

# Détermination des propriétés radiatives de micro-organismes photosynthétiques et inversion à partir d'analyse spectroscopique

Stéphane Blanco<sup>2</sup>, Jean-François Cornet<sup>1</sup>, Jérémie Dauchet<sup>1,2,3</sup>,  
Mouna El Hafi<sup>3</sup>, Richard Fournier<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Génie Chimique et Biochimique (**LGCB**) EA3866, Université Blaise Pascal, ClermontFerrand II.

<sup>2</sup>Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie (**LAPLACE**) UMR5213, Université Paul Sabatier Toulouse III.

<sup>3</sup>Centre de Recherche d'Albi en génie des Procédés des Solides Divisés, de l'Energie et de l'Environnement (**RAPSODEE**) FRE CNRS 3213, Ecole des Mines d'Albi Carmaux.

# Sommaire

- 1 Introduction
  - Les applications, les attentes
  - Présentation globale de la chaîne méthodologique
- 2 Les micro-organismes photosynthétiques
  - Formes et tailles
  - Indice de réfraction
- 3 La chaîne méthodologique point par point
  - Formes et tailles
  - Indice de réfraction effectif spectral
  - Résolution de l'interaction avec un rayonnement
  - Bilan
- 4 Inversion à partir d'analyse spectroscopique
- 5 Validation
- 6 Positionnement de ce travail

# Que cherche-t-on, et avec quel précision ?

## Communautés :

- Océanographie
- Photobioréacteurs

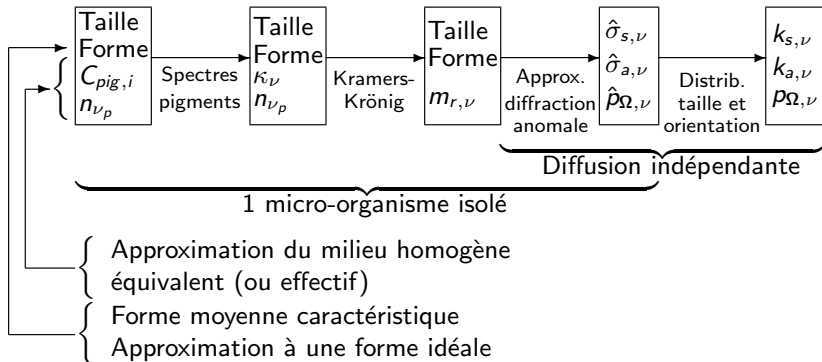
## Intérêt :

- Résoudre les transferts radiatifs dans les suspensions aqueuses de micro-organismes photosynthétiques
- Les propriétés radiatives du milieu ( $k_{s,\nu}$ ,  $k_{a,\nu}$ ,  $p_{\Omega,\nu}(\omega|\omega')$ ) sont les paramètres d'entrée de l'équation de transfert radiatif (ETR)

## Diffusion indépendante :

- Propriétés radiatives de chaque particule isolée :  $\hat{\sigma}_{s,\nu}$ ,  $\hat{\sigma}_{a,\nu}$ ,  $\hat{p}_{\Omega,\nu}(\omega|\omega')$
- Distribution des particules (ici, distributions des tailles et des orientations)

# La chaîne méthodologique



# Formes et tailles

## Grande diversité de formes :



## Tailles :

- Grande gamme de tailles :  $100 \text{ nm} \rightarrow 10 - 100 \mu\text{m}$
- Au sein d'une même espèce, distribution de taille log-normal

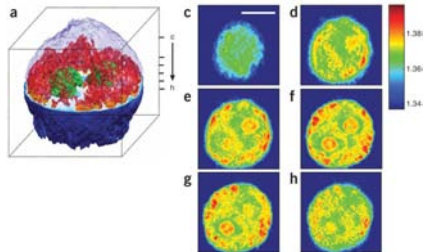
# Indice de réfraction complexe : hétérogénéité

## Partie réelle :

- Variation dans tout le volume
- Une structure interne, un indice

## Partie imaginaire :

- Absorption uniquement due à la présence de pigments
- Non-nulle uniquement dans les structures contenant les pigments



