



# Modélisation des propriétés radiatives des suies issues de combustions incomplètes au moyen de l'approximation dipolaire discrète

Gizem Okyay, Franck Enguehard

## ► To cite this version:

Gizem Okyay, Franck Enguehard. Modélisation des propriétés radiatives des suies issues de combustions incomplètes au moyen de l'approximation dipolaire discrète. Congrès Français de Thermique, Jun 2014, Lyon, France. <hal-01287537>

HAL Id: hal-01287537

<https://hal-centralesupelec.archives-ouvertes.fr/hal-01287537>

Submitted on 13 Mar 2016

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

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

# Modélisation des propriétés radiatives des suies issues de combustions incomplètes au moyen de l'approximation dipolaire discrète

Gizem OKYAY<sup>1,2\*</sup>, Franck ENGUEHARD<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>CNRS, UPR 288 Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C), Grande Voie des Vignes, 92295 Châtenay-Malabry, France

<sup>2</sup>École Centrale Paris, Grande Voie des Vignes, 92295 Châtenay-Malabry, France

\* (auteur correspondant : gizem.okyay@ecp.fr)

**Résumé** - Dans cette étude, nous cherchons à quantifier les propriétés radiatives de suies de combustions incomplètes afin de les intégrer dans les propriétés radiatives effectives de mélanges {suies + gaz de combustion}. L'approximation dipolaire discrète est utilisée pour évaluer les sections efficaces de diffusion, d'absorption et d'extinction et la fonction de phase des agrégats de suie. Cette théorie permet de prendre en compte la complexité morphologique de ces agrégats dans le calcul de leur interaction avec le rayonnement. De premiers calculs de propriétés radiatives de suies effectués sur des agrégats virtuels représentatifs sont présentés ; ils démontrent l'intérêt de notre approche par rapport aux méthodes traditionnelles.

## Nomenclature

$C$	section efficace, $m^2$	$\lambda$	longueur d'onde, $nm$
$D_f$	dimension fractale	$k$	vecteur d'onde
$k_f$	préfacteur fractal	$N_D$	nombre de dipôles
$d_p$	diamètre d'un monomère, $nm$	<i>Indices et exposants</i>	
$N_p$	nombre de monomères par agrégat	ext	extinction
$m$	indice optique complexe	abs	absorption
$\delta$	taille des éléments de volume, $nm$	sca	diffusion
$x$	paramètre de taille	ave	moyenne directionnelle

## 1. Introduction

De nos jours, les suies sont l'objet d'études dans des domaines très variés. Nous nous intéressons à leur interaction avec le rayonnement afin d'améliorer le design des chambres de combustion.

Dans notre travail, nous considérons les suies produites dans les flammes des procédés de reformage du méthane. Différents phénomènes chimiques et physiques conduisent à la formation de particules primaires approximativement sphériques (encore appelées monomères) puis d'agrégats de suies dans la flamme [1]. Or, les monomères ayant des diamètres de l'ordre de la dizaine de nanomètres, les agrégats de suies, constitués de plusieurs centaines de ces monomères, sont susceptibles d'atteindre des tailles de plusieurs centaines de nanomètres, i.e. des tailles voisines des longueurs d'onde caractéristiques du rayonnement thermique à haute température. Dans ces conditions, la morphologie complexe de ces agrégats ne peut plus être ignorée car le rayonnement est à même de sonder l'agencement spatial de la matière en leur sein.

