

Master d’Astronomie et d’Astrophysique M2-R  
PROJET DE MÉTHODES NUMÉRIQUES 2019–2020  
Diffusion et méthode de Monte-Carlo

Didier Pelat

18 octobre 2020

Projet encadré par Franck Le Petit, Zakaria Méliani, Yann Rasera

## 1 Introduction

La propagation de particules au travers d’un milieu susceptible de les diffuser est un processus complexe dès lors que la diffusion devient multiple. Bien que l’on puisse traiter analytiquement certains problèmes de diffusion relativement simples, les calculs deviennent vite inextricables lorsque l’on doit considérer plusieurs diffusions successives. Afin de dégager les caractéristiques de l’interaction de particules avec le milieu diffusif, il est nécessaire d’avoir recours à une simulation numérique du phénomène à l’aide de la méthode dite de « Monte-Carlo ».

La méthode de Monte-Carlo consiste à reproduire numériquement, le plus fidèlement possible, le processus physique auquel les particules sont soumises. Cette simulation, comme son équivalent réel, fait intervenir le hasard et les résultats seront présentés sous la forme d’une moyenne. La convergence de cette moyenne vers ce qu’aurait donné une expérience réelle, lorsque le nombre de simulations tend vers l’infini, est en principe assurée par *la loi des grands nombres* (voir chapitre 2.4). Les particules peuvent être, par exemple, des photons (on parle alors de « transfert du rayonnement ») et le milieu diffusif l’atmosphère terrestre. Un autre exemple est la diffusion des neutrons dans le ralentisseur d’une centrale nucléaire ou pire au sein d’une matière fissile. Le terme de « Monte-Carlo » suggéré par N. Metropolis vers 1947, fait référence à la célèbre maison de jeu de la côte-d’azur dont la prospérité ne doit, bien entendu, rien au hasard.

De nombreux progrès ont été réalisés dans le passé grâce à des simulations de ce type. On accorde souvent à S. Ulam et J. von Neumann [20] le mérite d’avoir inventé la méthode, mais on peut en faire remonter le principe jusqu’à l’époque du problème de l’aiguille de Buffon qui est une façon expérimentale de calculer  $\pi$  à l’aide d’un procédé qui s’apparente à la méthode de Monte-Carlo. À l’heure actuelle, où les progrès du calcul parallèle et la multiplication des coeurs au sein des processeurs sont constants, il faut s’attendre à un regain d’intérêt pour ce genre de méthodes.

## 2 Le modèle

Dans le cas le plus simple, le milieu diffusif est constitué d’une couche de diffuseurs situés entre deux plans parallèles infinis séparés par une distance  $D$ . Les particules se présentent sous la forme d’un faisceau collimaté perpendiculairement à cette couche et sont diffusées lorsqu’elles rencontrent un diffuseur. Les diffuseurs sont les *cibles* du processus de diffusion. Dans un premier temps, on considérera que le phénomène de diffusion est homogène dans la couche diffusante. Nous introduirons ensuite le modèle dit « plan-parallèle ».

La méthode de Monte-Carlo consiste à suivre l’histoire d’une particule depuis le moment où elle pénètre dans la couche, jusqu’au moment où elle en émerge ou lorsqu’elle y est détruite. Pour une particule donnée, une diffusion est un événement qui la dévie de sa trajectoire qui autrement resterait rectiligne. Le chemin parcouru prend l’allure d’une ligne brisée qui est une *marche au hasard* à trois dimensions, la figure 1 est une illustration de quelques marches au hasard de ce type. On recommence un très grand nombre de fois cette expérience afin de limiter les effets du hasard.

### 2.1 Le libre parcours moyen des particules

La trajectoire des particules est une ligne brisée dont les changements de direction sont déterminés par les diffusions. Après chaque diffusion, les particules parcourent des distances variables  $S$  dont la moyenne est notée  $\ell$  [cm]. Cette moyenne est le *libre parcours moyen*, sa valeur dépend de la densité numérique  $n$  [cm<sup>-3</sup>] des diffuseurs et de la section efficace  $C$  [cm<sup>2</sup>]<sup>1</sup> du processus de diffusion. On a  $\ell = 1/(nC)$ . Plus la densité de diffuseurs est grande, plus le libre parcours moyen est petit et de même si la section efficace est grande. Afin de simuler de façon réaliste la marche au

1. On note souvent  $\sigma$  la section efficace. Cependant nous avons adopté la notation des ouvrages classiques traitant de la diffusion (voir [12] par exemple).

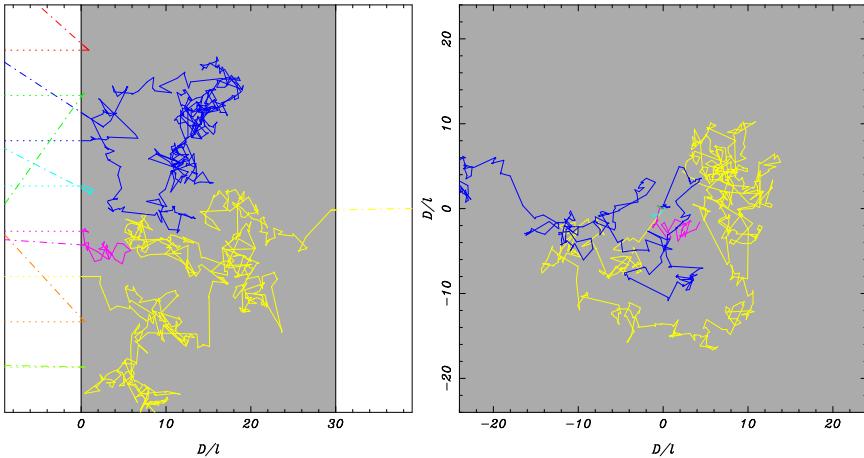


FIGURE 1 – Projection sagittale, à gauche, et coronale, à droite, de la marche au hasard de huit particules dans une couche diffusante homogène. Pour obtenir plus de lisibilité sur le graphique de gauche on a décalé les trajectoires d’entrée des particules.

hasard, il faut connaître la densité de probabilité de la variable aléatoire  $S$  qui représente la distance parcourue par la particule 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 que de  $\Delta t$  et, au premier ordre, est linéaire avec  $\Delta t$ .

**Séparabilité** : Le nombre d’événements dans le temps  $\Delta t$ , lorsque  $\Delta t$  tend vers zéro, tend à être soit aucun événement, soit un seul événement. L’exacte simultanéité des événements est exclue.

**Absence de mémoire** : L’histoire future des événements ne dépend pas du passé. Techniquement, cette propriété s’exprime à l’aide de lois conditionnelles :

$$\Pr\{S > s + t | S > s\} = \Pr\{S > t\}.$$

Cela veut dire que la probabilité pour que la particule parcourt une distance plus grande que  $s + t$  sans subir de diffusion alors qu’elle a déjà parcouru une distance  $s$  est égale à la probabilité pour que la particule parcourt sans diffusion une distance plus grande que  $t$  (sans aucune autre condition).

On n’aura pas de mal à admettre que, dans l’exemple qui nous intéresse, ces trois conditions sont remplies. 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 une 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 suite des distances parcourues entre deux diffusions est une succession de réalisations de la variable aléatoire  $S$ . Pour la construire, il faut disposer d’un outil numérique, que nous nommerons « LoiExponentielle », capable de générer des nombres pseudo-aléatoires issus de la loi exponentielle. Nous verrons plus loin comment réaliser cet outil.

## 2.2 Géométrie de la diffusion

Le paragraphe précédent nous a appris à simuler la longueur des segments constituant la trajectoire des particules entre deux diffusions, il nous reste encore à traiter la façon dont s’effectuent les changements de direction à l’occasion de chaque diffusions.

### 2.2.1 Le plan de diffusion

On note  $\vec{p}$  l’impulsion de la particule avant la diffusion et  $\vec{p}'$  cette quantité après la diffusion. Le plan contenant les vecteurs  $\vec{p}$  et  $\vec{p}'$  est appelé le *plan de diffusion*.