HeLa cell. Tomographic phase microscopy at  $\lambda = 633 \text{ nm}$  [Choi et al., 2007]

## Difficultés associées aux hétérogénéités :

- Description complexe (maillage 3D ?,  $\{ \text{formes, position, orientation} \}_i$  ?)
- Structure non représentative de l'ensemble de la population
- Propriétés radiatives sur la distribution des structures

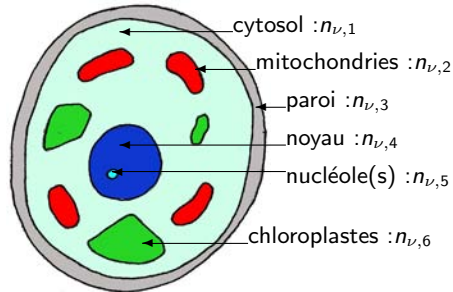
# Indice de réfraction complexe : hétérogénéité

## Partie réelle :

- Variation dans tout le volume
- Une structure interne, un indice

## Partie imaginaire :

- Absorption uniquement due à la présence de pigments
- Non-nulle uniquement dans les structures contenant les pigments



## Difficultés associées aux hétérogénéités :

- Description complexe (maillage 3D ?,  $\{formes, position, orientation\}_i$  ?)
- Structure non représentative de l'ensemble de la population
- Propriétés radiatives sur la distribution des structures

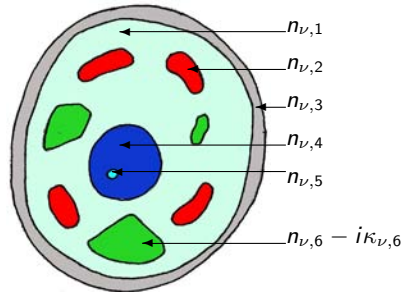
# Indice de réfraction complexe : hétérogénéité

## Partie réelle :

- Variation dans tout le volume
- Une structure interne, un indice

## Partie imaginaire :

- Absorption uniquement due à la présence de pigments
- Non-nulle uniquement dans les structures contenant les pigments



## Difficultés associées aux hétérogénéités :

- Description complexe (maillage 3D ?,  $\{ \text{formes, position, orientation} \}_i$  ?)
- Structure non représentative de l'ensemble de la population
- Propriétés radiatives sur la distribution des structures



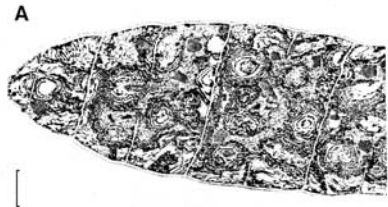
# Indice de réfraction complexe : hétérogénéité

## Partie réelle :

- Variation dans tout le volume
- Une structure interne, un indice

## Partie imaginaire :

- Absorption uniquement due à la présence de pigments
- Non-nulle uniquement dans les structures contenant les pigments



*Spiruline*. Microscopie électronique

## Difficultés associées aux hétérogénéités :

- Description complexe (maillage 3D ?,  $\{formes, position, orientation\}_i$  ?)
- Structure non représentative de l'ensemble de la population
- Propriétés radiatives sur la distribution des structures

# Une information structurelle unique pour une population

## Structure moyenne de la population :

- e.g sphère comprenant deux couches [Bernard et al., 2009]
- Problème : limitation des formes qu'il est possible de traiter

## Approximation du milieu effectif :

- Principe : indice de réfraction homogène équivalent
- Degrès de validité : erreurs sur l'énergie diffusée aux grands angles
- Intérêt : simplification importante, et donc possibilité de traiter des formes variées

