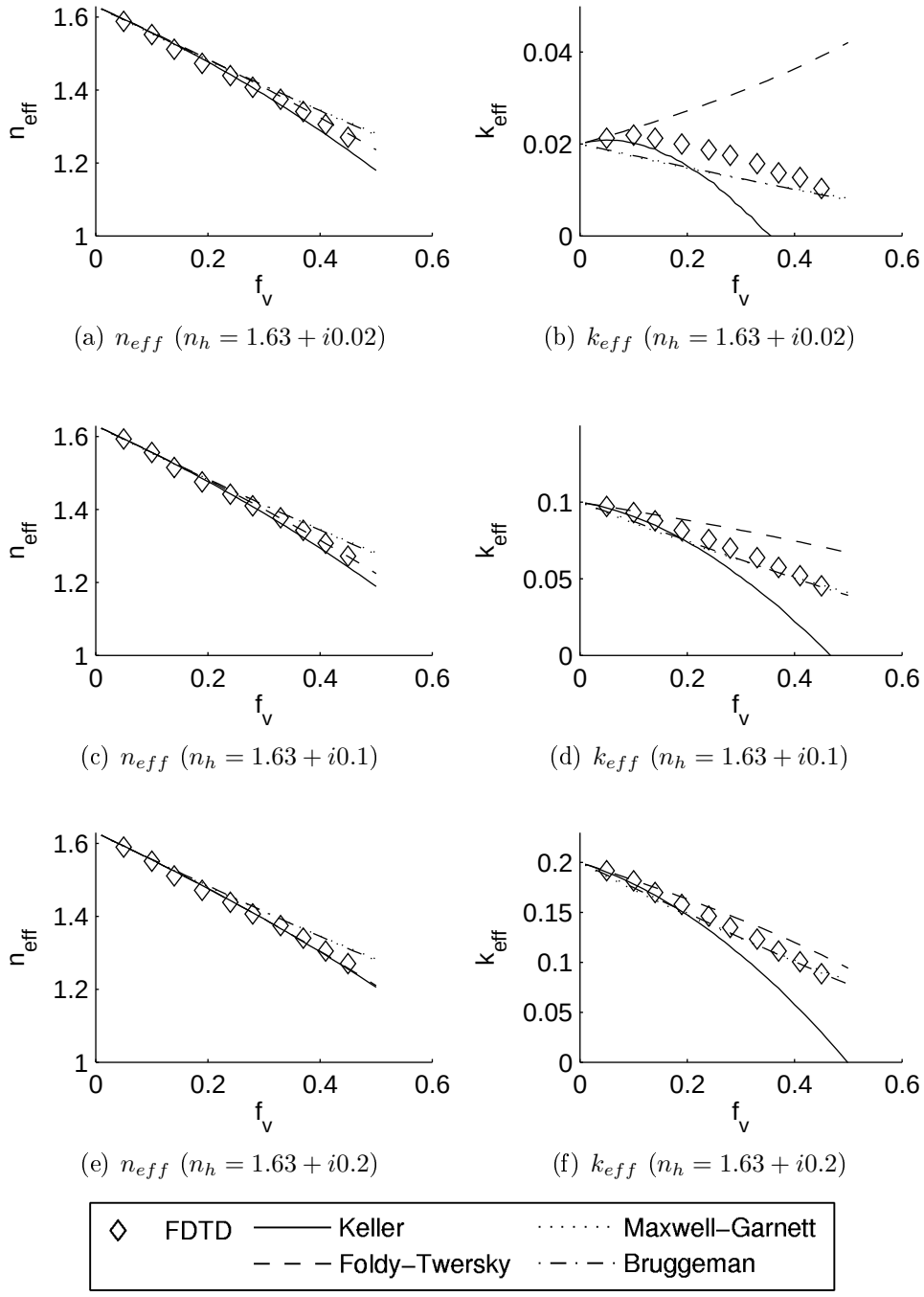


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.11 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/40$ et d'indice optique $n_i = 4$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

