

# Master d'Astronomie et d'Astrophysique M2-R

## PROJET INFORMATIQUE F 95 2007/2008

Jacques Le Bourlot, Didier Pelat

11 septembre 2007

On se propose de calculer les caractéristiques d'un rayonnement lumineux après la traversée d'un milieu diffusif. Le calcul se fera en simulant numériquement le processus de diffusion de la lumière à l'aide de la méthode dite de Monte-Carlo.

### 1 Le modèle adopté

Le milieu dispersif est constitué d'une couche de diffuseurs comprise entre deux plans parallèles infinis séparés par une distance  $D$ . La lumière se présente perpendiculairement à cette couche et est diffusée lorsqu'elle rencontre une particule. On suppose que la répartition des diffuseurs est homogène dans la couche diffusante.

La méthode consiste à suivre l'histoire d'un photon depuis le moment où il pénètre dans la couche jusqu'au moment où il en émerge. Pour un photon donné, une diffusion est un événement qui le dévie de sa trajectoire qui autrement resterait rectiligne. Elle prend une allure de ligne brisée qui est une *marche au hasard* à trois dimensions. On recommence un très grand nombre de fois cette expérience afin de limiter les effets du hasard.

**Quand ont lieu les diffusions ?** La fréquence des diffusions dépend de la densité numérique  $n$  [ $\text{cm}^{-3}$ ] des diffuseurs ainsi que de la section efficace  $\sigma$  [ $\text{cm}^2$ ] du processus de diffusion. Le seul paramètre dont nous ayons besoin est le *libre parcours moyen*  $\ell$  [ $\text{cm}$ ] qui est la distance moyenne parcourue par le photon entre deux diffusions (ou entre l'entrée du photon et la première diffusion.) On a  $\ell = 1/(n\sigma)$ , plus la densité de diffuseurs est grande, plus le libre parcours moyen est petit et de même si la section efficace est grande. L'histoire du photon est jalonnée par des événements : les diffusions, entre lesquelles le photon parcourt une distance variable dont la moyenne est  $\ell$ . Afin de simuler de façon réaliste le parcours d'un photon, il faut connaître la densité de probabilité de la variable aléatoire  $S$  qui représente la longueur parcourue par le photon entre deux diffusions.

Un résultat bien connu de la théorie des processus aléatoires dit que si un flux d'événements satisfait aux trois conditions ci-dessous, alors la variable  $S$  suit une loi *exponentielle* de moyenne le libre parcours moyen  $\ell$ . Ces conditions sont :

**Stationnarité.** Le nombre d'événements susceptibles d'avoir lieu dans le temps  $\Delta t$  ne dépend au premier ordre que de  $\Delta t$ .

**Séparabilité.** Le nombre d'événements dans le temps  $\Delta t$  tend à être soit aucun, soit un seul événement lorsque  $\Delta t$  tend vers zéro.

**Absence de mémoire.** L'histoire future des événements ne dépend pas du passé.

On n'aura pas de mal à admettre que ces conditions sont remplies dans l'exemple qui nous intéresse. Si  $f$  désigne la densité de probabilité de  $S$  on a :

$$f(s) = \frac{1}{\ell} \exp(-s/\ell), \quad s \geq 0. \quad (1)$$

Une autre quantité importante est la fonction de répartition  $F$  qui est la probabilité pour que  $S$  ne dépasse pas la valeur  $s$ . Par définition on a :  $F(s) = \Pr(S \leq s)$ , la fonction  $F$  est l'intégrale de  $f$  de  $-\infty$  à  $s$  et, réciproquement,  $f$  est la dérivée de  $F$  par rapport à  $s$ . Pour la loi exponentielle, on a :

$$F(s) = 1 - \exp(-s/\ell), \quad s \geq 0. \quad (2)$$

La trajectoire, dépliée, d'un photon est donc une succession de réalisations de la variable aléatoire  $S$ . Pour la construire, il faudra disposer de l'outil numérique «LoiExponentielle» capable de générer des nombres pseudo-aléatoires issus de la loi exponentielle. Nous verrons plus loin comment réaliser cet outil.

**Comment se déroulent-elles ?** Le paragraphe précédent nous a appris comment simuler la longueur des segments constituant la trajectoire du photon, mais nous ne savons pas encore comment cette dernière se dispose dans l'espace. Pour cela il faut savoir comment l'interaction photon-diffuseur redistribue le vecteur d'onde du photon sur la sphère unité. On se placera dans l'approximation où la diffusion ne change pas la fréquence du photon. On repère un point sur la sphère unité à partir de ses coordonnées polaires  $(\alpha, \beta)$ , l'angle polaire  $\alpha$  est compté à partir du vecteur d'onde du photon avant diffusion, l'azimut  $\beta$  est défini par le changement de base permettant de passer du repère de diffusion à celui du laboratoire (ces notions seront précisées plus loin.)