Les informations de taille non négligeable et de morphologie irrégulière impliquent la nécessité de prendre en main d'autres outils de modélisation que les méthodes classiques qui ne sont valides que dans des configurations restreintes, comme par exemple la théorie de Mie

qui ne s'applique qu'aux particules sphériques. D'autres méthodes, comme la GMM (solution de Mie généralisée pour multiples particules sphériques) et la technique dite « T-Matrix » [2], proposent des solutions exactes pour des agrégats de sphères mais ne permettent pas de simuler le chevauchement des particules primaires ou d'autres formes complexes. Par ailleurs, par des comparaisons avec des calculs DDA, de tout récents travaux remettent en question la validité de la méthode RDG-FA (Rayleigh-Debye-Gans pour agrégats fractals) pour la modélisation de la diffusion et de l'absorption [3],[4]. Dans notre travail, nous cherchons à mettre en œuvre une méthode plus générale et applicable à tous types d'agrégats. Nous avons retenu une théorie électromagnétique dite « Approximation Dipolaire Discrète » (Discrete Dipole Approximation, ou DDA, en anglais), dont le principe est bien connu [5],[6]. Bien que différents codes de simulation DDA existent [7], nous avons développé notre propre outil numérique pour avoir plus de contrôle sur la résolution des problématiques que l'on va présenter aux paragraphes 3.2 et 4.1 et qui sont essentielles pour la détermination correcte des propriétés radiatives. L'algorithme est validé sur des géométries simples. Le code est ensuite appliqué à un agrégat de suie de méthane généré de manière informatique (au moyen d'un algorithme d'agrégation) et réputé représentatif de la morphologie d'une suie, et de premiers résultats de propriétés radiatives de cet agrégat sont présentés.

## 2. Les agrégats de suie

### 2.1. Description de la morphologie des agrégats

Dans une flamme de chambre de combustion, la morphologie des agrégats de suies et le nombre moyen de monomères par agrégat sont très dépendants des conditions opératoires comme la température, le type de combustible, le type et la richesse de la flamme [8].

Notre étude se limite à des suies d'hydrocarbures. Les particules primaires de ce type de combustible sont principalement composées de carbone et sont de forme à peu près sphérique [9]. Quant aux propriétés morphologiques des agrégats de suies (i.e. l'agencement spatial de la matière en leur sein), les techniques de microscopie actuelles ne permettent pas d'avoir accès à ces informations, qui constituent pourtant une donnée d'entrée fondamentale de la modélisation DDA. Les quelques études que l'on peut trouver dans la bibliographie sur ce sujet proposent une description globale et fractale des agrégats, via les notions de dimension et de préfacteur fractals [10]. Le Tableau 1 recense les informations morphologiques fournies par différentes équipes pour des agrégats de suies proches de nos intérêts ; on constate que si la valeur de 1.7 pour la dimension fractale  $D_f$  fait à peu près consensus, la valeur du préfacteur fractal  $k_f$  est plus dispersée (entre 1.2 et 7.9).

Référence de l'article	$d_p$	$N_p$	$D_f$	$k_f$
Samson et al. (1987)	20 - 30	5 - 200	1.5 - 1.6	-
Gangopadhyay et al. (1990)	-	-	1.6	2.18
Megaridis et al. (1990)	12 - 22	5 - 200	1.62 - 1.74	1.80
Köylü et al. (1995)	-	-	1.65	2.71
Cai et al. (1995)	-	-	1.74	1.23
Cai et al. (1995)	-	-	1.74	2.45
Sorensen et al. (1992)	-	-	1.73	-
Lee et al. (2000)	20	10 - 180	1.93	7.91
Lee et al. (2000)	11 - 22	10 - 600	1.75	6.46

Tableau 1 : Propriétés morphologiques d'agrégats de suie d'hydrocarbures trouvées dans la bibliographie.

Parmi tous ces travaux, ce sont ceux de Lee et al. (2000) (dernière ligne du Tableau 1) qui sont les plus proches de nos préoccupations : en effet, ils concernent des agrégats de suies issus de la combustion de méthane avec 50% d'air et 50% d'O<sub>2</sub>. Nous retiendrons donc pour la suite de ce travail l'ensemble de paramètres suivants pour caractériser la morphologie de nos agrégats :  $d_p \approx 20$  nm,  $N_p \approx 500$ ,  $D_f \approx 1.7$  et  $k_f \approx 6.5$ .