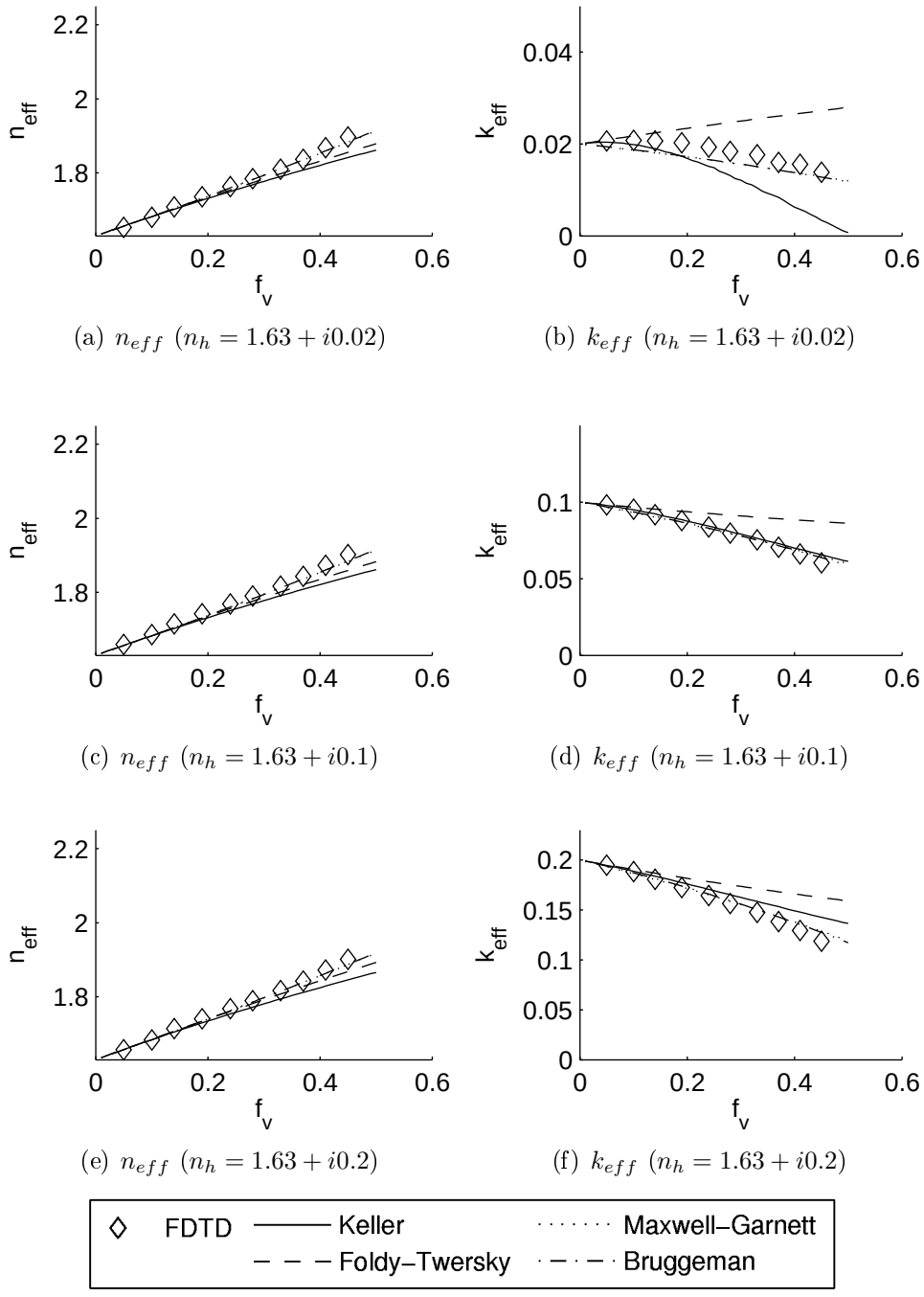


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.12 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 1$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TM.

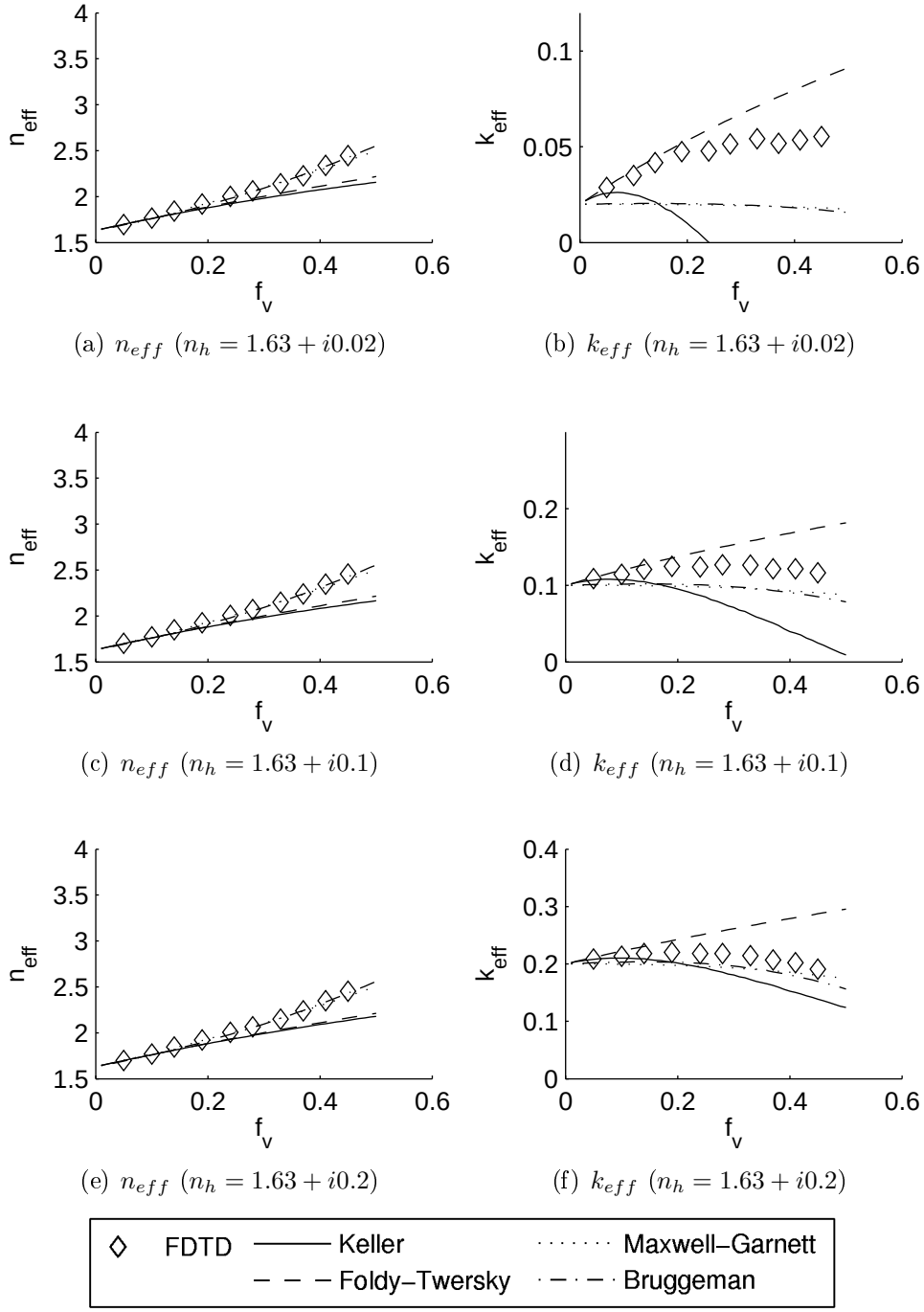


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.13 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