La diffusion est caractérisée par la *fonction de phase*  $f(\alpha)$  dont la représentation graphique est le *diagramme de diffusion*. La fonction de phase est la densité de probabilité des directions de diffusion sur la sphère unité. On ne considérera ici que le cas de la diffusion possédant la symétrie cylindrique, c'est-à-dire lorsque le diagramme de diffusion ne dépend pas de l'azimut  $\beta$ . Dans le cas de la diffusion isotrope le diagramme de diffusion est la sphère unité elle-même, on envisagera aussi le cas où la fonction de phase est une ellipse. Un autre exemple est la diffusion de *Rayleigh* de la lumière sur les molécules de l'atmosphère qui possède la fonction de phase :

$$f(\alpha) = \frac{2}{3\pi} (1 + \cos^2 \alpha). \quad (3)$$

Comme toutes les fonctions de phase,  $f(\alpha)$  est normalisée de telle sorte que :

$$\int_0^\pi f(\alpha) d\alpha = 1.$$

On trouvera plus de précisions (par exemple sur la diffusion de Mie) dans Krügel (2003) [2].

Quoiqu'il en soit, afin de rendre compte du type de diffusion auquel on a affaire, il faut être capable de générer une variable pseudo-aléatoire dont la fonction de répartition est celle des  $\alpha$ .

**Quand la diffusion d'un photon s'arrête-t-elle ?** La simulation de la trajectoire d'un photon s'arrête lorsque le photon s'échappe du milieu diffusant. Il peut s'en

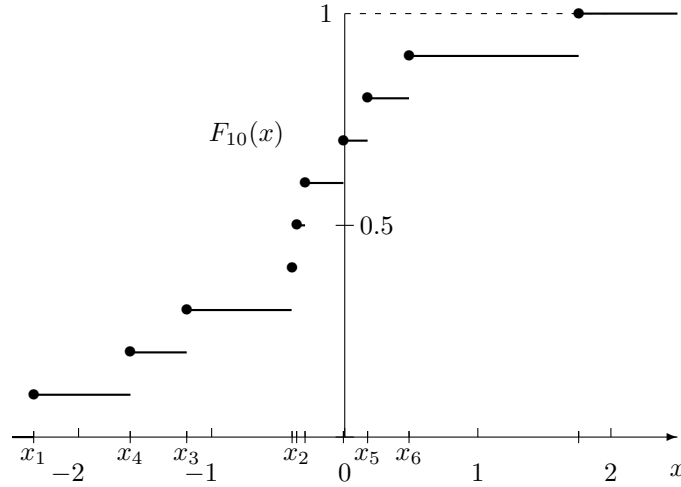


FIG. 1 – Exemple d’une réalisation de la fonction de répartition empirique  $F_N(x)$  d’un échantillon normal réduit de taille  $N = 10$ . Pour plus de clarté seuls les six premières valeurs de l’échantillon ont été identifiées sur l’axe des  $x$ .

échapper par l’avant, on dit alors qu’il est diffusé ; ou par l’arrière, on dit alors qu’il est rétro-diffusé. Afin de savoir si le photon est diffusé ou rétrodiffusé, il faudra en permanence mettre à jour la profondeur de pénétration  $z$ , si  $z > D$  ou si  $z < 0$  alors le photon s’est échappé et la simulation de sa trajectoire s’arrête. On passe alors au photon suivant.

**Quelles données faut-il sauvegarder ?** Le but ultime de cette simulation est de construire le diagramme de diffusion ou plutôt son intégrale, ce qui est techniquement plus simple et contient, pour un œil exercé, la même information. À cette fin, il faut garder en mémoire les coordonnées  $\theta$  et  $\phi$  du vecteur d’onde après chaque diffusion jusqu’au moment où le photon sort du milieu.

Avec les conditions que nous nous sommes imposées, les photons doivent émerger avec un vecteur d’onde possédant la symétrie cylindrique. Son azimut  $\phi$  devrait être uniformément réparti entre 0 et  $2\pi$ . ( Cette particularité servira à valider le programme.) L’information pertinente est portée par la répartition des  $\theta$ .

Afin d’illustrer le résultat obtenu et d’en dégager les caractéristiques, il nous faut construire les fonctions de répartition empiriques  $F_N$  des  $\phi$  et des  $\theta$ , elles nous serviront d’approximation des fonctions de répartition vraies  $F$ . Prenons l’exemple de  $\phi$ . Dans ce cas  $F$  est connue :  $F(\phi) = \phi/2\pi$ . Pour obtenir  $F_N$  il faut trier les valeurs obtenues  $\phi_i$  par ordre croissant et leur associer la proportion des  $\phi_i$  dont la valeur est inférieure ou égale à  $\phi$ . Pour  $\phi_i$ , après tri, cette proportion est égale à  $i/N$ . On obtient ainsi un ensemble de couples  $(\phi_i, i/N)$  permettant de construire une courbe « en escalier » qui est la fonction de répartition empirique (voir un exemple sur la figure 1). La définition de  $F_N$  pour un  $\phi$  quelconque est donnée par l’expression :

$$F_N(\phi) = \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{\phi_i \leq \phi} . \quad (4)$$

Dans cette expression  $\mathbf{1}$  est l’indicatrice de la condition  $\phi_i \leq \phi$ . Pour mener à bien cette construction il suffira, lorsqu’un photon s’échappe, de sauvegarder les valeurs  $\phi_i$

et  $\theta_i$  de son vecteur d'onde.