## 2.2. Génération numérique d'agrégats représentatifs

Nous avons pallié notre connaissance limitée de la morphologie des agrégats en mettant en œuvre des procédures de génération numérique d'agrégats virtuels représentatifs, i.e. présentant des nombres de monomères  $N_p$  et des propriétés fractales ( $D_f$ ,  $k_f$ ) en accord avec les données identifiées ci-dessus. Pour ce faire, nous avons utilisé un outil informatique produit par Mackowski [11] qui, sur la base de divers algorithmes d'agrégation, génère des structures 3D fractales de sphères de caractéristiques ( $N_p$ ,  $D_f$ ,  $k_f$ ) imposées par l'utilisateur. A titre d'exemple, la Figure 1 montre un de ces agrégats virtuels représentatifs.

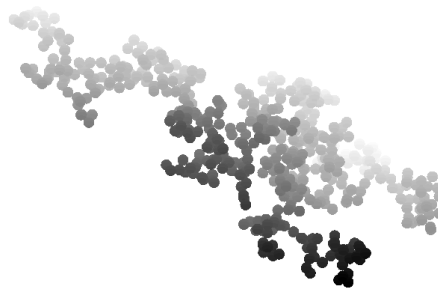


Figure 1 : Un agrégat virtuel de suie représentatif de la combustion de méthane, généré avec l'algorithme DLCCA, ayant les propriétés morphologiques suivantes :  $N_p = 500$ ,  $D_f = 1.7$ ,  $k_f = 2.0$ .

## 3. L'approximation dipolaire discrète

Dans la bibliographie, il existe différentes techniques numériques résolvant le problème de l'interaction entre un rayonnement électromagnétique et un obstacle matériel de forme complexe, comme la FDTD (pour « Finite Difference Time Domain », discrétisation par différences finies résolue en temps), la méthode classique des éléments finis, et la DDA (pour « Discrete Dipole Approximation », discrétisation de l'obstacle matériel en une multitude de dipôles oscillants ponctuels). Après avoir comparé ces différentes approches [12], nous avons retenu la DDA, qui nous est apparue comme étant particulièrement adaptée pour le calcul de l'interaction entre un rayonnement et un objet constitué de particules agrégées des points de vue de la discrétisation et de l'effort subséquent de calcul des sections efficaces. Pour nos études, le passage par la FFT (Fast Fourier Transform [13]) s'avère inutile car comme nous le verrons plus loin, des discrétisations de faibles tailles de nos agrégats suffisent pour les calculs DDA.

### 3.1. Théorie électromagnétique de DDA

Cette théorie est à présent bien établie [5]. Elle repose sur une discrétisation de la matière constituant l'objet interagissant avec le rayonnement en éléments de volume suffisamment petits : Draine [14] préconise une taille caractéristique des éléments de volume  $\delta$  bornée par le critère  $|m|k\delta < 1$  ou  $m$  est l'indice optique complexe du matériau et  $k = 2\pi/\lambda$  est le vecteur d'onde de l'éclairement ( $\lambda$  désignant sa longueur d'onde). Sous l'effet du rayonnement électromagnétique incident, les petits éléments de volume de la discrétisation se comportent comme autant de dipôles oscillants qui interagissent entre eux. Les moments dipolaires induits dans tous ces éléments de volume peuvent être calculés, ensuite les sections efficaces

d'absorption et de diffusion et la fonction de phase de diffusion de l'assemblée de dipôles oscillants.

### 3.2. Implémentation numérique de l'algorithme de DDA

Les équations de la DDA font intervenir la notion de polarisabilité. Nous calculons cette grandeur via la formulation de Clausius-Mossotti avec correction de la réaction radiative proposée par Draine [14] (formulation dite RRCM). Le système d'équations à résoudre est alors un système linéaire de matrice complexe symétrique. La méthode du gradient conjugué, inspirée de l'algorithme original de Fletcher et Reeves [15], est choisie pour sa rapidité de convergence pour ce type de système.