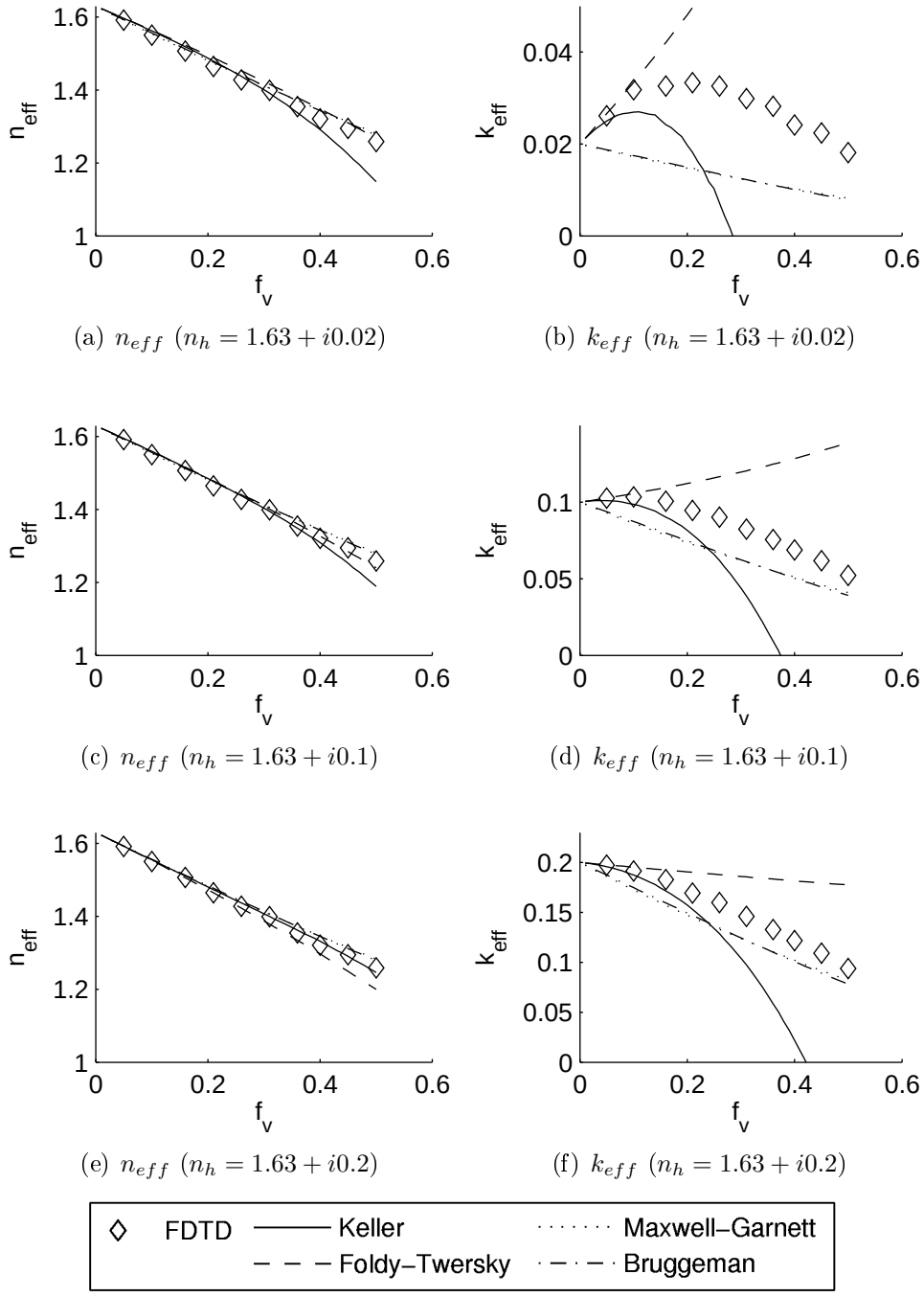


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.14 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/20$ et d'indice optique $n_i = 4$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