**Combien de photons faut-il lancer ?** Il n'y a pas de réponse toute faite à cette question, tout dépend de ce que l'on cherche et à quelle précision on désire l'obtenir. Dans le cas qui nous intéresse, le problème est simplifié car la fonction de répartition théorique  $F$  de  $\phi$  est connue.

Il est bien clair que  $F_N(\phi)$  ou  $F_N(\theta)$  ne seront pas égales aux fonctions  $F$  vraies respectives,  $F_N(\phi)$  ainsi que  $F_N(\theta)$  sont des *variables aléatoires*. Cependant on en sait un peu plus sur ces variables : quelle que soit la variable aléatoire  $X$ , sa fonction de répartition  $F_N(x)$  empirique est une variable binomiale de moyenne  $F(x)$  et d'écart type  $[\frac{1}{N}F(x)(1 - F(x))]^{\frac{1}{2}}$ . Au passage, ce résultat montre qu'*a priori*  $F_N$  est une bonne façon d'approximer  $F$  puisque, lorsque  $N \rightarrow \infty$ , l'écart type tend vers zéro (comme  $1/\sqrt{N}$ ) tout en gardant une moyenne égale à la valeur théorique.

Pour savoir si le nombre de simulations a été suffisant nous allons utiliser, comme annoncé, la fonction  $F_N(\phi)$  en tant que test. Son écart type est  $\sigma = [\frac{1}{N}F(\phi)(1 - F(\phi))]^{\frac{1}{2}}$  soit  $\sigma = [\frac{1}{N}\frac{\phi}{2\pi}(1 - \frac{\phi}{2\pi})]^{\frac{1}{2}}$ , puisque  $F(\phi) = \phi/2\pi$ . Cette erreur est maximum pour  $\phi = \pi$  pour laquelle elle vaut  $\sigma = 1/2\sqrt{N}$ . Afin d'obtenir partout une précision meilleure que  $\sigma$ , il suffit d'effectuer au moins  $N = 1/4\sigma^2$  simulations soit, pour fixer les idées, 2 500 simulations pour atteindre une précision meilleure que  $\sigma = 0,01$ .

On préfère souvent parler du rapport signal sur bruit S/B plutôt que de l'erreur absolue  $\sigma$ . Ce rapport est une quantité relative définie pour des variables positives, il fait explicitement référence à une mesure et est égal à sa moyenne divisé par son écart type. Afin d'obtenir un rapport signal sur bruit de 100, toujours pour la valeur  $\phi = \pi$  de  $F_N(\phi)$  et sachant que  $S/B = F(\phi)/[\frac{1}{N}\frac{\phi}{2\pi}(1 - \frac{\phi}{2\pi})]^{\frac{1}{2}}$ , il faudra effectuer  $N = (S/B)^2$  soit 10 000 simulations.

**Validation a posteriori de la simulation.** Ce paragraphe devrait, sauf pour les fanatiques, être abordé en deuxième lecture.

Il existe un moyen relativement simple de savoir si la simulation s'est bien déroulée, par exemple si des effets systématiques n'ont pas été accidentellement introduits. L'idée est de voir si les fluctuations de  $F_N$  autour de  $F$  sont conformes à ce que l'on attend. Pour cela on mesure la distance entre  $F_N$  et  $F$  et on regarde si la valeur de cette distance est compatible avec le hasard. La distance choisie est la distance de Kolmogorov  $D_{\max}$ , ainsi définie :

$$D_{\max}(F_N, F) = \max_{\phi} |F_N(\phi) - F(\phi)|. \quad (5)$$

En pratique il est suffisant d'explorer les  $\phi_i$  car le maximum a nécessairement lieu en ces points. De cette façon on aura, toujours dans l'exemple de  $\phi$  :

$$D_{\max} = \max_{\phi} \left| \frac{i}{N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right|. \quad (6)$$

Un résultat dû à Andreï Kolmogorov dit que la variable  $z = \sqrt{N}D_{\max}$  possède une fonction de répartition  $K$  asymptotiquement indépendante de la loi  $F$  (voir figure 2). Il serait très surprenant, si les simulations se sont bien déroulées, que  $z$  soit plus grand que disons 1,3 (ce qui arrive néanmoins dans environ 5% des cas, même si la simulation n'est pas en faute). De façon plus précise, pour une variable quelconque  $X$ , sous hypothèse que la simulation est correcte, on a :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \Pr(\sqrt{N} \max_{\phi} |F_N(x) - F(x)| \leq z) = K(z), \quad (7)$$

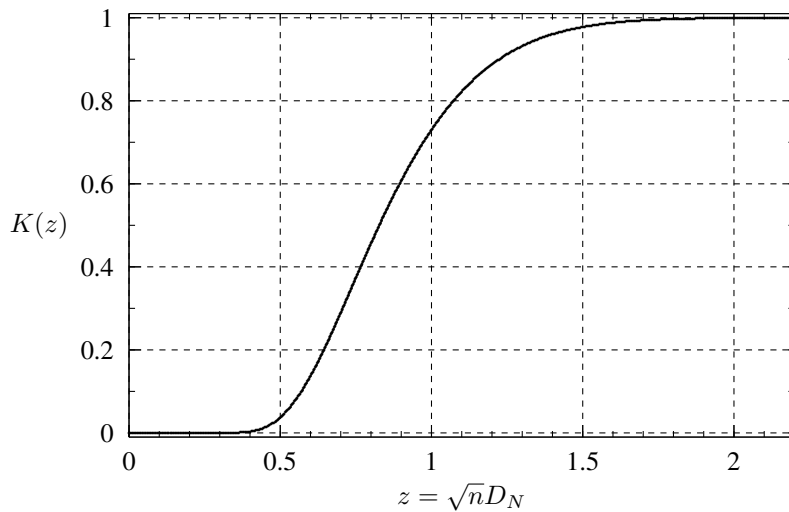


FIG. 2 – Fonction de répartition de Kolmogorov  $K(z)$ . La variable  $D_n$  est la statistique de Kolmogorov,  $N$  est la taille de l'échantillon.