Notre code est écrit en C++ et est parallélisé en MPI/OpenMPI à des fins de réduction du temps de calcul. Un effort particulier a été porté sur le choix de nouvelles méthodes numériques d'intégration directionnelle pour le calcul de la section efficace de diffusion et de prise de moyenne directionnelle des sections efficaces d'interaction. Selon Okada [16], les moyennes directionnelles des sections efficaces peuvent être calculées de deux manières : par moyenne arithmétique, ou en faisant appel à des quadratures spécifiques. D'autre part, le calcul de la section efficace de diffusion nécessite une intégration directionnelle sur  $4\pi$  stéradians. Faute d'expressions analytiques pour ces grandeurs, on a adopté la méthode des ordonnées discrètes utilisant les quadratures de type « Sn » proposées par Lemonnier [17] avec les valeurs de Balsara [18]. Les quadratures de Lebedev-Laikov (optimisées pour des solutions en coordonnées sphériques) proposées par Penttila et Lumme [19] ont aussi été testées. Finalement on a retenu les quadratures de Balsara qui nous ont semblé présenter le meilleur compromis entre facilité d'utilisation, temps de calcul et précision des résultats.

## 4. Applications et résultats

Les simulations à venir ont été réalisées pour deux types de matériaux :

- Matériau carboné absorbant représentatif des suies ; le but ici est de déterminer les propriétés radiatives des suies de méthane. On a retenu une valeur moyenne du spectre d'indice optique complexe cité dans les travaux de Van-Hulle [20] :  $m = 2.0 + 0.5i$ .
- Matériau non absorbant, car la DDA a déjà été testée et validée sur des matériaux de ce genre dans des travaux antérieurs [5],[6]. La valeur retenue est :  $m = 2.0 + 5 \cdot 10^{-5}i$ .

Dans tous les calculs qui suivent, le diamètre des monomères sphériques est fixé à la valeur  $d_p = 20$  nm.

### 4.1. Validation de notre algorithme de DDA

Les sections efficaces d'interaction et la fonction de phase de diffusion pour un monomère sphérique sont calculées au moyen de la DDA, puis ces grandeurs sont comparées à leurs analogues fournies par la théorie de Mie. Concernant la DDA, nous prenons ici le parti de représenter le monomère par un dipôle unique.

Le graphe de la Figure 2 montre, pour différentes valeurs du paramètre de taille  $x = \pi d_p / \lambda$  du monomère, l'écart relatif entre les résultats DDA et ceux de Mie ; le diamètre du monomère étant fixé, on balaye donc en longueur d'onde, de  $0.31 \mu\text{m}$  à  $6.3 \mu\text{m}$ . On constate que dans tous les cas examinés, lorsque  $x \leq 0.09$ , l'écart relatif est inférieur à 1%. Or pour nos applications, avec un diamètre  $d_p$  des monomères de 20 nm et des longueurs d'onde d'intérêt  $\lambda$  comprises entre 1 et  $10 \mu\text{m}$ , le paramètre de taille ne dépassera pas 0.063. En outre, pour la plage de longueur d'onde balayée à la Figure 2, la valeur maximum du paramètre  $|m|k\delta$  de

Draine est 0.8 pour le matériau absorbant et 0.6 pour le matériau non absorbant. On pourra donc représenter chaque monomère d'un agrégat par un dipôle unique dans nos calculs DDA.