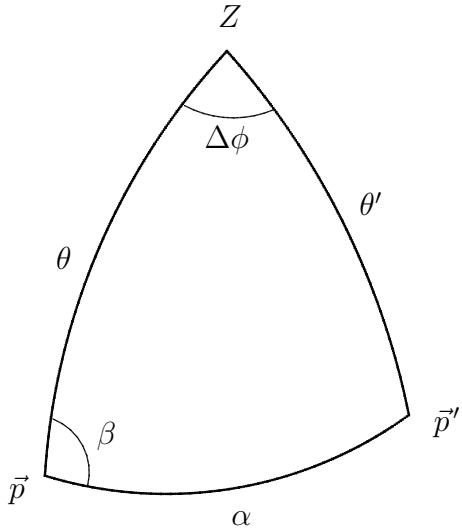


FIGURE 2 – Triangle sphérique de la diffusion défini par trois plans : les plans méridiens avant et après diffusion et le plan de diffusion. Le point  $Z$  indique la direction de l’axe  $Oz$ . Les angles  $\alpha$  et  $\beta$  sont les angles de diffusion. Enfin, les angles  $\theta$  et  $\theta'$  sont les angles polaires des impulsions  $\vec{p}$  avant diffusion et  $\vec{p}'$  après diffusion.

### 2.2.2 Les plans méridiens

Soit  $\vec{e}_z$  un vecteur unitaire porté par l’axe  $Oz$  normal à la couche diffusante et orienté vers l’intérieur de celle-ci. Le plan qui contient le vecteur  $\vec{e}_z$  et le vecteur  $\vec{p}$  est le plan méridien de la particule *avant* diffusion, alors que celui qui contient le vecteur  $\vec{e}_z$  et le vecteur  $\vec{p}'$  est le plan méridien de la particule *après* diffusion.

### 2.2.3 Les angles de diffusion

On repérera le vecteur  $\vec{p}$  par l’angle polaire  $\theta$  qu’il forme avec le vecteur unitaire  $\vec{e}_z$  et par l’angle dièdre  $\phi$  que son plan méridien forme avec un plan de référence. De la même manière, on repérera l’impulsion  $\vec{p}'$  après diffusion à l’aide des angles  $\theta'$  et  $\phi'$ . L’angle  $\theta$  est compris entre 0 et  $\pi$ , il est entièrement défini par son cosinus, l’angle  $\phi$  est compris entre 0 et  $2\pi$ . Si le problème possède la symétrie cylindrique, il ne sera pas nécessaire de garder trace de l’angle  $\phi$ .

Au cours d’une diffusion, l’interaction de la particule avec le diffuseur redistribue son impulsion sur la sphère unité. On note  $\alpha$  l’angle formé entre  $\vec{p}'$  et  $\vec{p}$  et  $\beta$  l’angle dièdre entre, d’une part, le plan de diffusion contenant  $\vec{p}$  et  $\vec{p}'$  et, d’autre part, le plan méridien avant diffusion contenant  $\vec{p}$  et  $\vec{e}_z$ , voir figure 2.

### 2.2.4 Résolution du triangle sphérique de diffusion

La formule dite *des cosinus* de la trigonométrie sphérique permet de calculer  $\cos \theta'$  en fonction de  $\cos \theta$  et des angles de diffusion  $\alpha$  et  $\beta$ . On a :

$$\cos \theta' = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos \beta. \quad (3)$$

*Remarque 1.* La formule (3) est la seule qu’il faut connaître lorsque le problème possède la symétrie cylindrique autour de l’axe  $Oz$ . Dans ce cas, il est inutile de calculer l’azimut  $\phi$  du vecteur d’onde. Cependant, à titre d’information, voici comment calculer l’angle  $\phi' = \phi + \Delta\phi$  connaissant  $\phi$  :

$$\begin{aligned} \cos(\Delta\phi) &= \frac{\cos \alpha - \cos \theta' \cos \theta}{\sin \theta' \sin \theta}, \\ \sin(\Delta\phi) &= \sin \beta \frac{\sin \alpha}{\sin \theta'}. \end{aligned}$$

On calcule ensuite  $\Delta\phi$  grâce, par exemple, à la fonction atan2 du Fortran 95 :

$$\Delta\phi = \text{atan2}(\cos(\Delta\phi), \sin(\Delta\phi)).$$

### 2.2.5 La fonction de phase

En général, le vecteur diffusé  $\vec{p}'$  n’est pas distribué uniformément sur la sphère unité, la direction « avant », c’est-à-dire celle indiquée par le vecteur  $\vec{p}$ , est souvent privilégiée. La *fonction de phase*  $P$  rend compte de la distribution de  $\vec{p}'$ ,

$P$  est une densité de probabilité, qui est la limite du rapport de la probabilité  $dQ$  de trouver  $\vec{p}'$  dans l'angle solide  $d\Omega$  divisée par cet angle solide. On a :

$$P(\vec{\Omega}) = \lim_{d\Omega \rightarrow 0} \frac{dQ}{d\Omega}.$$

Dans cette expression  $\vec{\Omega}$  est un vecteur unitaire suivant la direction de  $\vec{p}'$ . La fonction  $P$  est homogène à des [stéradian<sup>-1</sup>], c'est une probabilité par unité d'angle solide. Elle est normalisée de telle sorte que :

$$\int_{4\pi} P d\Omega = 1. \quad (4)$$

Cette densité dépend de l'angle polaire  $\alpha$  et de l'azimut  $\beta$  de  $\vec{\Omega}$ . En pratique de nombreux processus de diffusion possèdent la symétrie cylindrique et  $P$  ne dépend alors que de l'angle  $\alpha$ . Dans ces conditions, on caractérisera plutôt le processus à l'aide de la fonction de phase *marginal*  $P_\alpha$  ainsi définie :

$$P_\alpha(\alpha) = \int_0^{2\pi} P(\alpha, \beta) d\beta. \quad (5)$$

Cette fonction est normalisée de telle sorte que, d'après (4) :

$$\int_0^\pi P_\alpha(\alpha) \sin \alpha d\alpha = 1. \quad (6)$$

La fonction de phase marginale est la limite de la probabilité  $dP$  de trouver  $\vec{p}'$  dans la tranche d'angle solide  $d\Omega = 2\pi \sin \alpha d\alpha$  au voisinage de l'angle  $\alpha$ , divisée par cet angle solide. Les unités de  $P_\alpha$  sont des [radian<sup>-1</sup>]. Il faut noter que  $P_\alpha(\alpha)$  n'est pas la densité de probabilité de l'angle  $\alpha$ , c'est  $P_\alpha(\alpha) \sin \alpha$  qui représente cette quantité.

Si la diffusion possède la symétrie cylindrique, on passe, d'après (5), de  $P$  à  $P_\alpha$  en multipliant  $P$  par  $2\pi$ . Dans le cas de la diffusion isotrope, par exemple, la densité  $P$  est constante, sa valeur est trouvée grâce à (4). On obtient :

$$P(\alpha, \beta) = \frac{1}{4\pi}, \quad P_\alpha(\alpha) = \frac{1}{2}.$$

Un exemple où la diffusion n'est pas isotrope, mais à symétrie cylindrique, est la diffusion de *Rayleigh* de la lumière sur les molécules de l'atmosphère dont la fonction de phase marginale est :

$$P_\alpha(\alpha) = \frac{3}{8}(1 + \cos^2 \alpha), \quad (7)$$

et la fonction de phase  $P$  :

$$P(\alpha) = \frac{1}{2\pi} P_\alpha(\alpha) = \frac{3}{16\pi}(1 + \cos^2 \alpha). \quad (8)$$

**Introduction de la variable  $\mu$ .** L'interprétation de la fonction  $P_\alpha$  peut prêter à confusion car, comme il a été remarqué ci-dessus,  $P_\alpha$  ne représente pas la densité de probabilité de la variable aléatoire  $\alpha$ . On obtiendra une vision plus claire de la situation en procédant au changement de variable  $\mu = \cos \alpha$  bijectif sur  $[0, \pi]$ . La densité de probabilité  $P_\mu$  de  $\mu$  s'obtient à partir de celle de  $\alpha$ , elle est donnée par la formule du changement de variable

$$P_\mu(\mu) = P_\alpha(\alpha) \sin(\alpha) \frac{1}{|\frac{d\mu}{d\alpha}|}_{\mu=\cos \alpha}.$$

D'où

$$P_\mu(\mu) = P_\alpha(\arccos \mu), \quad (9)$$

et réciproquement

$$P_\alpha(\alpha) = P_\mu(\cos \alpha). \quad (10)$$

La fonction  $P_\mu$  est normalisée, de telle sorte que

$$\int_{-1}^1 P_\mu(\mu) d\mu = 1.$$

Pour la diffusion uniforme et celle de Rayleigh, on aura respectivement, dans le domaine  $-1 \leq \mu \leq 1$

$$P_\mu(\mu) = \frac{1}{2}, \quad P_\mu(\mu) = \frac{3}{8}(1 + \mu^2). \quad (11)$$

Grâce à l'introduction de la variable  $\mu$ , la fonction  $P_\mu$  a pour variable  $\mu$  et représente la densité de  $\mu$ . Il n'y a plus d'ambiguïté.