où  $K(z)$  est une fonction dont la formule analytique est connue.

## 2 Simuler des variables aléatoires

### 2.1 La loi uniforme

Afin de simuler des variables aléatoires obéissant à diverses lois données, il faut disposer d'un générateur de nombre au hasard uniforme entre 0 et 1. Cette fonction est intégrée à la norme Fortran 95 sous la forme du sous-programme :

```
call random_number(harvest=tableau)
```

Dans cette expression `harvest` est une étiquette facultative dont le rôle est surtout mnémotechnique ; `tableau` est une variable destinée à recevoir les nombres pseudo-aléatoires calculés par le programme `call random_number`. Les générateurs de nombres aléatoires doivent pouvoir générer : soit toujours la même série de nombres (en phase de test, par exemple) ; soit une série différente à chaque lancement du programme. En Fortran 95 cette possibilité est contrôlée par un appel au sous-programme `random_seed`.

Si l'appel est sans arguments :

```
call random_seed
```

la série est différente d'une exécution du programme à une autre et ce dernier choisit lui-même les paramètres de la simulation. Si l'on désire contrôler soi-même la séquence de nombres au hasard, il faut fournir un tableau : `seed` de graines de départ dont la taille dépend de l'implémentation particulière du compilateur fortran. On obtient ce contrôle grâce à deux appels successifs à `random_seed` :

```
call random_seed(size=k)
allocate(seed(k))
seed = (/s1, s2, ..., sk/)
call random_seed(put=seed(1:k))
```

Si l'on désirait connaître le tableau des graines utilisées par le programme, il faudrait alors inclure les appels suivants :

```
call random_seed(size=k)
allocate(seed(k))
call random_seed(get=seed(1:k))
```

Il va sans dire que, dans ces deux derniers exemples, les étiquettes `size`, `put` ou `get` sont obligatoires.

On suppose, à partir de maintenant, que l'on dispose d'une variable aléatoire  $U$  suivant la loi uniforme entre 0 et 1.

## 2.2 La loi exponentielle

Un résultat classique de la théorie du changement de variables aléatoires, dit que si  $F$  désigne la fonction de répartition une variable aléatoire continue  $X$ , alors la variable aléatoire  $F(X)$  est uniforme entre 0 et 1. On écrit  $F(X) = U$ , en donnant à l'égalité entre variables aléatoires le sens qu'elles sont égales si leurs fonctions de répartition sont identiques.

Il est alors possible d'utiliser ce résultat afin de générer des nombres  $X$  suivant une loi caractérisée par  $F$ . Il suffit d'écrire :  $X = F^{-1}(U)$ , à condition que la fonction  $F$  soit bijective, ce qui est le cas pour les variables continues. D'un point de vue technique, cette procédure est praticable si  $F$  est facilement inversible numériquement. C'est le cas de la loi exponentielle car de  $F(x) = 1 - e^{-x/\ell}$ , on en déduit :

$$\begin{aligned}U &= 1 - e^{-X/\ell} \\e^{-X/\ell} &= 1 - U \\-X/\ell &= \ln(1 - U) \\X &= -\ell \ln(1 - U) \\X &= -\ell \ln U.\end{aligned}$$

La dernière égalité ne doit pas surprendre car les variables  $1 - U$  et  $U$  possèdent la même fonction de répartition et sont, par conséquent, égales. Ainsi, pour générer une variable aléatoire suivant la loi exponentielle de paramètre  $\ell$ , il suffira d'avoir à disposition un générateur suivant la loi exponentielle de paramètre  $\ell = 1$  et de multiplier les résultats par  $\ell$ .

## 2.3 Placer des points uniformément sur une sphère

Afin d'atteindre cet objectif, il faut manipuler des couples de variables aléatoires, par exemple le couple  $(\theta, \phi)$  des coordonnées sphériques. Pour plusieurs variables aléatoires, se pose le problème délicat de leurs indépendances. Par exemple, on dit que deux variables aléatoires  $X$  et  $Y$  sont indépendantes si la densité du couple  $(X, Y)$  peut être mise sous la forme du produit de la densité de  $X$  par celle de  $Y$ . Dans le cas qui nous occupe, on désire obtenir une répartition uniforme sur la sphère unité, cela veut dire que la probabilité  $p$  d'obtenir un point dans l'angle solide  $d\Omega$  doit être constante. Plus précisément on doit avoir  $p = d\Omega/4\pi$ , soit  $p = \sin\theta d\theta d\phi/4\pi$ . Cette densité peut être écrite sous la forme d'un produit de deux densités :  $p = (\sin\theta d\theta/2) \times (d\phi/2\pi)$  qui montre que notre simulation peut être réalisée grâce à deux variables aléatoires indépendantes, la variable  $\phi$  uniforme entre 0 et  $2\pi$  et la variable  $\theta$  dont la densité doit être égale à  $\sin\theta/2$  entre 0 et  $\pi$ . Il est utile de noter que  $\theta$  ne suis *pas* une loi uniforme.