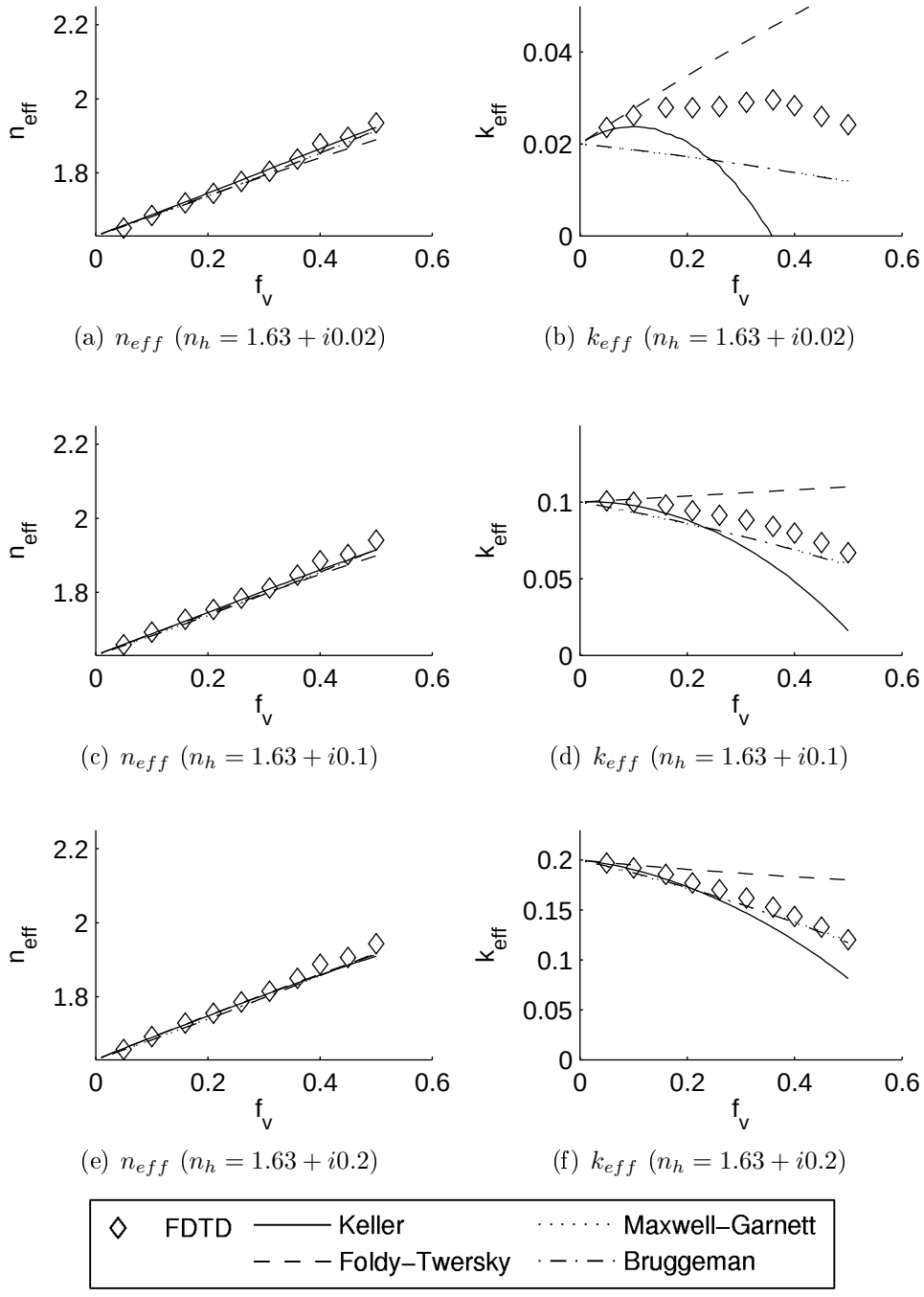


(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.15 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/10$ et d'indice optique $n_i = 1$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.



(a) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$ (b) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.02)$

(c) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$ (d) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.1)$

(e) n_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$ (f) k_{eff} $(n_h = 1.63 + i0.2)$

FIG. D.16 – Indice effectif en fonction de la fraction volumique pour des inclusions de rayon $\lambda_0/10$ et d'indice optique $n_i = 2.25$ dans un milieu hôte d'indice (a-b) $n_h = 1.63 + i0.02$, (c-d) $n_h = 1.63 + i0.1$ et (e-f) $n_h = 1.63 + i0.2$ en polarisation TE.

Bibliographie

[1] Nag fortran library routine document e04nkf/e04nka.

[2] C. On Ao. *Electromagnetic wave scattering by discrete random media with remote sensing application.* PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2001.

[3] E. Bachelier. *Modélisation électromagnétique des effets de diffusion de surface et de volume des sols par la méthode des différences finies.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de L'Aéronautique de de l'Espace, 1999.

[4] B.E. Barrowes, C.O. Ao, F. L. Teixeira, J.A. Kong, and L. Tsang. Monte Carlo simulation of electromagnetic wave propagation in dense random media with dielectric spheroid. *IEICE Trans. Electron*, E83-C :1797–1802, 2000.

[5] C. Baudier. *Diffraction d'ondes électromagnétiques par des surfaces rugueuses aléatoires : méthode approchée de Rayleigh et méthode exacte en coordonnées non-orthogonales.* PhD thesis, Université de Versailles, 2002.

[6] C. Baudier, R. Dusseaux, K.S. Edee, and G. Granet. Scattering of a plane wave by one-timensional dielectric random rough surfaces - study with the curvilinear coordinate method. *Waves in Random Media*, 14 :61–74, 2004.

[7] A. Benali, J. Chandezon, and J. Fontaine. A new theory for scattering of electromagnetic waves from conducting or dielectric rough surfaces. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 40 :141–148, 1992.

[8] C.F. Bohren and D.R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles.* Wiley, New York, 1983.

[9] J. Bredrow, A.K. Fung, R. Porco, R. Hosseinmostafa, K. Jezrk, L. Peters, and J. Young. An experimental study of relative contributions from surface and volume scattering mechanisms in saline ice. In *IGARSS ?94*, pages 608–610, 1994.

[10] G.S. Brown. New result on coherent scattering from randomly rough surface. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 31(1) :5–11, january 1983.

[11] N.C. Bruce. Scattering of light from surfaces with one-dimensional structure calculated by the ray-tracing method. *J. Opt. Soc. Am. A*, 14(8) :1850–1858, August 1997.

[12] C.A.G. Bruggeman. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogen subsganzen. *Annalen der Physik*, 24 :636–664, 1935.