## Des paramètres constants au sein d'une population :

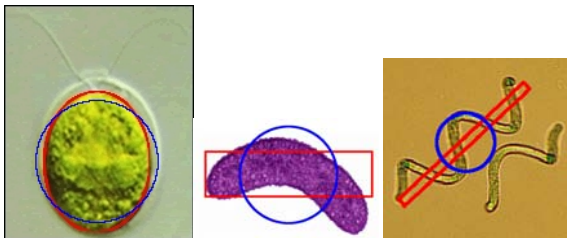
La fraction volumique et l'indice de réfraction de chaque structure interne :  $\{f, m_\nu\}_i$

# Détermination de la forme et de la distribution de taille

## Analyse d'image

### Choix d'une forme caractéristique / Forme idéale :

- Forme idéale : équation paramétrique



### Analyse d'image :

- Rayon max, rayon min, périmètre  $\Rightarrow$  paramètres de l'équation de la forme (e.g élancement)
- Aire  $\Rightarrow$  distribution de taille

# Détermination de l'indice de réfraction effectif spectral

## Partie imaginaire :

- Spectres d'absorption des pigments purs en conditions *in vivo*  
 $Ea_{pig,i}(\nu)$  : base de donnée ([Bidigare et al., 1990] + LGCB)
- Mesure de la concentration du micro-organisme en pigment  $i$  :  $C_{pig,i}$

$$\kappa_\nu = \frac{c}{4\pi\nu} \sum_i C_{pig,i} Ea_{pig,i}(\nu)$$

## Reconstruction de la partie réelle : relations de Kramers-Krönig

- Kramers-Krönig [Lucarini, 2005]

$$n_\nu = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\nu' \kappa_{\nu'}}{\nu'^2 - \nu^2} d\nu'$$

- Troncature au spectre visible et Kramers-Krönig soustractive

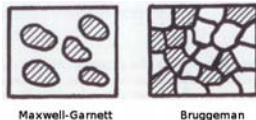
$$n_\nu = n_{\nu_p} + \frac{2(\nu^2 - \nu_p^2)}{\pi} P \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \frac{\nu' \kappa_{\nu'}}{(\nu'^2 - \nu^2)(\nu'^2 - \nu_p^2)} d\nu'$$

# Détermination de l'indice de réfraction effectif spectral

Point d'ancrage :

## Règles de composition :

- Matériau composite organisé suivant une certaine topologie



- Bruggeman pour un diélectrique [Mishchenko et al., 2000] :

$$\sum_j f_j \frac{n_j^2 - n_{vp}^2}{n_j^2 + 2n_{vp}^2} = 0$$

## Informatons disponibles :

- Fractions volumiques  $f_j$  : au cas par cas
- Partie réelle de l'indice de réfraction des structures  $n_j$  : bibliographie

# Choix d'une méthode de résolution du problème électromagnétique

## Les méthodes :

- Grand nombre de méthodes [Wriedt, 2009]
- Limitations : gamme de géométries et d'indices de réfraction

## Les micro-organismes photosynthétiques dans le visible :

- Gamme de paramètres de taille dans le visible : 4 – 400
- Peuvent être très éloignés de la sphère (allongés / aplatis)
- Indice de réfraction proche de celui de leur environnement

## Choix d'une méthode :

- Division du volume ou de la surface des particules en éléments ou sources discrètes
- Décomposition sur des bases de fonctions (T-Matrice, Lorenz-Mie...)
- Approximation de Rayleigh
- Approximation de l'optique géométrique
- Approximation de Rayleigh-Gans
- **Approximation de la diffraction anormale** [van de Hulst, 1981]

# Choix d'une méthode de résolution du problème électromagnétique

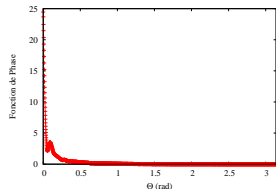
Constat identique dans d'autres communautés : particules minérales [Nousiainen, 2009], cristaux de glace [Baran, 2009]...