**Quand la diffusion de la particule s'arrête-t-elle ?** Au fur et à mesure des diffusions, la particule pénètre dans le milieu. Si  $z$  désigne la profondeur de pénétration avant diffusion et  $z'$  cette même quantité après diffusion, on aura :

$$z' = z + s \cos \theta', \quad (12)$$

où  $s$  est le parcours effectué entre deux diffusions et  $\cos \theta'$  est calculé grâce à la formule (3).

La simulation de la trajectoire de la particule s'arrête lorsqu'elle s'échappe du milieu diffusant (ou lorsqu'elle est absorbée, mais nous n'envisagerons pas cette éventualité dans un premier temps.) Elle peut s'échapper vers l'avant, on dit alors qu'elle est diffusée, ou vers l'arrière, on dit alors qu'elle est rétro-diffusée. Afin de savoir si la particule est toujours dans le milieu diffusant, il faut en permanence mettre à jour la profondeur de pénétration  $z$  et vérifier si  $z \leq D$  et  $z \geq 0$ , dans le cas contraire la particule s'est échappée et la simulation de sa trajectoire prend fin. On lance alors la particule suivante.

**Destruction de la particule.** Le modèle peut prévoir le cas où la particule est détruite à l'occasion d'une diffusion. Ce peut être par un processus physique d'absorption par exemple. On notera  $a$  la probabilité pour que la particule survive à une diffusion (par conséquent  $1 - a$  est la probabilité pour quelle soit détruite). On donnera à  $a$  le nom d'*albedo* de la diffusion.

**Quelles données faut-il sauvegarder ?** Un des objectifs de cette simulation est de construire un diagramme de diffusion, c'est-à-dire une représentation polaire  $(\rho, \theta)$  où  $\theta$  est l'angle polaire des particules qui s'échappent de la couche diffusive, et  $\rho = P_\theta(\theta)$  la fonction de phase des particules sortantes. À cette fin, il faut garder en mémoire l'angle  $\theta$  de l'impulsion au moment où la particule sort du milieu et compter les particules qui sortent au voisinage de cet angle.

Pour un couche diffusante homogène sous forme d'un plan infini et des particules arrivant toutes perpendiculairement à celui-ci, le problème possède la symétrie cylindrique et les particules doivent émerger avec une impulsion possédant cette même symétrie. Si la simulation a été correctement conduite, l'azimut  $\phi$  devrait alors être uniformément réparti entre 0 et  $2\pi$ . Cette propriété peut éventuellement servir à valider le programme.

### 2.3 Le modèle plan parallèle

Le modèle est dit « plan parallèle » lorsque le milieu diffusif est, vis-à-vis des quantités caractérisant la diffusion, invariant par translation dans un plan perpendiculaire à l'axe  $z$  de pénétration des particules.

Le phénomène de diffusion est caractérisé par la redistribution de l'impulsion des particules diffusées et de leur libre parcours moyen  $\ell$  entre deux diffusions. Cette dernière quantité étant fonction de la densité  $n$  de diffuseurs et de la section efficace  $C_{\text{sca}}$  de la diffusion, suivant la formule  $\ell = (nC_{\text{sca}})^{-1}$ .

Si la densité  $n$  et la section efficace  $C_{\text{sca}}$  ne dépendent que de la profondeur  $z$ , alors nous avons affaire à un modèle plan parallèle. Dans ces conditions, il est possible de trouver un changement de variable  $\tau = \tau(z)$  tel qu'après celui-ci, le libre parcours moyen apparaîsse constant au sein du milieu diffusif. Il suffit pour cela que les variations de  $\tau$  en fonction de  $z$  se conforment exactement à celles de  $C_{\text{sca}}n$ . Cela veut dire que la dérivée de  $\tau$  par rapport à  $z$  doit être égale à  $C_{\text{sca}}(z)n(z)$ . Il vient

$$\frac{d\tau}{dz} = C_{\text{sca}}(z)n(z). \quad (13)$$

On impose en outre que  $\tau(0) = 0$ . On obtient alors

$$\tau(z) = \int_0^z C_{\text{sca}}(u)n(u) du. \quad (14)$$

On donnera à la variable sans dimension  $\tau$  le nom d'*épaisseur optique*<sup>2</sup>.

Soit  $N(\Delta A, z, z + \Delta z)$  le nombre de diffuseurs compris dans le cylindre de section  $\Delta A$  perpendiculaire à l'axe  $z$  et délimité par les plans  $z$  et  $z + \Delta z$ . Par hypothèse du modèle plan parallèle, la densité numérique  $n$  de diffuseurs en  $z$  n'est fonction que de  $z$ . Cette quantité est donnée par la limite

$$n(z) = \lim_{\Delta A, \Delta z \rightarrow 0} \frac{N(\Delta A, z, z + \Delta z)}{\Delta A \Delta z}.$$

Calculons la densité numérique  $n_\tau$  de diffuseurs suivant la variable  $\tau$

$$n_\tau(\tau) = \lim_{\Delta A, \Delta z \rightarrow 0} \frac{N(\Delta A, \tau, \tau + \Delta \tau)}{\Delta A \Delta \tau} = \lim_{\Delta A, \Delta z \rightarrow 0} \frac{N(\Delta A, \tau, \tau + \Delta \tau)}{\Delta A \Delta \tau} \frac{\Delta z}{\Delta z},$$

2. Cette définition de l'épaisseur optique diffère de la définition classique qui tient aussi compte de l'absorption, mais pour suivre l'évolution d'une particule non absorbée, il ne faut tenir compte que de  $C_{\text{sca}}$ . En outre, l'axe des  $z$  est parfois orienté de l'observateur vers la source ce qui induit un changement de signe dans la définition de  $\tau$ .

$$= \lim_{\Delta A, \Delta z \rightarrow 0} \frac{N(\Delta A, \tau, \tau + \Delta \tau)}{\Delta A \Delta z} \frac{\Delta z}{\Delta \tau}.$$

Le rapport  $\Delta \tau / \Delta z$  tend vers  $d\tau/dz$  lorsque  $z \rightarrow 0$ ; cette dérivée est égale à  $C_{\text{sca}}(z)n(z)$  d'après l'équation (13). Par ailleurs, le changement de variable  $\tau(z)$  est bijectif; connaissant  $\tau$  on peut en déduire  $z$  de façon univoque et réciproquement, c'est ce qu'on appelle un difféomorphisme. Cette application possède la propriété de conserver la topologie. Il s'ensuit que le nombre de diffuseurs comptés dans le cylindre suivant la variable  $z$  est identique à celui compté suivant la variable  $\tau$  dans l'image du cylindre par l'application  $\tau$ . Il vient

$$\begin{aligned} n_\tau(\tau) &= \lim_{\Delta A, \Delta z \rightarrow 0} \frac{N(\Delta A, \tau, \tau + \Delta \tau)}{\Delta A \Delta z} \frac{1}{\frac{\Delta \tau}{\Delta z}}, \\ &= \lim_{\Delta A, \Delta z \rightarrow 0} \frac{N(\Delta A, z, z + \Delta z)}{\Delta A \Delta z} \frac{1}{C_{\text{sca}}(z)n(z)}, \\ &= n(z) \frac{1}{C_{\text{sca}}(z)n(z)} = C_{\text{sca}}^{-1}(z). \end{aligned}$$

La section efficace en  $\tau$  est égale à celle en  $z$  pour  $z = \tau^{-1}(\tau)$ . Le libre parcours moyen  $\ell_\tau$  est alors égal, pour tout  $\tau$ , à la constante  $\ell_\tau = C_{\text{sca}}(z)C_{\text{sca}}^{-1}(z) = 1$ . Par conséquent, la longueur du trajet suivi par les particules après diffusion suit une loi exponentielle de paramètre égal à un. On simule ces longueurs  $S$  de la façon suivante :  $S = -\ln U$ , où  $U$  est une variable uniforme entre 0 et 1.

À titre d'exemple, montrons comment fonctionne ce mécanisme lorsque la couche diffusante est homogène, d'épaisseur  $D$  et où le libre parcours moyen y est partout égal à  $\ell$ . On a

$$\tau = \int_0^z C_{\text{sca}} n \, du = \int_0^z \frac{du}{\ell} = \frac{z}{\ell}.$$

En particulier

$$\tau_{\max} = \frac{D}{\ell}.$$

Dans ce cas, l'épaisseur optique s'interprète comme étant l'épaisseur de la couche, mesurée en unité du libre parcours moyen. L'idée reste la même dans le cas plan parallèle, à ceci près que l'unité de mesure change en fonction de  $z$  et qu'il faut procéder à une somme intégrale.