[13] J.P. Bérenger. A perfectly matched layer for the absoption of electromagnetic waves. *J. Comput. Physics*, 114 :185–200, 1994.

[14] O. Calvo-Perez. *Diffusion des ondes electromagnétiques par un film rugueux hétérogène. Etude expérimentale et modélisation.* PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1999.

[15] O. Calvo-Perez, A. Sentenac, and J.J. Greffet. Light scattering by a two-dimensional, rough penetrable medium : A mean-field theory. *Radio Science*, 34(2) :311–335, March-April 1999.

[16] A.C. Cangellaris and D.B. Wright. Analysis of the numerical error caused by the stair stepped approximation of a conducting boundary in FDTD simulations of electromagnetic phenomena. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 39 :1518–1525, 1991.

[17] P. Cao and C. Macaskill. Iterative techniques for rough surface scattering problems. *Wave Motion*, 21 :209–229, 1995.

[18] J. Caron, C. Andraud, and J. Lafait. Radiative transfer calculations in multilayer systems with smooth or rough interfaces. *Journal of modern optics*, 51 :575–595, 2004.

[19] H. Chanal, J.P. Segaud, P. Borderies, and M. Saillard. Homogenization and scattering from heterogeneous media based on FDTD Monte Carlo computations. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 2005. accepté.

[20] Z. Chen, A. Taflove, and V. Backman. Equivalent volume averaged light scattering behavior of randomly inhomogeneous dielectric spheres in the resonant range. *Optics Letters*, 28 :765–767, 2003.

[21] P. Chylek. Light scattering by small particles in an absorbing medium. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 67 :561–563, 1977.

[22] P. Chylek, V. Srivastava, R.G. Pinnick, and R.T. Wang. Scattering of electromagnetic waves by composite spherical particles : experiment and effective medium approximation. *Applied Optics*, 27 :2396–2404, 1988.

[23] A. Collaro, G. Franceschetti, M. Migliaccio, and D. Riccio. Gaussian rough surfaces and Kirchhoff approximation. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 47(2) :392–398, February 1999.

[24] R.E. Collin. *Field Theory of guided waves.* Mc GrawHill Book Company, 1960.

[25] K. Demarest, Z. Huang, and R. Plumb. An FDTD near to far zone transformation for scatterers burided in stratified grounds. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 44 :1150–1157, 1996.

[26] K.R. Demarest, R. Plumb, and Z. Huang. FDTD modeling of scatterers in stratified media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 43 :1164–1168, 1995.

[27] P. Diaconis and L. Saloff-Coste. An application of harnack inequalities to random walk on nilpotent quotients. *The Journal on Fourier Analysis and Application*, Kahane Special Issue, 1995.

[28] D. Didascalou, M. Dottling, N. Geng, and W. Wiesbeck. An approach to include stochastic rough surface scattering into deterministic ray-optical wave propagation modeling. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 51(7) :1508–1515, July 2003.

[29] K.H. Ding and L. Tsang. Effective propagation constants in media with densely distributed dielectric particles of multiple sizes and permittivities. *PIER*, 6 :241–295, 1992.

[30] T. Dogaru and L. Carin. Time-domain sensing of targets buried under a gaussian, exponential, or fractal rough interface. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 39(8) :1807–1819, august 2001.

[31] R. Drezek, A. Dunn, and R. Richards-Kortum. A pulsed Finite Difference Time Domain method for calculating light scattering from biological cells over broad wavelenght ranges. *Optics Express*, 6 :147–157, 2000.

[32] A. Dunn and R. Richards-Kortum. Three dimensional computation of light scattering from cells. *IEEE J. Selected Topics in Quantum Electron.*, 2 :898–905, 1996.

[33] S. Durant. *Propagation de la lumière en milieu aléatoire. Rôle de l'absorbtion, de la diffusion dépendante et du couplage surface/volume.* PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2003.

[34] C. Eftimiu. Scattering by rough surfaces : a simple model. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 34(5) :626–630, May 1986.

[35] T.M. Elhouhaily and C.A. Guérin. A critical survey of approximate scattering wave theories from random rough surfaces. *Waves in Random Media*, 14 :R1–R40, 2004.

[36] C. Engstrom and D. Sjoberg. A comparison of two numerical methods for homogenization of Maxwell's equations. Technical report, Lund Institute of Technology (Sweden), 2004.

[37] D. Felbaq, G. Tayeb, and D. Maystre. Scattering by a random set of parallel cylinders. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 11 :2526–2538, 1994.

[38] X. Ferrières, A. Cosnuau, J.C. Alliot, and P. Leca. Code solving the Maxwell equations in the time domain, implanted on distributed-memory type machine. *Aerospace Sience and Technology*, 6 :425–439, 1997.

[39] L. Foldy. General theory of isotropic scattering by randomly distributed scatterers. *Phys. Rev. Lett.*, 65 :107–119, 1945.

[40] A.K. Fung, M.R. Shah, and S. Tjuatja. Numerical simulation of scattering from three-dimensional randomly rough surfaces. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 32(5) :986–994, september 1994.

[41] A. Garcia-Valenzuela and R.G. Barrera. Electromagnetic response of a random half-space of Mie scatterers within the effective field approximation and the determination of the effective optical coefficients. *Journal of Quantitative Spetroscopy and Radiative Transfer*, 79-80 :627–647, 2003.

[42] J.C.M. Garnett. Color in metal glasses and in metallic films. *Philosoph. Trans. Royal Soc. London*, 203 :385–420, 1904.

[43] J. Garnier. Scattering, spreading, and localization of an acoustic pulse by a random medium. Technical report, Université Paul Sabatier (Toulouse), 2004.