## Un choix entre deux approximations :

- Approximation sphère équivalente + Lorenz-Mie : Degrés de validité dépendant de la forme
- Forme + Approximation de la diffraction anormale : Erreurs sur l'énergie diffusée aux grands angles

## Approximation de la diffraction anormale :

- Utilisable car fonctions de phase "très vers l'avant"
- Problème pour l'estimation des puissances rétrodiffusées en diffusion simple :  
Téledétection en océanographie



# Détermination des propriétés radiatives

## Propriétés radiatives du milieu :

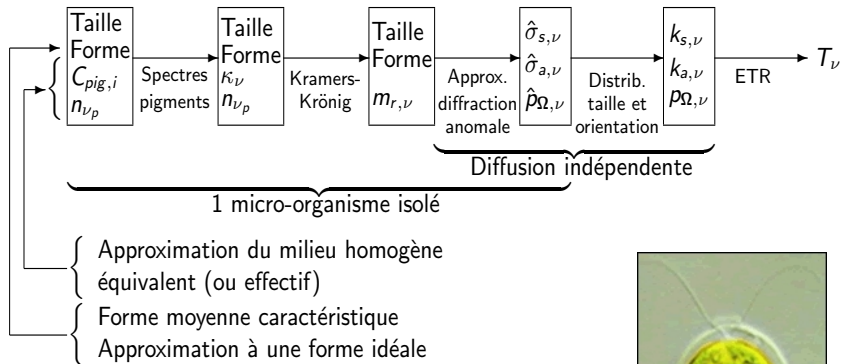
$$\sigma_{s,\nu} = \int_0^\pi d\theta_i \int_0^\infty dr_{eq} \frac{\sin\theta_i}{2} p_R(r_{eq}) \hat{\sigma}_{s,\nu}(\theta_i, r_{eq})$$

$$\sigma_{a,\nu} = \int_0^\pi d\theta_i \int_0^\infty dr_{eq} \frac{\sin\theta_i}{2} p_R(r_{eq}) \hat{\sigma}_{a,\nu}(\theta_i, r_{eq})$$

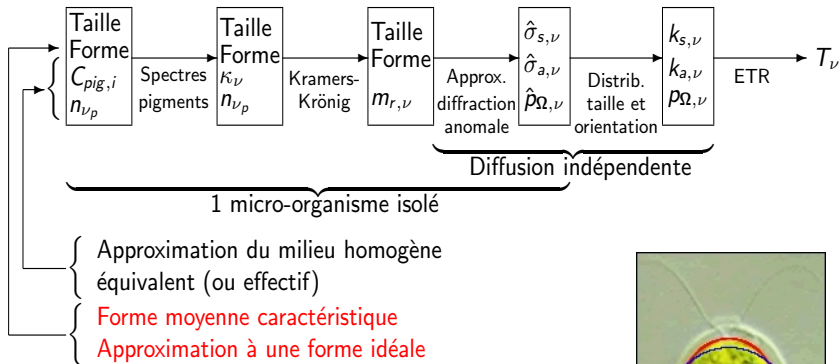
$$p_{\Omega,\nu}(\omega|\omega') = \frac{\int_0^\pi d\theta_i \int_0^\infty dr_{eq} \frac{\sin\theta_i}{2} p_R(r_{eq}) \hat{\sigma}_{s,\nu}(\theta_i, r_{eq}) \hat{p}_{\Omega,\nu}(\omega|\omega';\theta_i, r_{eq})}{\sigma_{s,\nu}}$$



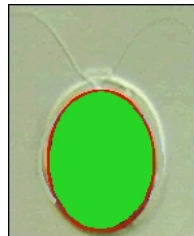
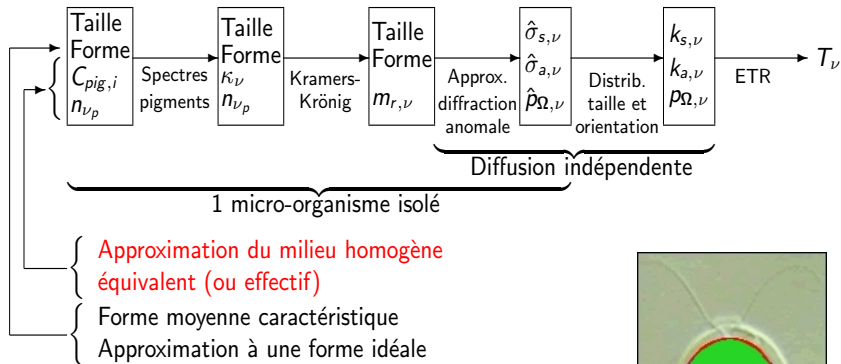
# Bilan