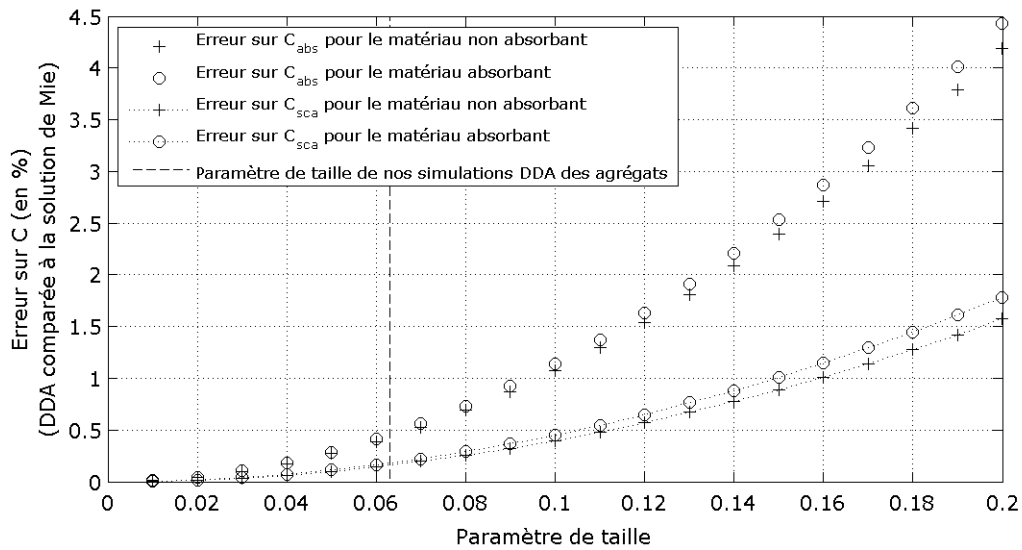


Figure 2 : Sections efficaces d'absorption et de diffusion issues de la DDA comparées à celles de Mie pour un monomère de matériau non absorbant et un monomère de suie (1 dipôle par monomère pour la DDA).

La discrétisation {1 monomère = 1 dipôle} est un choix judicieux qui réduit considérablement l'effort de calcul DDA sur les agrégats, car le temps de calcul est proportionnel à  $(N_D)^2$  où  $N_D$  est le nombre de dipôles par monomère dans la simulation DDA. Un autre avantage de cette discrétisation est de rester dans les limites d'applicabilité de la DDA pour les matériaux à  $|m|$  élevé, comme l'illustre la Figure 3 qui montre l'écart relatif de la section efficace d'extinction DDA par rapport à celle de Mie pour un monomère sphérique de diamètre 20 nm discrétisé en différents nombres de dipôles et constitué de matériaux à  $|m|$  différents. Tandis que la discrétisation {1 monomère = 1 dipôle} fournit dans tous les cas un résultat très proche de la solution de Mie, les discrétisations plus fines induisent des écarts plus ou moins importants, d'autant plus importants que  $|m|$  est plus grand, à cause d'interactions de surface mal exprimées par la polarisabilité RRCM.

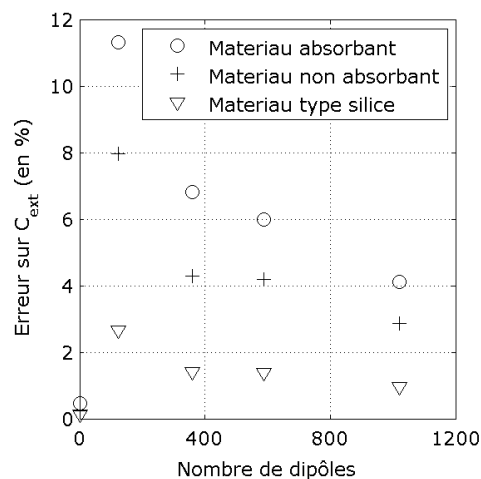


Figure 3 : Ecart relatif des sections efficaces d'extinction issues de la DDA à celles de Mie ( $|\Delta C|/C_{Mie}$ ) pour un monomère de diamètre 20 nm éclairé par un rayonnement de longueur d'onde 1  $\mu\text{m}$ , discrétisé en différents nombres de dipôles et constitué de 3 matériaux différents : absorbant ( $m = 2.0 + 0.5i$  et  $|m|kd_p = 0.26$ ), non absorbant ( $m = 2.0 + 5 \cdot 10^{-5}i$  et  $|m|kd_p = 0.26$ ), et de type silice ( $m = 1.45 + 5 \cdot 10^{-5}i$  et  $|m|kd_p = 0.26$ ).