[44] Stefano Giordano. Effective medium theory for dispersions of dielectric ellipsoids. *Journal of Electrostatics*, 58 :59–76, 2003.

[45] H. Giovannini, M. Saillard, and A. Sentenac. Numerical study of scattering from inhomogeneous films. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(5) :1182–1191, May 1998.

[46] V. Grillon, G. Pierie, S. Schnebert, A. Charbonbelle, and G. Pauly. A new method for contactless in vivo quatitative measurment of stratum corneum gloss attribute - influence of active ingredient. *Skin Care*, 30, 2002.

[47] L. Gurel and U. Oguz. Signal processiong techniques to reduce the sinusoidal steady state error in the FDTD method. *IEEE Trans. Antennas. Propagat.*, 48 :585–593, 2000.

[48] L. Gurel, U. Oguz, and O. Arikan. Accurate plane wave excitation in the FDTD method. In *IEEE AP-S International Symposium*, pages 2164–2167, 1997.

[49] C.A. Guérin, G. Soriano, and T. Elfouhaily. Weighted curvature approximation : numerical tests for 2D dielectric surfaces. *Waves in Random Media*, 14 :349–363, 2004.

[50] F.D. Hastings, J.B. Schneider, S.L. Broschat, and E.I. Thorsos. An FDTD method for analysis of scattering from rough fluid-fluid interfaces. *IEEE journal of oceanic engineering*, 26(1) :94–101, january 2001.

[51] F.D. Hastings, J.B. Shneider, and S.L. Broschat. A Monte-Carlo FDTD technique for rough surface scattering. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 43(11) :1183–1191, November 1995 1995.

[52] J. He, A. Karlsson, J. Swartling, and S.A. Engels. Light scattering by multiple red blood cells. *J. Opt. Soc. Am. A*, 21 :1953–1961, 2004.

[53] L. Hespel. *Etude expérimentale et théorique du transfert radiatif dans les milieux diffusants. Détermination expérimentale des propriétés radiatives aux forts taux de charge.* PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1999.

[54] L. Hespel, S. Mainguy, and J.J. Greffet. Theorical and experimental investigation of the extinction in a dense distribution of particles : nonlocal effects. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18 :1317–1320, 2001.

[55] L. Hespel, S. Mainguy, and J.J. Greffet. Radiative properties of scattering and absorbing dense media : theory and experimental study. *J. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 77 :193–210, 2003.

[56] R. Holland. Pitfalls of staircase meshing. *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, 35 :434–439, 1993.

[57] G.L. Hower, R.G. Olsen, J.D. Earls, and J.B. Schneider. Inaccuracies in numerical computation of scattering near natural frequencies of penetrable objects. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 41 :982–986, 1993.

[58] A. Ishimaru. Wave propagation and scattering in random media with rough surface. *proceedings of the IEEE*, 79 :1359–1366, 1991.

[59] A. Ishimaru and Y. Kuga. Attenuation constant of a coherent field in a dense distribution of particles. *J. Opt. Soc. Am. A*, 10 :1317–1320, 1982.

[60] V. Jandhyala, E. Michielssen, S. Balasubramaniam, and W.C. Chew. A combined Steepest Descent Fast Multipole Algorithm for the fast analysis of three-dimensional scattering by rough surfaces. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 36(3) :738–748, May 1998.

[61] M. Jaureguy. *Etude de la diffraction par impulsions électomagnétiques très courtes d'objets en espace libre ou enfouis : modélisation numérique et extraction des paramètres caractéristiques.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 1995.

[62] M. Jaureguy and P. Borderies. An efficient initialization method for FDTD computation of wave scattering. In *IEEE-URSI Symposium*, June 1995.

[63] Y. Jihuan, Y. Yubo, X. Jingming, and G. Debiao. Application of FDTD in EM scattering from rough surfaces. In *5th International Symposium on Antennas, Propagation and EM Theory*, pages 317–320, August 2000.

[64] Y.-Q. Jin and G. Li. Detection of a scatter target over a randomly rough surface by using the angular correlation function in a finite element approach. *Waves in Random Media*, 10 :273–280, 2000.

[65] G. Jiracek. Numerical comparisons of a modified Rayleigh approach with other rough surface EM scattering solutions. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 21 :393–396, 1973.

[66] T.G. Jugens, A.Taflove, K. Umashankar, and T.G. Moore. Finite difference time domain modeling of curved surface. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 40 :357–366, 1992.

[67] N. Kaneda, B. Houshmand, and T. Itoh. FDTD analysis of dielectric resonator with curved surfaces. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, 45 :1645–1649, 1997.

[68] K.K. Karkkanen, A.H. Sihvola, and K.I. Nikoskinen. Effective permittivity of mixtures : numerical validation by the FDTD method. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 38 :1303–1308, 2000.

[69] J.B. Keller. Stochastic equations and wave propagation in random media. *Proc. Symp. Appl. Math.*, 16 :145–170, 1964.

[70] M. Kerker. *The scattering of light and other electromagnetic radiation*. Academic, New York, 1964.

[71] M. Kerker and E. Matijevic. Scattering of electromagnetic waves from concentric infinite cylinders. *J. Opt. Soc. Am. A*, 51 :506–508, 1961.

[72] M.E. Knotts, T.R. Michel, and A. O'Donnell. Comparisons of theory and experiment in light scattering from a randomly rouh surface. *J. Opt. Soc. Am. A*, 10(5) :928–941, May 1993.

[73] G. Kristensson. Homogenizaton of sperical inclusions. *PIER*, 42 :1–25, 2003.