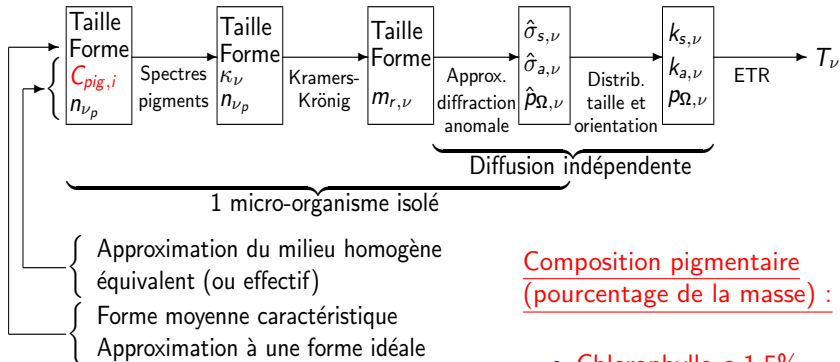
# Bilan



# Bilan

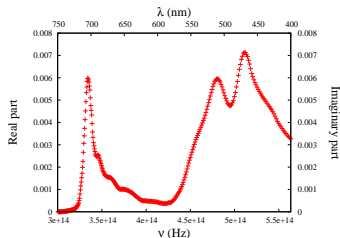
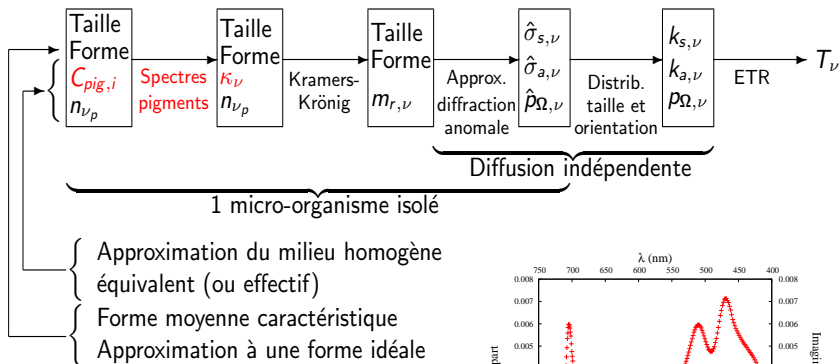


# Bilan

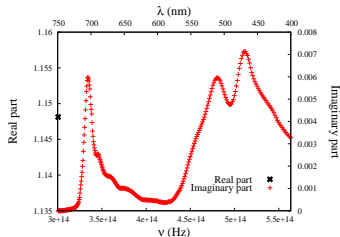
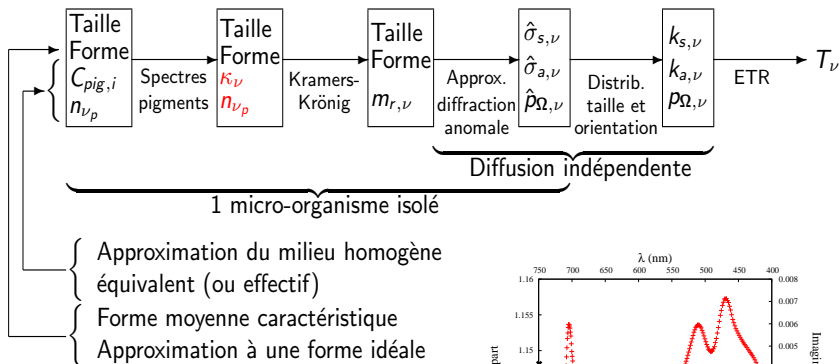