## 2.4 Justification et limites de la méthode

Introduisons la variable aléatoire indicatrice :  $\mathbf{1}_A$  qui vaut 1 si  $A$  est réalisé et 0 dans le cas contraire. Cette variable, appelée aussi variable de Bernoulli, possède la moyenne  $E\{\mathbf{1}_A\} = 1 \times \Pr\{A\} + 0 \times (1 - \Pr\{A\})$ , ce qui permet d'écrire

$$\Pr\{A\} = E\{\mathbf{1}_A\}. \quad (15)$$

Cette formule, bien que très simple à établir, est d'une grande importance pratique notamment pour la méthode de Monte-Carlo. En effet, si  $A$  désigne un événement lié au problème physique étudié, par exemple l'émergence d'une particule dans un certain angle solide,  $\Pr\{A\}$  est, en général, la quantité que l'on souhaite connaître et la formule (15) dit qu'elle est identique à l'espérance de la variable qui rend compte du succès de l'expérience. Afin d'estimer cette espérance, il faut alors faire appel à la *loi des grands nombres*. Cette loi stipule que la moyenne arithmétique de  $n$  variables aléatoires indépendantes possédant toutes la même moyenne converge en un sens probabiliste, et lorsque  $n$  tend vers l'infini, vers cette moyenne commune. Si  $\mathbf{1}_{A_i}$  désigne le résultat de la simulation numéro  $i$  et  $n$  le nombre de ces simulations, on a pour des expériences numériques indépendantes

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{A_i} \xrightarrow{\text{p.s.}} E\{\mathbf{1}_A\}, \text{ lorsque } n \rightarrow \infty. \quad (16)$$

La discussion précédente est exacte tant que les objets étudiés peuvent être assimilés à des particules et que le phénomène physique est correctement simulé. Mais on sait qu'à une particule réelles est associé une onde et que celle-ci peut jouer un rôle central, par exemple dans le cas des photons. Compter des photons revient à faire une addition non-cohérente des ondes issues des divers diffuseurs, à condition qu'ils soient éloignés les uns des autres, on supposera que l'on se trouve toujours dans ce cas. Suivant la discussion du chapitre 4.22 de l'ouvrage de van de Hulst [12], lorsque les contributions sont nombreuses, le terme d'interférence disparaît en tant que somme de termes portant une phase pratiquement aléatoire.

Processus de Markov, équations de Fokker-Planck, équation de transfert.

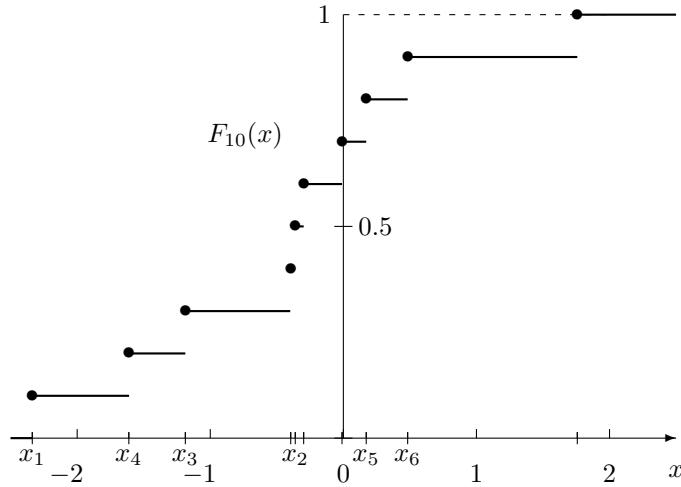


FIGURE 3 – Exemple d'une réalisation de la fonction de répartition empirique  $F_N(x)$  d'un échantillon normal réduit de taille  $N = 10$ . Pour plus de clarté seuls les six premières valeurs de l'échantillon ont été identifiées sur l'axe des  $x$ .

## 2.5 Comparaison entre simulation et résultats attendus

Afin d'illustrer le résultat obtenu et d'en dégager les caractéristiques, il nous faut construire les fonctions de répartitions empiriques  $F_N$  des  $\phi$  et des  $\theta$ , elles nous serviront d'approximation des fonctions de répartitions 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 3). La définition de  $F_N$  pour un  $\phi$  quelconque est donné par l'expression :

$$F_N(\phi) = \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{\phi_i \leq \phi}. \quad (17)$$

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 avec 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.

Puisque le hasard intervient, les fonctions empiriques  $F_N(\phi)$  ou  $F_N(\theta)$  ne seront pas égales aux fonctions  $F$  vraies respectives. Les valeurs  $F_N(\phi)$  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 empirique  $F_N(x)$  est une variable binomiale de moyenne  $F(x)$  et d'écart type  $[\frac{1}{N}F(x)(1 - F(x))]^{1/2}$ . 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  $\sigma = [\frac{1}{N}F(\phi)(1 - F(\phi))]^{1/2}$  soit  $\sigma = [\frac{1}{N}\frac{\phi}{2\pi}(1 - \frac{\phi}{2\pi})]^{1/2}$ , 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 aléatoires 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  $S/B = F(\phi)/[\frac{1}{N}\frac{\phi}{2\pi}(1 - \frac{\phi}{2\pi})]^{1/2}$ , il faudra effectuer  $N = (S/B)^2$  soit 10 000 simulations.

**Validation *a posteriori* de la simulation.** 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 le 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 :

$$D_{\max}(F_N, F) = \max_{\phi} |F_N(\phi) - F(\phi)|. \quad (18)$$

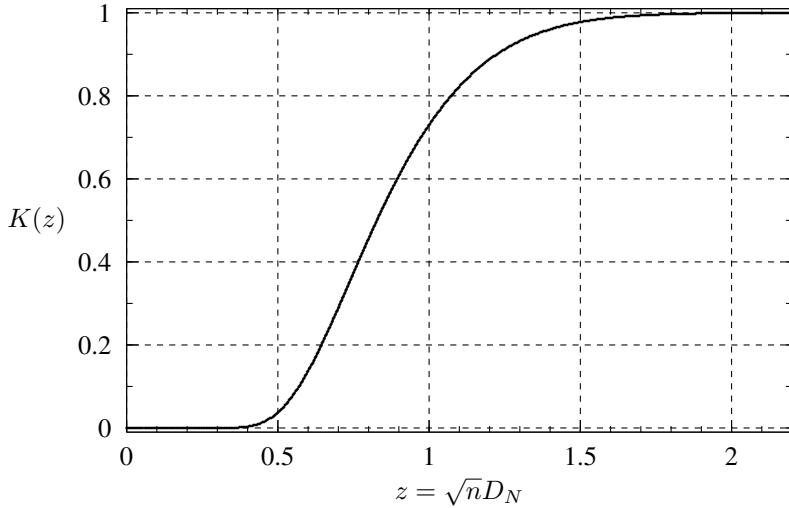


FIGURE 4 – Fonction de répartition de Kolmogorov  $K(z)$ . La variable  $D_n$  est la statistique de Kolmogorov,  $N$  est la taille de l'échantillon.

À la condition de considérer les valeurs  $F_N^+(\phi_i)$  et  $F_N^-(\phi_i)$  à droite et à gauche de la discontinuité, il suffit de chercher le maximum pour les  $\phi_i$ , et non pour  $\phi$  quelconque, car  $\max_\phi$  a nécessairement lieu en ces points. L'équation (18) s'écrit alors :

$$D_{\max} = \max_i \left( \left| \frac{i}{N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right|, \left| \frac{i-1}{N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right| \right). \quad (19)$$

Cette dernière équation se simplifie car, en considérant le point situé au milieu de la discontinuité, on obtient :

$$\max \left( \left| \frac{i}{N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right|, \left| \frac{i-1}{N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right| \right) = \left| \frac{2i-1}{2N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right| + \frac{1}{2N},$$

d'où

$$D_{\max} = \max_i \left| \frac{2i-1}{2N} - \frac{\phi_i}{2\pi} \right| + \frac{1}{2N}. \quad (20)$$

Un résultat d'Andrei Kolmogorov dit que la variable  $z = \sqrt{N}D_{\max}$  possède une fonction de répartition  $K$  asymptotiquement indépendante de la loi  $F$  (voir figure 4). Il serait très surprenant, si les simulations s'étaient 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 a été correctement effectuée, on a :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \Pr_{\phi}(\sqrt{N} \max |F_N(\phi) - F(\phi)| \leq z) = K(z), \quad (21)$$

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

$$K(z) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (-1)^k \exp(-2k^2 z^2) = 1 - 2 \sum_{k=1}^{+\infty} (-1)^{k+1} \exp(-2k^2 z^2). \quad (22)$$

La série converge très vite. Dès que  $N$  est supérieur à environ 30, on a avec une bonne approximation

$$\Pr\{\sqrt{N}D_{\max} > 1.36\} = 0.05. \quad (23)$$

### 3 Simuler des variables aléatoires

#### 3.1 La loi uniforme entre 0 et 1

Afin de simuler des variables aléatoires obéissant à des lois données, il faut disposer d'un générateur capable de délivrer des nombres pseudo-aléatoires répartis uniformément entre 0 et 1.