Afin de savoir comment la simuler, il faut faire appel à la propriété évoquée ci-dessus et calculer au préalable sa fonction de répartition  $F$ . Il vient :

$$\begin{aligned}
 F(\theta) &= \int_0^\theta \frac{1}{2} \sin t \, dt, \\
 &= -\frac{1}{2} \cos t \Big|_0^\theta, \\
 &= \frac{1}{2}(1 - \cos \theta), \\
 U &= \frac{1}{2}(1 - \cos \theta), \\
 \cos \theta &= 1 - 2U, \\
 \theta &= \arccos(1 - 2U).
 \end{aligned}$$

La variable  $1 - 2U$  est uniforme entre  $-1$  et  $1$ , c'est le cosinus de  $\theta$ . Cette remarque suggère d'utiliser plutôt la variable  $z = \cos \theta$  au lieu de  $\theta$ . En résumé, pour générer des points de façon uniforme sur la sphère unité, on choisit deux variables aléatoires indépendantes : l'azimut  $\phi$  de façon uniforme entre  $0$  et  $2\pi$  et la variable cylindrique  $z$  de façon uniforme entre  $-1$  et  $+1$ .

Cette façon de faire donne de bons résultats mais elle possède un petit inconvénient dû à la présence des pôles en  $\theta = 0$  et  $\theta = \pi$ . Si l'on commet une petite erreur  $\Delta\phi$  et  $\Delta z$  dans le calcul de  $\phi$  et  $z$ , les points iront se répartir sur la sphère autour du point  $(\phi, z)$  dans une petite ellipse dont les axes sont  $\sin \theta \Delta\phi$  suivant les lignes  $z = \text{Const.}$  (les parallèles) et  $\Delta z / \sin \theta$  suivant les lignes  $\phi = \text{Const.}$  (les méridiens). Même si  $\Delta z = \Delta\phi$ , vers l'équateur l'ellipse est un cercle mais, lorsque l'on se déplace vers les pôles, ce cercle s'allonge en une ellipse dont le grand axe est aligné avec le méridien local. La distribution uniforme va être perturbée de façon non isotrope, ce n'est pas très grave vu les faibles erreurs induites par le calcul numérique mais il est possible de s'en affranchir en procédant de façon plus symétrique. De plus, la nouvelle façon de faire sera mieux adaptée à notre problème de simulation.

Lorsque l'on doit faire face à un problème de pôles sur une variété, l'idée générale est de la plonger dans un espace de dimension plus grande de façon à ce que les pôles ne soient plus sur la variété. Ici nous plongeons la sphère dans l'espace euclidien  $\mathbb{R}^3$  et, bien que la sphère soit une variété à 2 dimensions, nous la décrivons à l'aide des *trois* nombres  $x, y$  et  $z$  correspondant aux coordonnées cartésiennes, mais en imposant la contrainte  $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ . Ainsi, les valeurs particulières zéro et l'infini ne sont pas sur la sphère.

Maintenant, choisissons trois variables aléatoires indépendantes  $X_1, X_2$  et  $X_3$  suivant la loi normale réduite. On dit que la variable  $X$  suit la loi normale, ou loi de Gauss, réduite si sa densité  $f$  est donnée par l'expression :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}. \quad (8)$$

La densité  $f_3$  du triplet  $(X_1, X_2, X_3)$  est égale au produit des densités telles que  $f$  :

$$\begin{aligned}
 f_3(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_1^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_2^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_3^2}, \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}.
 \end{aligned}$$

Cette densité est uniforme sur les sphères de rayon  $r = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{\frac{1}{2}}$ . La probabilité

d'obtenir un point dans l'élément de volume  $dV = r^2 d\Omega dr$  est :

$$dp = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{2}r^2} r^2 d\Omega dr,$$

elle ne dépend pas des coordonnées  $\theta$  et  $\phi$ . Si l'on ramène tous les points sur la sphère unité à l'aide du changement de variables :  $x' = x/r$ ,  $y' = y/r$  et  $z' = z/r$ . (Si d'aventure  $r = 0$ , il suffirait d'ignorer ce point.) La probabilité  $dp'$  d'obtenir un point dans l'angle solide  $d\Omega$  sera :

$$\begin{aligned} dp' &= \int_0^\infty \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{2}r^2} r^2 d\Omega dr, \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} d\Omega \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2}r^2} r^2 dr, \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{\sqrt{2\pi}}{2}, \\ &= \frac{d\Omega}{4\pi}. \end{aligned}$$

Ainsi, cette façon de faire répartit bien des points sur une sphère de façon uniforme et on montre facilement que les erreurs sont isotropes.