- Chlorophylle *a* 1.5%
- Chlorophylle *b* 0.8%
- Caroténoïdes de protection 0.45%

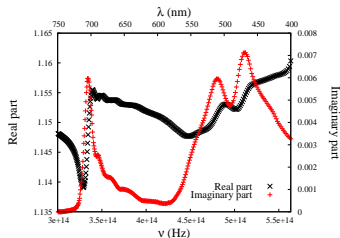
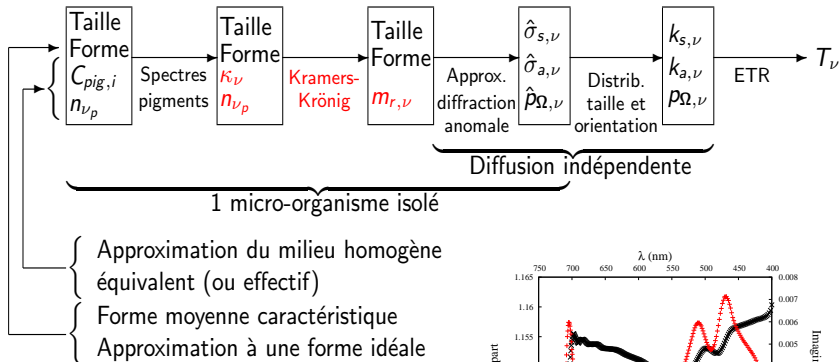
# Bilan



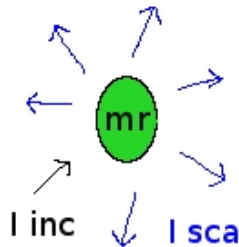
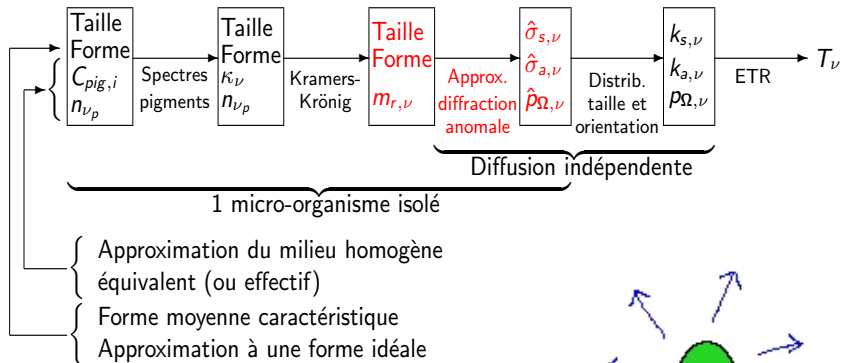
# Bilan



# Bilan

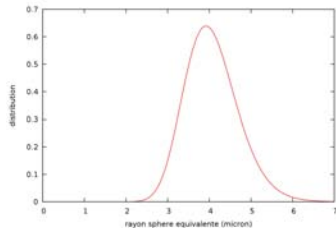
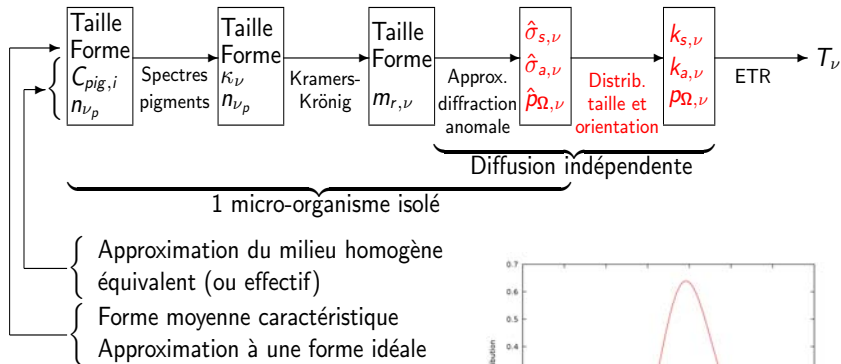