##### 3.1.1 Définition

Une variable aléatoire  $U$  est uniforme entre 0 et 1, si elle possède la fonction de répartition  $F_U(u)$  définie sur  $\mathbb{R}$  de la façon suivante

$$F_U(u) = \begin{cases} 0, & \text{si } u \leq 0; \\ u, & \text{si } 0 \leq u \leq 1; \\ 1, & \text{si } u \geq 1. \end{cases} \quad (24)$$

La densité de probabilité de  $U$  est

$$f_U(u) = \begin{cases} 0, & \text{si } u < 0 ; \\ 1, & \text{si } 0 < u < 1 ; \\ 0, & \text{si } u > 1. \end{cases} \quad (25)$$

Les valeurs  $f_U(0)$  et  $f_U(1)$  peuvent être arbitrairement fixées à 0 ou 1.

### 3.1.2 Appel à une fonction intrinsèque du language de programmation

Le language Fortran 95, par exemple, intègre dans sa norme le calcul de nombres pseudo-aléatoires suivant la loi uniforme par l'intermédiaire de l'appel à un 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 `Random_number`. Les générateurs de nombres aléatoires doivent pouvoir produire : soit toujours la même série de nombres (en phase de test, par exemple) ; soit une série différente à chaque lancement du programme dans la phase d'exploitation. 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 = [s_1, s_2, ..., s_k]
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.

Il importe de bien comprendre la logique de ces appels. La formule mathématique qui permet de générer la suite  $u_0, u_1, \dots, u_n, \dots$ , où  $0 \leq u_n \leq 1$ , est déterministe. Ainsi, au même  $u_0$  correspondra toujours la même suite. C'est l'appel d'initialisation `Random_seed` qui générera un  $u_0$  aléatoire et partant une suite différente. L'appel initial peut faire référence, par exemple, à l'horloge interne du calculateur. La période  $N$  de la suite est supérieure à  $2^{123}$ , c'est-à-dire qu'au bout de  $N \approx 10^{37}$  appels à `Random_number`, on retrouve la valeur initiale  $u_0$ . Ce nombre  $u_0$  étant un membre de la suite (c'est le successeur de  $u_N$ ), il est aussi égal à l'un des  $u_n$  généré avec une autre valeur de départ. S'il n'en était pas ainsi, on pourrait créer une suite de période plus élevée<sup>3</sup>. Tout se passe comme si on avait rangé les  $\approx 10^{37}$  valeurs  $u_n$  sur une gigantesque roue de tombola, l'appel à `Random_seed` désigne au hasard un nombre  $u_0$  de cette roue et `Random_number` renvoie celui qui est placé juste à côté, puis le suivant, et ainsi de suite.

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

## 3.2 La méthode par inversion

### 3.2.1 Cas des lois continues

Un résultat classique de la théorie du changement de variables aléatoires, dit que si  $F$  désigne la fonction de répartition d'une variable aléatoire continue  $X$ , alors la variable aléatoire  $F(X)$  est uniforme entre 0 et 1.

*Démonstration.* On connaît la fonction de répartition  $F$  de la variable  $X$  qui, par définition, est égale à :

$$F(x) \stackrel{\text{déf}}{=} \Pr\{X \leq x\}.$$

On désire connaître  $G$  la fonction de répartition de la variable  $U = F(X)$ .

---

3. Je dois cet argument à Fabrice Roy.

La variable  $U$  étant définie en tant que fonction de répartition, ses valeurs sont nécessairement comprises entre 0 et 1. Pour  $0 \leq u \leq 1$ , on a :

$$\begin{aligned} G(u) &\stackrel{\text{def}}{=} \Pr\{U \leq u\}, \\ &= \Pr\{F(X) \leq u\}, \\ &= \Pr\{X \leq F^{-1}(u)\}, \\ &= F(F^{-1}(u)), \\ &= u. \end{aligned}$$

Finalement :

$$G(u) = \begin{cases} 0, & \text{si } u \leq 0; \\ u, & \text{si } 0 \leq u \leq 1; \\ 1, & \text{si } u \geq 1. \end{cases}$$

La variable  $U$  suit une loi uniforme entre 0 et 1 (sa densité est constante).  $\square$

On écrira  $F(X) = U$ , en donnant à l'égalité entre variables aléatoires le sens qu'elles sont égales si leurs fonctions de répartitions sont identiques (sauf, peut-être, en leurs points de discontinuité). Il est alors possible d'utiliser le changement de variables 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 pratique, cette procédure n'est efficace que si  $F$  est facilement inversible.

**Exemple : la loi exponentielle.** La loi exponentielle est une loi continue, de fonction de répartition  $F(x) = 1 - e^{-x/\ell}$ , 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 (au sens défini plus haut). Ainsi, pour générer une variable aléatoire suivant la loi exponentielle de paramètre  $\ell$ , il suffira de tirer des nombres pseudo-aléatoires suivant la loi uniforme, d'en prendre le logarithme (qui suit alors la loi exponentielle de paramètre 1), et de multiplier le résultat par  $\ell$ .

### 3.2.2 Cas des lois discrètes

Considérons le cas d'une variable aléatoire discrète  $X$  prenant les valeurs  $X_k$  avec la probabilité  $p_k$  :  $\Pr(X = X_k) = p_k$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Il est facile de simuler la variable  $X$  à l'aide d'une variable  $U$  uniforme entre 0 et 1, en remarquant que d'après la définition de la fonction de répartition de la loi uniforme

$$\Pr(F(X_{k-1}) < U \leq F(X_k)) = F(X_k) - F(X_{k-1}) = p_k.$$

La méthode consiste alors à générer une variable  $U$  uniforme entre 0 et 1, repérer l'intervalle  $(X_{k-1}, X_k)$  où  $F(X_{k-1}) < U \leq F(X_k)$  et d'affecter à  $X$  la borne supérieure de  $(X_{k-1}, X_k)$ . La valeur  $X_k$  est donc la plus petite valeur  $x$  telle que  $F(x) \geq U$ . Si on introduit l'inverse généralisée  $F^{(-1)}$  de la façon suivante

$$F^{(-1)}(u) = \inf\{x | F(x) \geq u\}, \quad (26)$$

on peut alors étendre la méthode par inversion au cas discret et écrire

$$X_k = F^{(-1)}(U). \quad (27)$$

Comme l'inverse généralisée coïncide avec l'inverse si  $F$  est continue, la validité de cette définition s'étend à toutes les variables aléatoires quelles soient discrètes ou continues.

**Exemple : la loi géométrique.** La loi géométrique indique le rang du premier succès dans une suite d'épreuves indépendantes de Bernoulli et de paramètre  $p$ . Ce paramètre est la probabilité de succès d'une épreuve. Si la variable  $X$  suit une loi géométrique, on a  $\Pr(X = k) = p(1-p)^{k-1}$ ,  $k = 1, 2, \dots$ . Sa fonction de répartition est  $F(x) = 1 - (1-p)^{\lfloor x \rfloor}$ . Afin de simuler  $X$ , on écrit

$$U = 1 - (1-p)^{\lfloor X \rfloor},$$

$$\begin{aligned}
(1-p)^{\lfloor X \rfloor} &= 1 - U = U, \\
\lfloor X \rfloor \ln(1-p) &= \ln(U), \\
\lfloor X \rfloor &= \frac{\ln(U)}{\ln(1-p)}.
\end{aligned}$$