## 2.4 La loi normale

Une variable normale étant continue, il serait en théorie possible d'utiliser la méthode d'inversion de la fonction de répartition. Cependant, cette opération est difficile à effectuer rapidement. Pour cette raison, nous lui préférons la méthode de Box et Miller basée sur le changement de variable d'un couple de variables aléatoires. Nous ne décrivons que le résultat sur lequel s'appuie cette méthode, on trouvera la théorie dans la référence [1] ou dans le cours de TC7.

La méthode tire avantage du fait que si les variables  $U_1$  et  $U_2$  sont indépendantes et uniformes entre 0 et 1, alors le couple de variables  $(X_1, X_2)$  calculé de la façon suivante :

$$X_1 = \sqrt{-2 \ln U_1} \cos(2\pi U_2), \quad X_2 = \sqrt{-2 \ln U_1} \sin(2\pi U_2), \quad (9)$$

est formé de variables également indépendantes et qui suivent toutes deux la loi normale réduite. L'algorithme suivant est une implémentation possible de cette méthode (il y en existe d'autres, voir par exemple [1]).

**Algorithme N** (*Loi normale réduite*).

**N0.** [Entrée des paramètres]

Renseigner(seed), gestion de la graine de départ

Renseigner( $N_{\max}$ ), nombre de tirages à effectuer ;  $allocate(U(N_{\max}))$

$0 \rightarrow N$ , mise à zéro du compteur des tirages

.faux.  $\rightarrow$  tirage\_fait

**N1.** [Fini ?]

Si  $N \geq N_{\max}$ , arrêt

$N + 1 \rightarrow N$

**N2.** [Faut-il tirer deux valeurs successives ?]

Si (tirage\_fait) aller à N5.



**N3.** [Algorithme de Box et Miller]  
 LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1$  ;  $-2 \ln U_1 \rightarrow \rho$   
 LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_2$  ;  $2\pi U_2 \rightarrow \arg$   
 $\rho \cos(\arg) \rightarrow X_1$  ;  $\rho \sin(\arg) \rightarrow X_2$   
 .vrai.  $\rightarrow$  tirage\_fait

**N4.** [On livre le premier tirage]  
 $U_1 \rightarrow U(N)$  ; aller à N1

**N5.** [On livre le second tirage]  
 $U_2 \rightarrow U(N)$   
 .faux.  $\rightarrow$  tirage\_fait, il faut refaire un double tirage  
 aller à N1

Une variable aléatoire normale réduite possède une moyenne égale à 0 et un écart type égal à 1. Pour simuler une variable normale  $Y$  de moyenne  $\mu$  et d'écart type  $\sigma$ , il suffit de remarquer que la variable centrée-réduite  $X = (Y - \mu)/\sigma$  est une variable normale réduite. On a donc symboliquement :

$$\text{LoiNormale}(\text{seed}, \mu, \sigma) = \sigma \text{LoiNormaleReduite}(\text{seed}) + \mu.$$

### 3 Mise en œuvre

Afin de suivre la trajectoire du photon dans le milieu diffusif, il est utile de considérer deux repères : le repère du laboratoire  $E$  et le repère de diffusion  $\bar{E}$  centré sur la particule diffuseuse.

**Le repère du laboratoire** Le repère  $E$  possède la base orthonormée  $(e_1, e_2, e_3)$  directe, le vecteur  $e_3$  est perpendiculaire au plan par où les photons pénètrent dans le milieu diffusif, il est dirigé vers l'intérieur, les vecteurs  $e_1$  et  $e_2$  sont dans ce plan, leur position exacte est sans importance. Par rapport à ce repère un photon possède un vecteur d'onde unitaire de coordonnées cartésiennes  $(x_1, x_2, x_3)$ . Ces coordonnées permettent de calculer les angles  $\theta$  et  $\phi$  du vecteur d'onde dans le repère du laboratoire. Il faut en outre calculer la profondeur de pénétration  $z$  du photon dans le milieu diffusif,  $z$  est la coordonnée du photon dans  $E$  suivant  $e_3$ .

**Le repère de diffusion** Le repère  $\bar{E}$  possède la base orthonormée directe  $(\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3)$  centrée sur la particule diffuseuse, le vecteur  $\bar{e}_3$  est dirigé suivant le vecteur d'onde unitaire du photon avant diffusion. Si  $\theta$  et  $\phi$  désignent les coordonnées sphériques du vecteur d'onde unitaire dans  $E$ , on détermine entièrement le repère  $\bar{E}$  à l'aide des deux rotations successives d'angles  $\theta$  puis  $\phi$  qui permettent de faire coïncider les deux repères. Plus précisément, la formule de passage des coordonnées du vecteur d'onde unitaire dans  $\bar{E}$  à celles dans  $E$ , est donnée par l'expression :

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \bar{x}_3 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Notez que  $\phi$  est bien le premier angle d'Euler, la précession, mais que  $\theta$  n'est pas la nutation au sens classique. Il aurait fallu pour cela effectuer une rotation en sens inverse autour de l'axe de numéro 1 et non autour de l'axe numéro 2 comme ici. Néanmoins, cette façon particulière de considérer les choses simplifie le calcul.