# Bilan

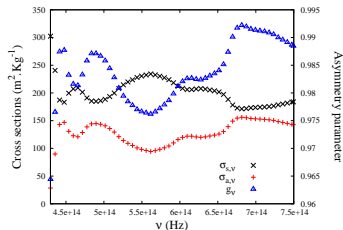
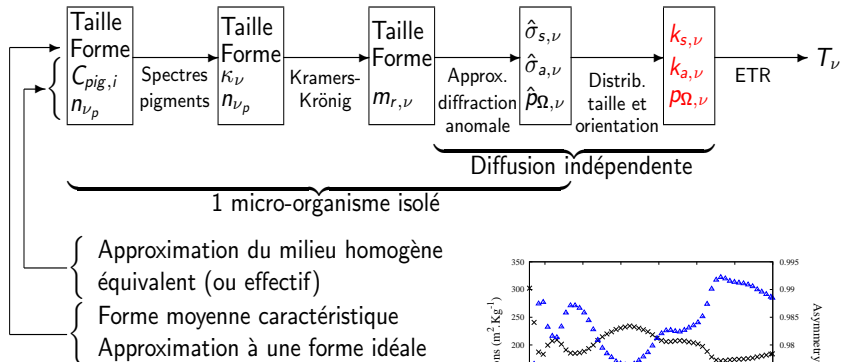




# Bilan

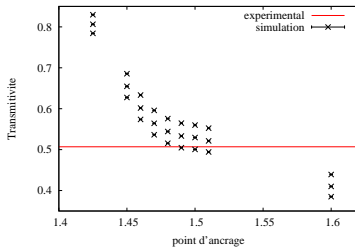
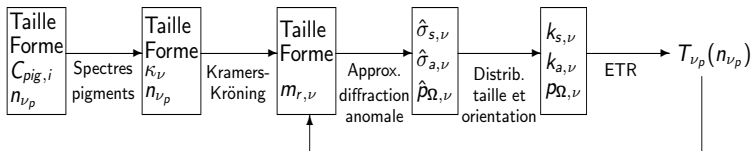


# Bilan

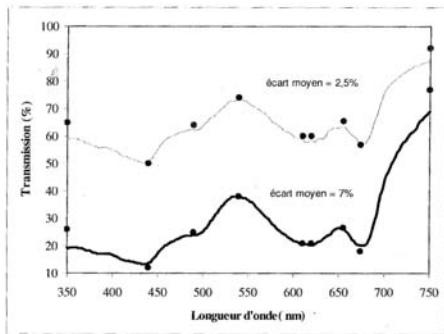


# Détermination du point d'ancrage par inversion

## Mesure d'une transmittivité grâce à une sphère d'intégration



# Comparaison des spectres de transmittivité théoriques et mesurés



**Figure III.10 :** Comparaisons entre les transmissions obtenues à la sphère d'intégration sur des suspensions d'*Arthrospira platensis* PCC 8005 (traits continus) et les transmissions calculées à partir des propriétés optiques et radiatives (ronds noirs) prédictives. Deux échantillons sont représentés : un échantillon dilué (trait fin) de concentration en biomasse 0,20 g/L (épaisseur optique  $\tau_L$  environ 1,5), et un échantillon concentré (trait épais) de concentration 0,60 g/L (épaisseur optique  $\tau_L$  environ 5).

# Une brique élémentaire de l'étude et de l'optimisation des photobioréacteurs

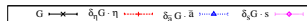
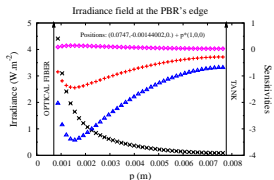
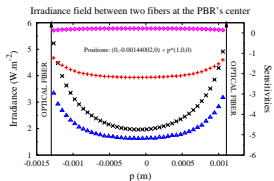


Photobioréacteur DiCoFluV (LGCB)



Géométrie utilisée dans l'environnement de développement EDStar

Résolution des champs de radiation et de leur sensibilités par méthode Monte Carlo :