Le point délicat est d'inverser, au sens généralisé, la fonction  $\lfloor x \rfloor = y$ . D'après la définition (26) de l'inverse généralisé,  $x$  est la plus petite valeur telle que  $\lfloor x \rfloor \geq y$ , mais  $\lfloor x \rfloor$  étant un entier,  $x$  est alors le plus petit entier supérieur ou égal à  $y$ , c'est-à-dire  $\lceil y \rceil$ . On obtient finalement

$$X = \left\lceil \frac{\ln(U)}{\ln(1-p)} \right\rceil.$$

### 3.3 Ne lancer que les particules qui vont interagir

Le but de la simulation de Monte-Carlo étant d'étudier l'interaction des photons avec le milieu diffusif, on rencontrera une difficulté lorsque l'épaisseur optique de la couche diffusive  $\tau_{\max}$  sera très petite devant un. En effet, la probabilité pour qu'un photon traverse la couche sans interagir est donnée par :

$$\Pr(T_1 > \tau_{\max}) = 1 - F(\tau_{\max}) = \exp(-\tau_{\max}),$$

où  $T_1$  désigne la première épaisseur optique atteinte par les photons. Si, par exemple,  $\tau_{\max} = 0.1$  la probabilité pour qu'un photon passe au travers de la couche sans interagir (c'est-à-dire  $T_1 > \tau_{\max}$ ) est d'environ 0.9048. L'idée est alors de ne retenir que les photons qui interagissent et de générer le premier parcours suivant une loi de probabilité *conditionnelle* relative à l'événement  $B = \{T_1 \leq \tau_{\max}\}$ . Il vient :

$$F(\tau|B) = \Pr(T_1 \leq \tau|B) = \frac{\Pr(T_1 \leq \tau, B)}{\Pr(B)}.$$

La probabilité au numérateur est celle de l'événement  $\{T_1 \leq \tau\}$  et  $\{T_1 < \tau_{\max}\}$ . Pour que les deux événements soient réalisés simultanément, il faut que  $T_1$  soit inférieur ou égal à la plus petite des deux valeurs  $\tau$  et  $\tau_{\max}$ . Il vient :

$$\Pr(T_1 \leq \tau, B) = \begin{cases} 0, & \text{si } \tau \leq 0; \\ 1 - \exp(-\tau), & \text{si } 0 < \tau \leq \tau_{\max}; \\ 1 - \exp(-\tau_{\max}), & \text{si } \tau > \tau_{\max}. \end{cases}$$

La probabilité au dénominateur joue le rôle de constante de normalisation, elle vaut :

$$\Pr(B) = 1 - \exp(-\tau_{\max}).$$

Il vient :

$$F(\tau|B) = \begin{cases} 0, & \text{si } \tau \leq 0; \\ \frac{1 - \exp(-\tau)}{1 - \exp(-\tau_{\max})}, & \text{si } 0 < \tau \leq \tau_{\max}; \\ 1, & \text{si } \tau > \tau_{\max}. \end{cases} \quad (28)$$

On simule la variable  $T_1$  entre 0 et  $\tau_{\max}$  de la même façon que précédemment. On trouve :

$$T_1 = -\ln(1 - bU), \text{ avec } b = 1 - \exp(-\tau_{\max}). \quad (29)$$

La variable  $bU$  est uniforme entre 0 et  $b$ , le processus revient alors à choisir un nombre uniformément entre 0 et  $b = 1 - \exp(-\tau_{\max})$  et à inverser la fonction de répartition de façon à obtenir  $T_1$ . Notez que l'on serait parvenu directement à ce résultat en considérant la probabilité conditionnelle de la variable uniforme permettant de générer bijectivement la variable  $T$ .

### 3.4 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 un tel couple, et plus généralement pour un  $n$ -uplet de variables aléatoires, se pose alors le problème délicat de l'indépendance des variables. On dit, par exemple, 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  $d\mu$  d'obtenir un point dans l'angle solide  $d\Omega$  doit être constante. Plus précisément on doit avoir  $d\mu = d\Omega/4\pi$ , soit  $d\mu = \sin\theta d\theta d\phi/4\pi$ . La densité du couple est alors  $f(\theta, \phi) = d\mu/d\Omega = \sin\theta/4\pi$ . Elle peut être écrite sous la forme d'un produit de deux densités :  $(\sin\theta/2) \times (1/2\pi)$  qui démontre que notre simulation peut être réalisée grâce à deux

variables aléatoires indépendantes : la variable  $\phi$  uniforme entre 0 et  $2\pi$  et la variable  $\theta$  de densité  $\frac{1}{2} \sin \theta$  entre 0 et  $\pi$ . Il est important de noter que  $\theta$  ne suis *pas* une loi uniforme. Afin de simuler  $\theta$ , on peut faire appel à la méthode de l'image d'une variable uniforme par  $F^{-1}$ , ce qui impose d'avoir calculé au préalable la fonction de répartition  $F$  de la variable  $\theta$ . On a :

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

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 il existe une façon de parvenir à un résultat de meilleure qualité car plus symétrique dans les coordonnées cartésiennes  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Cette méthode est exposée en détails au chapitre A.1 de l'appendice.

## 4 La diffusion isotrope

Dans le cas de la diffusion isotrope, la distribution des impulsions (ou vecteurs d'ondes) *après* diffusion ne dépend pas de celle *avant* diffusion. Il n'y a alors aucune raison de privilégier l'impulsion  $\vec{p}$  avant diffusion afin de repérer les angles de diffusion. On mesurera ces derniers par rapport à la direction fixe  $Oz$ . Lorsqu'une diffusion se produira, seule comptera la distribution de  $\mu = \cos \theta$ , qui est uniforme entre  $-1$  et  $1$ .

### 4.1 Comment estimer la fonction de phase ?

#### 4.1.1 Construction du tableau « phase »

Le but de la simulation, est d'obtenir une approximation de la fonction de phase marginale  $P_\theta$  des particules au sortir de la couche diffusante. Cette fonction est la densité de probabilité d'obtenir une impulsion, après diffusion par le milieu, par tranche d'angle solide  $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$  c'est-à-dire  $d\Omega = 2\pi d\mu$ . Pour ce faire, on découpera la sphère unité en tranches d'égales épaisseurs  $\Delta\mu$ , où  $\mu = \cos \theta$ . Il y aura  $N_{\text{phase}}$  tranches qui découpent la sphère en autant d'angles solides  $\Delta\Omega_k = 4\pi/N_{\text{phase}}$ .

Il faut ensuite compter le nombre de particules diffusées dont l'impulsion pointe dans l'angle solide  $\Delta\Omega_k$ . On définit pour cela la variable indicatrice  $\mathbf{1}_{\vec{p}_n \in \Delta\Omega_k}$  qui vaut 1 si l'impulsion  $\vec{p}_n$  de la  $n^{\text{e}}$  particule diffusée pointe dans l'angle solide  $\Delta\Omega_k$  et qui vaut 0 dans le cas contraire. A la fin de la simulation, après avoir lancé  $N_{\text{part}}$  particules, on en obtient  $N_k$  dans la tranche  $k$  :

$$N_k = \sum_{n=1}^{N_{\text{part}}} \mathbf{1}_{\vec{p}_n \in \Delta\Omega_k}. \quad (30)$$

Cette quantité  $N_k$  sera rangée dans la case  $\text{phase}(k)$  du tableau  $\text{phase}$  de dimension  $N_{\text{phase}}$ . D'après la loi des grands nombres, lorsque  $N_{\text{part}} \rightarrow \infty$ , la quantité  $N_k$  tend vers la moyenne du nombre de particules pointant dans la tranche  $k$ . Cette valeur moyenne est égale à  $N_{\text{part}} p_k$ , où  $p_k$  est la probabilité pour qu'une particule diffusée pointe dans l'angle solide  $\Delta\Omega_k$ . Pour  $N_{\text{part}}$  assez grand on aura  $p_k \approx N_k/N_{\text{part}}$ .

La valeur de la fonction de phase normalisée correspond à une probabilité par unité d'angle solide. Afin de l'estimer, il conviendra de diviser  $p_k$  par  $\Delta\Omega_k = 4\pi/N_{\text{phase}}$  afin d'obtenir :

$$\frac{N_k}{N_{\text{part}}} \frac{N_{\text{phase}}}{4\pi}. \quad (31)$$

La fonction de phase  $P_\theta$  est égale à cette quantité multipliée par  $2\pi$ . On obtiendra :

$$P_\theta(\theta_k) \approx \frac{N_k}{N_{\text{part}}} \frac{N_{\text{phase}}}{2}. \quad (32)$$

(On notera que  $2/N_{\text{phase}} = \Delta\mu$ .) En résumé, après avoir compté  $N_k$  dans  $\text{phase}(k)$ , il faudra normaliser cette quantité en la multipliant par  $\frac{1}{2} N_{\text{phase}}/N_{\text{part}}$ .