### 3.1 Diffusion isotrope et ellipsoïdale

A titre d'exemple voici un algorithme qui réalise la simulation. Dans cette implémentation, on donne  $D$  en unité de  $\ell$ , par conséquent  $\ell = 1$  dans ces unités. Cette opération de dédimensionnement permet d'avoir une idée immédiate de la taille du nuage (pour  $D = 1$  on a une chance sur  $e$ , soit environ 3, de passer à travers la couche sans diffusion) et cela permet d'économiser de nombreuses multiplications.

**Algorithme D** (*Diffusion ellipsoïdale*).

**D0.** [Choix des paramètres.]

Renseigner( $D, \ell$ ), caractérisant le milieu.

$D/\ell \rightarrow D$ ,  $D$  est maintenant en unités de  $\ell$ .

Renseigner( $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ), caractérisant le type de diffusion. On impose la symétrie cylindrique pour laquelle on a  $\sigma_1 = \sigma_2$ . Pour la diffusion isotrope on a  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$  que l'on peut supposer égaux à un.

Renseigner(seed), initialisation des simulations.

Renseigner(S/B); Signal sur bruit minimum désiré pour la distribution des  $\phi$ .

$(S/B)^2 \rightarrow N_{\max}$

allocate( $\theta(N_{\max}), \phi(N_{\max})$ )

$0 \rightarrow N$

**D1.** [Initialisation d'un photon abordant la couche.]

$0 \rightarrow z$ ;  $0 \rightarrow \theta$ ; LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$ ;  $2\pi U \rightarrow \phi$ ;  $1 \rightarrow x_3$ .

**D2.** [Choix de la distance parcourue par le photon.]

LoiExponentielle(seed)  $\rightarrow s$ , Note :  $\ell$  est égal à un.

**D3.** [Calcul de la distance de pénétration.]

$z + sx_3 \rightarrow z$ .

**D4.** [Est-on sorti du milieu diffusant ?]

Si  $z > D$  ou si  $z < 0$  aller à l'étape D8.

**D5.** [Choix de la direction de diffusion dans  $\bar{E}$ .]

LoiNormale(seed, 0,  $\sigma_1$ )  $\rightarrow \bar{x}_1$ ; LoiNormale(seed, 0,  $\sigma_2$ )  $\rightarrow \bar{x}_2$

LoiNormale(seed, 0,  $\sigma_3$ )  $\rightarrow \bar{x}_3$ ;  $\sqrt{\bar{x}_1^2 + \bar{x}_2^2 + \bar{x}_3^2} \rightarrow r$

Si  $r = 0$ , aller à D5.

$\bar{x}_1/r \rightarrow \bar{x}_1$ ;  $\bar{x}_2/r \rightarrow \bar{x}_2$ ;  $\bar{x}_3/r \rightarrow \bar{x}_3$ .

**D6.** [Passage de  $\bar{E}$  à  $E$ .]

Calcul de  $x_1, x_2$  et  $x_3$  suivant la formule (10).

Par exemple :  $-\sin \theta \bar{x}_1 + \cos \theta \bar{x}_3 \rightarrow x_3$ .

**D7.** [Calcul dans  $E$  des coordonnées sphériques du nouveau vecteur d'onde.]

$\text{atan2}(\sqrt{x_1^2 + x_2^2}, x_3) \rightarrow \theta$ ;

Si  $\theta \neq 0$ ;  $\text{atan2}(x_1/\sin \theta, x_2/\sin \theta) \rightarrow \phi$ .

Sinon : LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$ ;  $2\pi U \rightarrow \phi$ , précaution pour le cas mince.

Aller à D2.

**D8.** [Garder en mémoire la direction du vecteur d'onde sortant.]

$N + 1 \rightarrow N$ ;  $\theta \rightarrow \theta(N)$ ;  $\phi \rightarrow \phi(N)$ .

**D9** [Les simulations sont-elles terminées ?]

Si  $N < N_{\max}$ , aller à D1.

**D10.** [Tri et sortie]

Tri par ordre croissant des tableaux  $\theta$  et  $\phi$  dans le but de construire la fonction de répartition empirique. Écriture dans un fichier des données triées :  $\theta_i, \phi_i$  et  $i/N$ , pour  $i = 1$  à  $N$ . Arrêt.

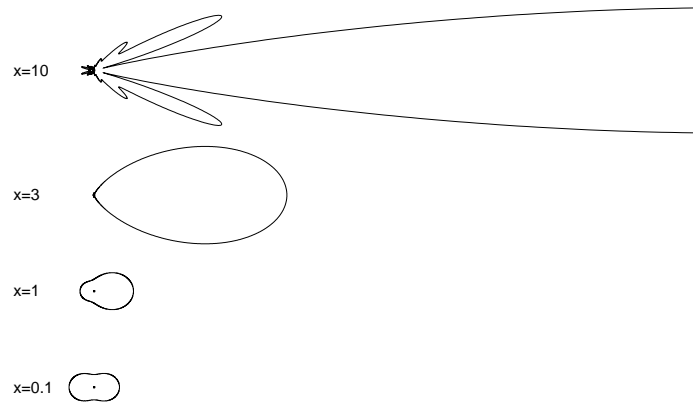


FIG. 3 – Diffusion de Mie.