[74] C.M. Lam and A. Ishimaru. Mueller matrix calculation for a slab of random medium with both random rough surfaces and discretes particles. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 42 :145–156, 1994.

[75] R.H. Lang. Scattering from a layer of discrete random medium over a random interface : application to microwave backscattering from forests. *Waves in Random Media*, 14 :359–391, 2004.

[76] Z. Li and Y.-Q. Jin. Bistatic scattering from fractal rough surface in numerical finite element method. In *5th International Symposium onAntennas, Propagation and EM Theory*, pages 382 – 385. ISAPE 2000, August 2000.

[77] C.C. Lu and W.C. Chew. A multilevel algorithm for solving a boundary integral equation of wave scattering. *Micr. Opt. Technol. Lett.*, 4 :466–470, 1994.

[78] Y. Lu and C.Y. Shen. A domain decomposition finite-difference method for parallel numerical implementation of time-dependent Maxwell's equations. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 3 :556–562, 1997.

[79] Y. Ma, V.V. Varanda, and V.K. Varanda. Scattered intensity of a wave propagating in a discrete random medium. *Applied Optics*, 27 :2469–2477, 1988.

[80] T.G. Mackay and A. Lakhakia. A limitation of the Bruggeman formalism for homogenization. *optics communications*, 234 :35–42, 2004.

[81] S. Mainguy and J.J. Greffet. A numerical evaluation of Rayleigh's theory applied to scattering by randomly rough dielectric surfaces. *Waves in Random Media*, 8 :79–101, 1998.

[82] T. Martin. An improved near to far zone transformation for the finite difference time domain method. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 46 :1263–1271, 1998.

[83] T. Martin and L. Pettersson. Dispersion compensation for Huygens' sources and far-zone transformation in FDTD. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 48 :494–501, 2000.

[84] T. Mattfeldt and D. Stoyan. Improved estimation of the pair correlation function of random sets. *J. Microscopy*, 200 :158–173, 2000.

[85] J.C. Maxwell-Garnett. Colours in metal glasses and in metallic films. *Philos. Trans. R. Soc. A*, 203 :385–420, 1904.

[86] D. Maystre. Electromagnetic scattering from perfectly conducting rough surfaces in the resonance region. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 31(6) :885–895, november 1983.

[87] D. Maystre, M. Saillard, and G. Tayeb. *Special methods of wave diffraction*, chapter 1.5.6, pages 1–18. Academic Press, London, 2001.

[88] W.M. Merrill, R.E. Diaz, M.M. Lore, and M.C. Squires. Effective medium theories for artificial materials composed of multiple size of spherical inclusions in a host continuum. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 47 :142–148, 1999.

[89] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller. Equation of state by fast computing machines. *The Journal of Chemial Physics*, 21 :1087–1191, 1953.

[90] M.I. Mishchenko, J.W. Hovenier, and L.D. Travis. *Light scattering by nonspherical particles.* Academic Press, 2000.

[91] C.D. Moss, F.L. Teixeira, Y. Eric Yang, and Jin Au Kong. Finite difference time-domain simulation of scattering from objects in continuous random media. *IEEE Trans. Geosci. remote Sensing*, 40 :178–186, 2002.

[92] S. Mudaliar. Scattering from a rough layer of a random medium. *Waves in Radom Media*, 9 :521–536, 1999.

[93] G. Mur. Absorbing boundary conditions for the finite difference approximation of the time domain electromagnetic field equations. *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, EMC-23 :377–382, 1981.

[94] A. Nashashibi and K. Sarabandi. Experimental characterisation of the effective propagation constant of dense random media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 47 :1454–1462, 1999.

[95] Elias M. Nassar, Joel T. Johnson, and Robert Lee. A numerical model for electromagnetic scattering from sea ice. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 38 :1309–1319, 2000.

[96] G.A. Niklasson, C.G. Granqvist, and O. Hunderi. Effective medium models for the optical properties of inhomogeneous materials. *Applied Optics*, 20 :26–30, 1981.

[97] J.A. Ogivly. Computer simulation of acoustic wave scattering from rough surfaces. *J. Phys. D : Appl. Phys.*, 21 :260–277, 1988.

[98] Robert J. Papa, John F. Lennon, and Richard L. Taylor. The variation of bistatic rough surface scattering cross section for physical optics model. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 34(10) :1229–1237, october 1986.

[99] G. Pelosi and R. Coccioli. A finite element approach for scattering from inhomogeneous media with a rough surface. *Waves in Random Media*, 7 :119–127, 1997.

[100] J.K. Percus and G.J. Yevick. Dynamical considerations on new approach to the many-body problem. *Phys. Rev.*, 101 :1192–1197, 1956.

[101] J.K. Percus and G.J. Yevick. Analysis of classical statistical mechanics by means of collective coordinates. *Phys. Rev.*, 110 :1–13, 1958.

[102] J.W. Perram, M.S. Wertheim, J.L. Lebowitz, and G.O. Williams. Monte Carlo simulation of hard spheroids. *Chemical Physics Letters*, 105 :277–280, 1984.

[103] J.R. Poirier. *Modélisation électromagnétique des effets de rugosité surfacique*. PhD thesis, INSA Toulouse, 2000.

[104] B.D. Ripley. *Spatial Statistics*. John Wihley&Sons, 1980.

[105] D.A. Robinson and S.P. Friedman. The effective permittivity of dens packings of glass beads, quartz sand and their mixtures immersed in different dielectric backgrounds. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 305 :261–267, 2002.

[106] L. Roux, P. Mereshal, V. Vukadinovic, J.J. Thibaud, and J.J. Greffet. Scattering by a slab containing randomly located cylinders : comparison between radiative transfer and electromagnetic simulation. *J. Opt. Soc. Am. A*, 18 :374–384, 1991.