#### 4.1.2 Comment repérer la tranche d'angle solide où pointe l'impulsion ?

Par définition, le tableau phase compte dans phase( $k$ ) le nombre de particules dont le vecteur impulsion pointe dans des tranches d'égal angle solide  $4\pi/N_{\text{phase}}$ . Il est plus commode de repérer l'impulsion à l'aide du cosinus de son angle polaire :  $\mu = \cos \theta$ . Suivant cette vision des choses, la case  $k$  du tableau phase rassemble donc tous les  $\mu$  tels que :

$$-1 + (k - 1)\Delta\mu \leq \mu < -1 + k\Delta\mu. \quad (33)$$

Afin de déterminer  $k$  il faut résoudre ce système de deux inéquations. On obtient :

$$\frac{\mu + 1}{\Delta\mu} < k \leq \frac{\mu + 1}{\Delta\mu} + 1. \quad (34)$$

Il n'y a qu'un seul entier dans cet intervalle, il s'agit du plus grand entier inférieur ou égal à  $\frac{\mu + 1}{\Delta\mu} + 1$ . On le note :

$$k = \left\lfloor \frac{\mu + 1}{\Delta\mu} + 1 \right\rfloor = \left\lfloor \frac{\mu + 1}{\Delta\mu} \right\rfloor + 1. \quad (35)$$

Le cas  $\mu = 1$  n'a cependant pas été traité car la dernière case du tableau phase, à cause de l'inégalité stricte à droite de (33), ne reçoit que les  $\mu < 1$ . Si on utilise l'équation (35) pour  $\mu = 1$ , on sera amené à chercher la case phase( $N_{\text{phase}} + 1$ ) qui n'existe pas. On contourne cette difficulté en augmentant légèrement la valeur de  $\Delta\mu$  d'un facteur  $1 + \epsilon$ , où  $\epsilon$  est le plus petit réel représentable en machine tel que  $1 + \epsilon > 1$ . En code fortran, on obtient cette valeur en faisant appel à la fonction prédéfinie `Epsilon`.

#### 4.2 Pseudo-code de la diffusion isotrope

La procédure ci-dessous détaille, en pseudo-code, comment doit être construit l'algorithme de la diffusion isotrope dans un milieu plan-parallèle. En **Z1**, la constante  $\epsilon$  est le plus petit réel représentable en machine, à la précision voulue, tel que  $1 + \epsilon > 1$ . En fortran,  $\epsilon$  est donné par la fonction prédéfinie.

##### Algorithme Z Diffusion isotrope.

###### **Z0.** Choix des paramètres.

Saisir( $\tau_{\max}$ ), caractérisant le milieu.

Saisir(seed), initialisation des simulations.

Saisir( $N_{\text{part}}$ ), nombre de particules lancées.

$1 - e^{-\tau_{\max}} \rightarrow b$

$0 \rightarrow N$

###### **Z1.** Mise en place de la fonction de phase.

Saisir( $N_{\text{phase}}$ ), nombre d'angles solides.

Reserver la place mémoire pour le tableau : phase(1: $N_{\text{phase}}$ ).

$2(1 + \epsilon)/N_{\text{phase}} \rightarrow \Delta\mu$

$0 \rightarrow \text{phase}$

###### **Z2.** Mise en place de la fonction source (1<sup>re</sup> diffusion).

$1 \rightarrow n_{\text{diff}}$ , nombre de diffusions subies avant sortie de la couche

$1 \rightarrow \mu$ , (par définition  $\mu = \cos \theta$ ).

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

$-\ln(1 - bU) \rightarrow \tau$ , épaisseur optique conditionnelle de pénétration.

###### **Z3.** Calcul de la diffusion suivante.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2$

$2U_1 - 1 \rightarrow \mu$ , choix du nouveau  $\mu$  après diffusion.

$-\ln(U_2) \rightarrow s$ , choix du nouveau parcours.

$\tau + s\mu \rightarrow \tau$ , nouvelle épaisseur optique de pénétration.

###### **Z4.** Est-on sorti de la couche diffusante ?

Si  $\tau < 0$  ou si  $\tau > \tau_{\max}$ , aller en **Z5**.

Sinon,  $n_{\text{diff}} + 1 \rightarrow n_{\text{diff}}$

Aller en **Z3**.

###### **Z5.** Sortie de la particule : mise en mémoire de la phase.

$\lfloor \frac{\mu + 1}{\Delta\mu} \rfloor + 1 \rightarrow k$ , calcul de l'indice.

phase( $k$ ) + 1  $\rightarrow$  phase( $k$ ).

$N + 1 \rightarrow N$ , il a été procédé à une diffusion de plus.

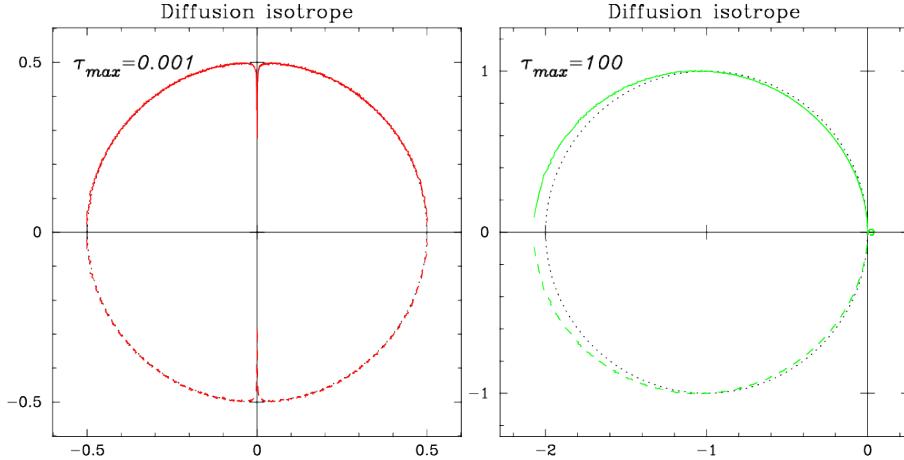


FIGURE 5 – Diagrammes polaires des fonctions de phase de la diffusion isotrope obtenues par simulation du cas optiquement mince, à gauche, et du cas optiquement épais, à droite. Il a été lancé  $10^8$  particules. Pour obtenir plus de lisibilité, on a symétrisé les fonctions de phase autour de l’axe horizontal de pénétration des particules.

#### Z6. La simulation doit-elle continuer ?

Si  $N < N_{\text{part}}$ , aller en **Z2**.

#### Z7. Fin des simulations : mise en forme des résultats.

Pour  $k = 1$  à  $N_{\text{phase}}$   
 $(\text{phase}(k)/N_{\text{part}})(N_{\text{phase}}/2) \rightarrow \text{phase}(k)$ , normalisation.  
 $\text{phase}(k) \rightarrow \rho$ ;  $\arccos(\Delta\mu(k - \frac{1}{2}) - 1) \rightarrow \theta$   
 Ecrire  $\rho$  et  $\theta$ .

Il est facile de modifier cette procédure, de façon à inclure le cas  $\tau_{\max} = \infty$ . Il suffit pour cela de saisir  $e^{-\tau_{\max}}$  au lieu de  $\tau_{\max}$  en **Z0** et de remplacer le test de sortie en **Z4** par l'instruction

Si  $e^{-\tau} > 1$  ou si  $e^{-\tau} < 1 - b$ , aller en **Z5**.

### 4.3 Comment valider l'algorithme ?

Afin de s'assurer du bon fonctionnement d'un programme issu de l'algorithme ci-dessus, on peut comparer les résultats qu'il délivre avec ceux attendus dans le cas optiquement mince où  $\tau_{\max} \ll 1$  et le cas optiquement épais où  $\tau_{\max} \gg 1$ .

Dans le cas optiquement mince, les particules ne subissent qu'une diffusion et la fonction de phase  $P_D$  de la couche doit être égale à la fonction de phase  $P_\mu$  de la diffusion, sauf pour  $\mu = 0$  car la particule ne peut pas s'échapper. On doit avoir pour  $\mu \neq 0$ ,  $P_D(\mu) = P_\mu(\mu)$  et  $P_D(0) = 0$ . Dans le cas de la diffusion isotrope  $\mu$  est une variable aléatoire uniforme entre  $-1$  et  $+1$ , on a  $P_\mu(\mu) = \frac{1}{2}$ . Si on trace la fonction de phase en coordonnées polaires où  $\rho = P_D(\mu)$  et  $\theta$  est l'angle polaire dont le cosinus est au milieu de la tranche d'épaisseur  $\Delta\mu$ , on doit obtenir un demi cercle de rayon  $\frac{1}{2}$  centré sur l'origine, avec une discontinuité pour  $\theta = \pi/2$ . Ce test correspond à la simulation représentée en rouge sur la partie gauche de la figure 5.