## 4 Note sur la diffusion de la lumière par des sphères

La diffusion d'une onde électromagnétique par une sphère homogène relève de la théorie de Mie. Le calcul peut être mené à bien de bout en bout, mais est extrêmement laborieux (basé sur des développements en harmoniques sphériques.) Le résultat cependant ne dépend que de deux paramètres :

1. Le facteur de forme :

$$x = \frac{2\pi a}{\lambda}$$

où  $a$  est le rayon de la sphère et  $\lambda$  la longueur d'onde de l'onde incidente.

2. L'indice de réfraction du milieu :

$$m = n + ik$$

où la partie réelle  $n$  caractérise le rapport de la vitesse de l'onde dans le vide sur celle dans le milieu, et  $k$  caractérise la dissipation de l'onde.

Nous ne traiterons ici que le cas où les particules sont petites par rapport à la longueur d'onde ( $x \ll 1$ ). La diffusion est alors dans la limite de Rayleigh, et la fonction de phase est proportionnelle à  $1 + \cos^2 \alpha$ . Pour un milieu non absorbant, quand  $x$  est plus grand, la fonction de phase devient de plus en plus piquée vers l'avant ("forward scattering") comme on peut le voir sur la figure 3.

Notez que pour un rayon nettement supérieur à la longueur d'onde l'essentiel de l'énergie part vers l'avant, alors qu'on aurait pu supposer que par réflexion l'essentiel de l'onde aurait été réfléchi. Le domaine de validité approximatif de ces théories est illustré sur la figure.

### 4.1 Simuler une diffusion de Rayleigh

Pour générer une diffusion suivant Rayleigh, il faut intégrer sa fonction de phase donnée en (3) entre 0 et  $\alpha$ . On obtient :

$$F(\alpha) = \frac{\alpha}{\pi} + \frac{\sin 2\alpha}{6\pi}.$$

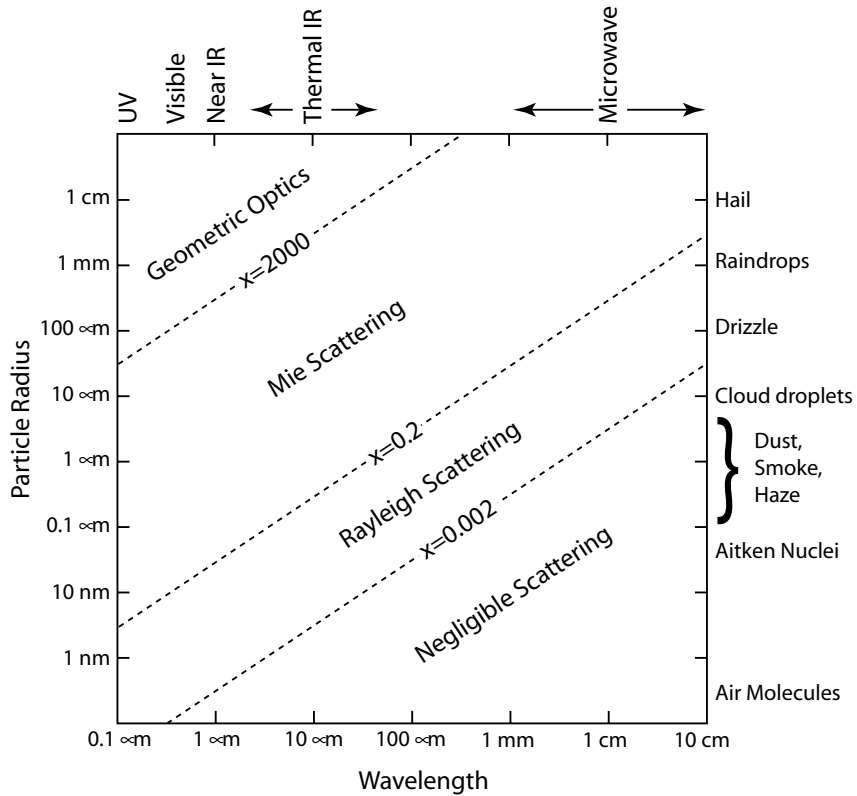


FIG. 4 – Validité des approximation Rayleigh et Mie.

Il se trouve que cette fonction est « assez » proche de la droite  $y = \pi \alpha$ . Afin d'inverser  $F$ , il suffira de tirer un nombre  $y_0$  uniformément entre 0 et 1, de partir de l'estimation  $\alpha_0 = \pi y_0$ , et d'utiliser une méthode de Newton suivant le schéma itératif :

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n - \epsilon \frac{3}{2} \frac{\alpha + \sin 2\alpha - \pi y_0}{1 + \cos^2 \alpha}.$$

qui converge vers  $\alpha = F^{-1}(y_0)$ . Si  $\epsilon = 1$ , la convergence de la méthode est quadratique, mais elle peut être instable. En pratique ici, elle converge pour  $\epsilon = 0.8$ . La convergence n'est plus que linéaire, mais elle est fiable.

## Références

- [1] Press W., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B., 1992, *Numerical Recipes, Second edition*, Cambridge University Press, Cambridge
- [2] Krügel E., 2003, *The Physics of Interstellar Dust*, Institute of Physics Publishing, Bristol & Philadelphia. ISBN 0-7503-0861-3