Il est prouvé dans les travaux de Draine [21] et de Chaumet et al. [22] que la polarisabilité RRCM n'est pas adaptée à la modélisation des interactions pour les matériaux très absorbants, et qu'elle n'est correcte que si la distance entre les dipôles est assez grande et si les dipôles sont loin de la surface de la matière considérée. Nous sommes en train d'examiner de nouveaux modèles de polarisabilité spécialement adaptés aux matériaux absorbants [21],[22] ; ces nouveaux modèles sont plus complexes d'implantation dans notre code, et dépendent entre autres de la polarisation de l'éclairement incident, ce qui rend le calcul des sections efficaces plus délicat.

#### 4.2. Calcul DDA des propriétés radiatives d'un agrégat représentatif de suie

Un agrégat numérique représentatif d'une suie de méthane a été utilisé en tant que donnée d'entrée de notre code DDA ; il est représenté à la Figure 1. Le diamètre des particules primaires est toujours fixé à la valeur  $d_p = 20$  nm. Nous avons examiné l'interaction {rayonnement / agrégat} à une longueur d'onde relativement petite ( $1 \mu\text{m}$ ) où les effets d'interaction entre monomères sont importants. Pour cette simulation, on a retenu la valeur  $m = 2.0 + 0.5i$  pour l'indice optique complexe du matériau (valeur représentative des suies). Le critère de Draine appliqué à une particule primaire donnant la valeur  $|m|k d_p = 0.26$ , nous avons retenu la discrétisation spatiale {1 particule = 1 dipôle} pour le calcul DDA.

Nous avons constaté que la dépendance des sections efficaces d'interaction de l'agrégat en fonction de la direction d'incidence de l'éclairement, présentée à la Figure 4 (figure de gauche) pour la section efficace d'extinction, est faible pour l'agrégat de suie. Cette particularité est corrélée au caractère très absorbant des suies. En effet, toutes choses égales par ailleurs, si on donne à l'indice optique complexe la valeur :  $m = 2.0 + 5 \cdot 10^{-5}i$ , le taux de variation autour de la valeur moyenne est beaucoup plus grand, comme on peut le voir à la Figure 4 (figure de droite).