**Merci pour votre attention**

# Limite des régimes de diffusion dépendante et indépendante

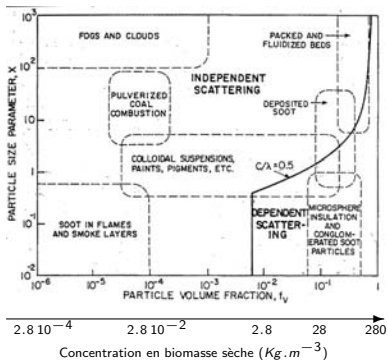


FIG.: Limite des régimes de diffusion simple et dépendante [Tien and Drolen, 1987]

Rhodospirillum :

$$x_{min} = 6.5$$

Concentration limite :  $52 \text{ Kg.m}^{-3}$

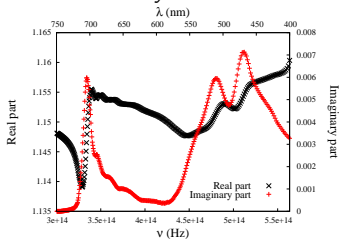
Spiruline :

$$x_{min} = 102$$

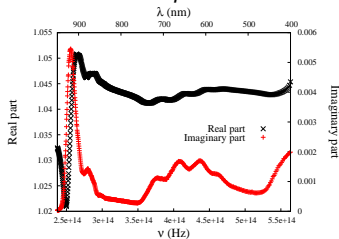
Concentration limite :  $235 \text{ Kg.m}^{-3}$

# Exemples de spectres d'indice de réfraction relatif

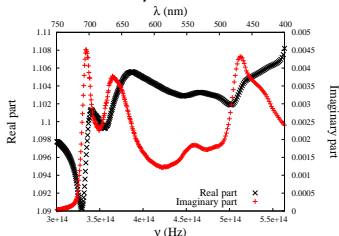
*Chlamydomonas*



*Rhodospirillum*



*Spiruline*





## Ordres de grandeur

- Sections efficaces :  $\sigma_s = 650 \text{ m}^2.\text{Kg}^{-1}$ ,  $\sigma_a = 150 \text{ m}^2.\text{Kg}^{-1}$
- Paramètre d'asymétrie :  $g = 0.8$
- Concentration :  $\eta = 5 - 10 \text{ Kg.m}^{-3}$
- Espacement fibres :  $2.5 \text{ mm}$
- Epaisseur optique d'extinction :  $e = 10 - 20$
- Albedo :  $\alpha = 0.8$
- Renormalisé transport :  $e^* = 3 - 7$  et  $\alpha^* = 0.5$

# Références bibliographiques



Baran, A. J. (2009).

A review of the light scattering properties of cirrus.

*Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(14-16) :1239 – 1260.  
XI Conference on Electromagnetic and Light Scattering by Non-Spherical Particles : 2008.



Bernard, S., Probyn, T. A., and Quirantes, A. (2009).

Simulating the optical properties of phytoplankton cells using a two-layered spherical geometry.  
*Biogeosciences Discussions*, 6(1) :1497–1563.



Bigdare, R. R., Ondrusek, M. E., Morrow, J. H., and Kiefer, D. A. (1990).

In-vivo absorption properties of algal pigments.  
volume 1302, pages 290–302. SPIE.



Choi, W., Fang-Yen, C., Badizadegan, K., Oh, S., Lue, N., Dasari, R. R., and Feld, M. S. (2007).

Tomographic phase microscopy.  
*Nat Meth*, 4(9) :717–719.



Lucarini, V. (2005).

*Kramers-Kronig relations in optical materials research*.  
Springer.



Mishchenko, M., Hovenier, J., and Travis, L. (2000).

*Light scattering by nonspherical particles : theory, measurements, and applications*.  
Academic Press.



Nousiainen, T. (2009).

Optical modeling of mineral dust particles : A review.

*Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(14-16) :1261 – 1279.  
XI Conference on Electromagnetic and Light Scattering by Non-Spherical Particles : 2008.