[107] R. Ruppin. Evaluation ef extended Maxwell-Garnett theories. *Optics Communications*, 182 :273–279, 2000.

[108] M. Saillard and A. Sentenac. Rigorous solutions for electromagnetic scattering from rough surfaces. *Waves In Random Media*, 11 :103–137, 2001.

[109] K. Sarabandi and P.R. Siqueira. Numerical scattering analysis for two-dimensional dense random media : characterization of effective permittivity. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 45 :858–867, 1997.

[110] K. Sarabandi, Y.O., and F.T. Ulaby. A numerical simulation of scattering from one dimensional inhomogeneous dielectric random surface. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 34 :425–432, 1996.

[111] B. Sareni, L. Karhenbul, A. Beroual, and C. Brosseau. Effective dielectric constant of periodic composite materials. *J. Appl. Phys.*, 80 :1688–1696, 1996.

[112] A. Sentenac, H. Giovannini, and M. Saillard. Scattering from rough inhomogoneous media : splitting of surface and volume scattering. *J. Opt. Soc. Am. A*, 19(4) :727–736, 2002.

[113] A. Sentenac and J.J. Greffet. Mean-field theory of light scattering by one dimensional rough surfaces. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(2) :528–532, February 1998.

[114] A. Sentenac, G. Toso, and M. Saillard. Study of coherent scattering from one-dimensional rough surfaces with mean-field theory. *J. Opt. Soc. Am. A*, 15(4) :924–931, April 1998.

[115] P. Sheng. Theory of the dielectric function of granular composite media. *Physical Review Letters*, 45 :60–63, 1980.

[116] J.B. Shneider and K.L. Shlager. FDTD simulations of TEM horns and the implications for staircased represenations. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 45 :1830–1838, 1997.

[117] J. M. Soto-Crespo, M. Nieto-Vesperinas, and A. T. Friberg. Scattering from slightly rough random surfaces : a detailed study on the validity of the small perturbation method. *J. Opt. Soc. Am. A*, 7 :1185–1201, 1990.

[118] B. Stout, C. Andraud, D. Prot, J. Lafait, J.C. Auger, and S. Stout. Complete field descriptions in three dimensional multiple scattering problems : a transfer matrix approach. *J. Opt. Soc. Am. A*, 4 :S182–S187, 2002.

[119] J.C. Stover. *Optical Scattering.* SPIE, 1995.

[120] W. Sun, Q. Fu, and Z. Chen. Finite Difference Time Domain solution of light scattering by dielectric particles with a perfectly matched layer absorbing boundary condition. *Applied optics*, 38 :3141–3150, 1999.

[121] W. Sun, N.G. Loeb, and B. Lin. Light scattering by an infinite circular cylinder immersed in an absorbing medium. *Applied Optics*, 44 :2338–2342, 2005.

[122] W. Sun, N.G. Loeb, G. Videen, and Q. Fu. Examination of surface roughness on light scattering by long ice columns by use of a two-dimensional Finite Difference Time Domain algorithm. *Applied Optics*, 43 :1957–1964, 2004.

[123] A. Taflove and K.R. Umashankar. Thie Finite Difference Time Domain method for numerical modeling of electromagnetic waves interactions with arbitrary structures. *PIER*, 2 :287–373, 1990.

[124] L.S. Taylor. Ray optics in lossy stochastic media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, AP-17 :634–640, 1969.

[125] Eric I. Thorsos. The validity of the Kirchhoff approximation for rough surface scattering using a gaussian roughness spectrum. *J. Acoust. Soc. Am.*, 83(1) :78–92, January 1998.

[126] W. R. Tinga. Mixture laws and microwave material interactions. *PIER*, 6 :1–40, 1992.

[127] L. Tsang, J.A. Kong, and R.T. Shin. *Theory of microwave remote sensing.* Wiley-Interscience, 1985.

[128] A.G. Voronovich. Small Slope Approximation in wave scattering by rough surface. *Sov. Phys.*, 62 :65–70, 1985.

[129] X. Wang, Y.B. Gan, and L.W. Li. Electromagnetic scattering by partially buried PEC cylinder at the dielectric rough surface interface : TM case. *IEEE Antennas and Wirless Prop. Letters*, 2 :319–322, 2003.

[130] K.F. Warnick and W.C. Chew. Numerical simulation methods for rough surface scattering. *Waves in Random Media*, 11 :R1–R30, 2001.

[131] K.W. Whites and F. Wu. Numerical computation of the effective quasistatic permitivity for isotropic lattices of complex shaped inclusions. In *International Bianisotropics Conference*, 2000.

[132] B. Yang and C. Rappaport. Response of realistic soil for GPR applications with 2D FDTD. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing*, 39(6) :1198–1205, june 2001.

[133] P. Yang, K.N. Liou, M.I. Mishchenko, and B.C. Gao. Efficient Finite Difference Time Domain scheme for light scattering by dielectric particles : application to aerosols. *Aplied Optics*, 39 :3727–3737, 2000.

[134] K.S. Yee. Numerical solution of initial boundary values problems involving Maxwell equation in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 14 :302–307, 1996.

[135] G. Zacharakis. *Time-resolved sudies of light transport through highly scattering media. Application in optical characterization of tissue (optical mammography) and light amplification.* PhD thesis, University of Crete, 2002.

[136] L.M. Zurk, L. Tsang, and D.P. Winebrenner. Scattering properties of dense media from Monte Carlo simulations with application to active remote sensing of snow. *Radio Science*, 31 :803–819, 1996.