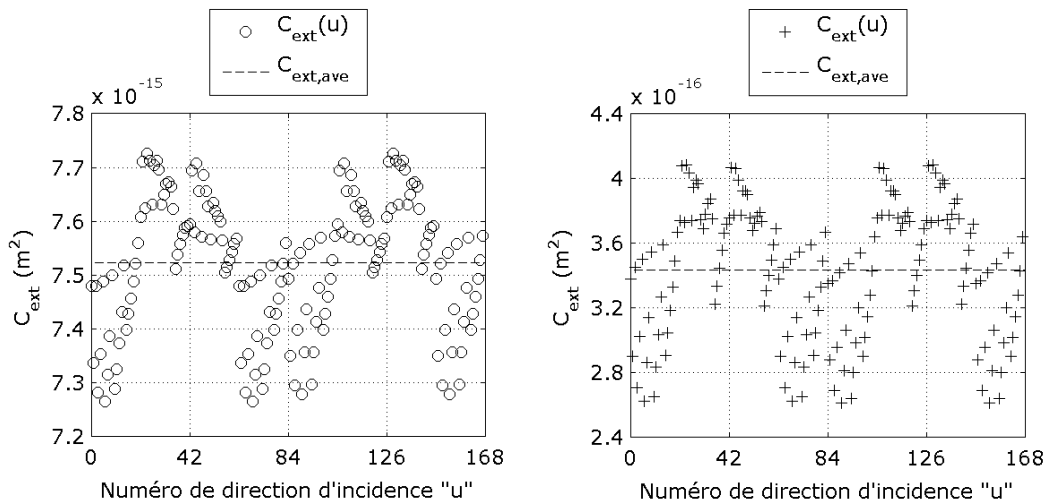


Figure 4 : Dépendance de la section efficace d'extinction de l'agrégat d'étude en fonction de la direction d'incidence de l'éclairement ; figure de gauche : matériau absorbant ; figure de droite : matériau non absorbant.

Une fois les moments dipolaires résolus et les sections efficaces d'interaction directionnelles de l'agrégat évaluées, on peut calculer les moyennes directionnelles de ces grandeurs puis les comparer à celles issues de la théorie de Mie appliquée à une sphère de volume matériel égal à celui de l'agrégat. On constate dans le Tableau 2 que les sections efficaces calculées via la DDA sur l'agrégat d'une part, et via la théorie de Mie sur la sphère

de volume équivalent d'autre part, sont sensiblement différentes. Ce résultat, qui était attendu, met en lumière l'intérêt de prendre finement en compte l'agencement spatial de la matière au sein des suies dans les calculs de propriétés radiatives.

<i>Type de section efficace</i>	<i>DDA (<math>m^2</math>)</i>	<i>Théorie de Mie (<math>m^2</math>)</i>	<i>Écart relatif (%)</i>
Extinction	7.52e-15	9.18e-15	23
Absorption	7.10e-15	8.08e-15	14
Diffusion	4.23e-16	1.10e-15	160

Tableau 2 : Valeurs des sections efficaces calculées pour l'agrégat représenté à la Figure 1 ; l'écart relatif est défini par  $|\Delta C|/C_{DDA}$ .

## 5. Conclusions et perspectives

Nous avons développé et validé notre propre outil de modélisation DDA, ensuite nous avons examiné l'interaction {rayonnement / agrégat de suie de méthane} à une longueur d'onde relativement petite (1  $\mu\text{m}$ ) où les effets d'interaction entre monomères sont importants.

Les cas de validation que nous avons traités nous ont permis de vérifier les limites d'applicabilité (connues) de la DDA pour les matériaux absorbants. Nous travaillons actuellement à améliorer notre code DDA en y injectant des lois de polarisabilité qui gèrent correctement les matériaux très absorbants comme les suies, difficulté qui ne nous semble pas être traitée à l'heure actuelle de manière fiable par les codes DDA existants.

Nos calculs DDA sur un agrégat représentatif ont montré tout l'intérêt d'utiliser cette technique de modélisation sensible à la morphologie de nos objets d'étude. Par ailleurs, nous avons constaté que la dépendance des sections efficaces d'interaction en fonction de la direction d'incidence du rayonnement était faible, et nous avons prouvé que cette particularité était corrélée au caractère fortement absorbant des suies.

Pour nos futurs travaux de détermination des propriétés radiatives des mélanges gazeux ensemencés de suies, l'information de fraction volumique des suies et de son éventuelle non-uniformité au sein de la chambre de combustion sera essentielle. Le travail pourra alors évoluer en fonction de la considération de l'uniformité (ou non) des propriétés radiatives effectives du mélange {suies + gaz} au sein de la chambre.

## Références

- [1] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R., *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, (1996) Springer.
- [2] Mishchenko, M. I., Liu, L., Mackowski, D. W., T-matrix modeling of linear depolarization by morphologically complex soot and soot-containing aerosols, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 123 (2013), 135-144.
- [3] Berg, M., Sorensen, C., Internal fields of soot fractal aggregates, *J. Opt. Soc. Am. A*, 30 (2013), 1947-1955.
- [4] Soewono, A., Rogak, S. N., Morphology and Optical Properties of Numerically Simulated Soot Aggregates, *Aerosol Science and Technology*, 47 (3) (2013), 267-274.
- [5] Enguehard, F., Mie Theory and the Discrete Dipole Approximation. Calculating Radiative Properties of Particulate Media, with Application to Nanostructured Materials, in S. Volz,



- Thermal Nanosystems and Nanomaterials, Topics in Applied Physics*, 118 (2009), 151-212, Springer Verlag Berlin Heidelberg.
- [6] Lallich, S., *Détermination expérimentale et modélisation des propriétés radiatives de matrices nanoporeuses de silice*, thèse de doctorat, INSA Lyon (2009).
- [7] Yurkin, M. A., Hoekstra, A. G., The discrete dipole approximation: an overview and recent developments, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 106 (1) (2007), 558-589.
- [8] Fuller and Mackowski, Electromagnetic Scattering by Compounded Spherical Particles, in Mischenko et al., *Light Scattering by Nonspherical Particles*, (2000) 225-272, Academic Press.
- [9] Koylu, U.O., Faeth, G. M., Farias, T.L., Carvalho M.G., Fractal and Projected Structure Properties of Soot Aggregates, *Combustion and Flame*, 100 (1995), 621- 633.
- [10] Megaridis, C.M., Dobbins, R.A. Morphological Description of Flame-Generated Materials, *Combustion Science and Technology*, 71 (1990) 95-109.
- [11] Mackowski, D. W., A simplified model to predict the effects of aggregation on the absorption properties of soot particles, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 100 (2006), 237-249.
- [12] Yurkin, M.A., Computational Approaches for Plasmonics, in F. Della Sala and S. D'Agostino, *Handbook of Molecular Plasmonics* (2013) Pan Stanford Publishing Pte.
- [13] Goodman, J. J., Draine, B. T., Flatau, P. J., Application of fast-Fourier-transform techniques to the discrete-dipole approximation, *Opt. Lett.*, 16 (1991), 1198–1200.
- [14] Draine, B. T. , The Discrete Dipole Approximation and Its Application to Interstellar Graphite Grains, *Astrophys. J.*, 333 (1988), 848-872.
- [15] Press et al., *Numerical Recipes in C*, Second Ed. (1992).
- [16] Okada Y. Efficient numerical orientation averaging of light scattering properties with a quasi-Monte-Carlo method, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 109 (9) (2008), 1719–42.
- [17] Lemonnier, D., Solution of the Boltzmann Equation for Phonon Transport, in S. Volz, *Thermal Nanosystems and Nanomaterials, Topics in Applied Physics*, 107 (2007), 77-106, Springer Verlag Berlin Heidelberg.
- [18] Balsara, D., Fast and accurate discrete ordinates methods for multidimensional radiative transfer. Part I, basic methods, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 69 (2001), 671-707.
- [19] Penttilä A, Lumme K. Optimal cubature on the sphere and other orientation averaging schemes, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 112 (11) (2011), 1741–6.
- [20] Van-Hulle, P., *Caractérisation des Aérosols Emis par la Combustion des Hydrocarbures : Application à la Mesure de l'Indice de Réfraction des Suies*, thèse de doctorat, INSA Rouen (2002).
- [21] M. Collinge and B. Draine, Discrete-dipole approximation with polarizabilities that account for both finite wavelength and target geometry, *J. Opt. Soc. Am. A*, 21 (2004), 2023-2028.
- [22] Rahmani, A., Chaumet P. C., Bryant, G. W., On the importance of local-field corrections for polarizable particles on a finite lattice: application to the discrete dipole approximation. *Astrophys. J.*, 607 (2) (2004), 873.

## Remerciements

Les auteurs souhaitent exprimer leur gratitude à la chaire industrielle OXYTEC de l'Ecole Centrale Paris, dirigée et financée en collaboration entre le laboratoire EM2C, Air Liquide, l'ANR et le CNRS, pour le soutien de cette recherche.