Dans le cas optiquement épais, si la couche diffusante pouvait être assimilée à un corps noir, le nombre de particules (dans ce cas des photons) émises par unité d'angle solide serait proportionnel à la surface émettrice projetée suivant la ligne de visée. Cela conduirait à une fonction de phase proportionnelle au cosinus de l'angle entre la normale à la surface et la direction de visée. On aurait  $P_\theta(\theta) \propto \cos \theta$  et la fonction en  $\mu$  serait :  $P_\mu(\mu) = -2\mu$  pour  $-1 \leq \mu \leq 0$  et  $P_\mu(\mu) = 0$  ailleurs (on notera que  $f$  est correctement normalisée). Les particules ne sont pas nécessairement des photons et le milieu ne se comporte pas exactement comme un corps noir, mais le nombre de diffusions subies par les particules à l'intérieur de la couche pouvant être très grand, on peut très grossièrement supposer que, sur quelques libres parcours moyens, la probabilité des diffusions soit uniforme. On obtient alors  $P_\mu(\mu) = \int_0^\infty \exp(-x/|\mu|) dx = |\mu|$  pour  $-1 \leq \mu \leq +1$ . L'épaisseur de la couche étant très grande, toutes les particules sont rétrodiffusées, on a  $P_\mu(\mu) = 0$  si  $\mu > 0$  et par normalisation on obtient  $P_\mu(\mu) = -2\mu$  si  $\mu < 0$ . Le diagramme polaire de la fonction de diffusion doit alors être proche d'un cercle de rayon 1 et tangent à la surface diffusante.

La figure 5 montre que la condition optiquement mince est très bien réalisée et que celle correspondant au cas optiquement épais s'approche de très près de la fonction de phase d'un corps noir. La justesse du programme qui a effectué les simulations n'a, à ce stade, pas de raisons d'être mise en doute.

### 4.3.1 Simulation de la réflectance d'une couche semi-infinie

La réflectance  $R$  d'un milieu diffusant est égale à la probabilité pour qu'une particule soit rétrodiffusée par le milieu. Si le milieu est semi infini et le coefficient d'absorption des diffuseurs est nul, toutes les particules finissent par ressortir et la réflectance est égale à un. Pour traiter un problème plus général, nous supposerons que les diffuseurs ont une probabilité  $1 - a$  d'absorber la particule. La quantité  $a$  qui correspond à la probabilité pour que la particule ne soit pas absorbée représente l'*albedo* des diffuseurs. Les seules caractéristiques du rayonnement incident que nous pouvons prendre en compte dans ce modèle simplifié est son angle d'incidence, nous le prendrons égal à zéro.

Le programme **Z** peut être facilement adapté de façon à tenir compte de l'absorption. Contrairement à **Z** le programme **ZA** ci-dessous ne calcule pas la fonction de phase mais un tableau de réflectances en fonction de l'albedo.

**Algorithme ZA** *Diffusion isotrope avec albedo des particules.*

**ZA0.** *Choix des paramètres.*

Saisir( $\tau_{\max}$ ), l'épaisseur optique maximum.

$$1 - e^{-\tau_{\max}} \rightarrow b$$

Saisir(seed), initialisation des simulations.

Saisir( $N_{\text{part}}$ ), nombre de particules lancées.

**ZA1.** *Saisie du tableau des albedos des diffuseurs.*

Saisir(albedos), tableau des albedos.

$$\text{Size(albedos)} \rightarrow N_{\text{amax}}$$

$$0 \rightarrow N_a$$

**ZA2.** *Boucle sur les albedos.*

$$N_a + 1 \rightarrow N_a$$

$$\text{albedos}(N_a) \rightarrow a$$

**ZA3.** *Initialisation des compteurs de particules.*

$$0 \rightarrow N, \text{ particules lancées.}$$

$$0 \rightarrow N_{\text{abs}}, \text{ particules absorbées.}$$

$$0 \rightarrow N_{\text{retro}}, \text{ particules rétrodiffusées.}$$

$$0 \rightarrow N_{\text{diff}}, \text{ particules diffusées.}$$

**ZA4.** *Boucle sur les particules : mise en place de la 1<sup>e</sup> diffusion.*

$$1 \rightarrow n_{\text{diff}}, \text{ nombre de diffusions subies avant sortie de la couche}$$

$$1 \rightarrow \mu, (\text{par définition } \mu = \cos \theta).$$

$$\text{LoiUniforme(seed)} \rightarrow U$$

$$-\ln(1 - bU) \rightarrow \tau, \text{ épaisseur optique conditionnelle de pénétration.}$$

**ZA5.** *Boucle sur les diffusions : la particule est-elle absorbée ?*

$$\text{LoiUniforme(seed)} \rightarrow U$$

$$\text{Si } U > a, \text{ alors } N_{\text{abs}} + 1 \rightarrow N_{\text{abs}}, \text{ aller en } \mathbf{ZA4}.$$

$$\text{Sinon, } n_{\text{diff}} + 1 \rightarrow n_{\text{diff}}$$

**ZA6.** *Calcul de la diffusion suivante.*

$$\text{LoiUniforme(seed)} \rightarrow U_1, U_2$$

$$2U_1 - 1 \rightarrow \mu, \text{ choix du nouveau } \mu \text{ après diffusion.}$$

$$-\ln(U_2) \rightarrow s, \text{ choix du nouveau parcours.}$$

$$\tau + s\mu \rightarrow \tau, \text{ nouvelle épaisseur optique de pénétration.}$$

**ZA7.** *La particule est-elle toujours dans la couche diffusante ?*

$$\text{Si } \tau \geq 0 \text{ et } \tau \leq \tau_{\max}, \text{ aller en } \mathbf{ZA5}.$$

**ZA8.** *Sortie de la particule, mise à jour des compteurs.*

$$N + 1 \rightarrow N, \text{ il a été lancé une particule de plus.}$$

$$\text{Si } \tau \leq 0, \text{ alors } N_{\text{retro}} + 1 \rightarrow N_{\text{retro}}$$

$$\text{Sinon, } N_{\text{diff}} + 1 \rightarrow N_{\text{diff}}$$

$$\text{Si } N < N_{\text{part}}, \text{ aller en } \mathbf{ZA4}.$$

**ZA9.** *Calcul de la réflectance.*

Écrire  $N$  et  $N_{\text{abs}} + N_{\text{retro}} + N_{\text{diff}}$ , pour vérification.

$$b \times N_{\text{retro}}/N \rightarrow R(a)$$

Écrire  $a$  et  $R(a)$

**ZA10.** *La liste des albedos est-elle épuisée ?*

$$\text{Si } N_a \geq N_{\text{amax}}, \text{ alors aller en } \mathbf{ZA2}.$$

Sinon, fin du programme

## 4.4 Traitement semi-analytique du cas isotrope

Dans le cas de la diffusion isotrope au sein d'un milieu plan-parallèle semi-infini, il est possible d'obtenir quelques résultats analytiques. On donne ci-dessous une série exemples.

### 4.4.1 Loi des variations de l'épaisseur optique

Le cœur du processus de diffusion est la formule de mise à jour de l'épaisseur optique  $\tau + s\mu \rightarrow \tau$ , telle qu'elle apparaît en **Z3** à laquelle il faut adjoindre les conditions initiales sur  $\tau_0$  en **Z2** et les conditions aux contours en **Z4**. La formule de mise à jour exprime une « marche au hasard » à une dimension. Suivant ce concept, à partir d'une épaisseur optique initiale  $\tau_0$ , on calcule les épaisseurs optiques suivantes grâce à la formule de récurrence

$$\tau_{i+1} = \tau_i + s_i \mu_i . \quad (36)$$

Dans cette expression,  $s_i$  est la distance parcourue par la particule après la  $i$ -ème diffusion et  $\mu_i$  est le cosinus de l'angle sous lequel elle est diffusée. La condition initiale  $\tau_0$  et les conditions d'arrêt déterminent le type de marche au hasard auquel on a affaire. L'épaisseur optique  $\tau_N$  atteinte par la particule au bout de  $N$  diffusions, peut s'écrire sous la forme

$$\tau_N = \tau_0 + \sum_{i=1}^N s_i \mu_i = \tau_0 + \sum_{i=1}^N \Delta \tau_i ,$$

où on a introduit la variable  $\Delta \tau_i = s_i \mu_i$ . Les variables  $\Delta \tau_i$  sont indépendantes et égales au produit de deux variables également indépendantes dont l'une  $s_i$ , suit la loi exponentielle et l'autre  $\mu_i$ , suit la loi uniforme entre  $-1$  et  $+1$ .

**Moments.** La variable  $\Delta \tau_i$  est le produit de deux variables aléatoires indépendantes  $s_i$  et  $\mu_i$ . Les moments de  $\Delta \tau_i$  s'obtiennent alors comme le produit des moments de ces deux variables. Pour la moyenne  $\mu$ , on a  $\mu = E\{s_i \mu_i\} = E\{s_i\} E\{\mu_i\} = 0$ , car  $E\{\mu_i\} = 0$ . Les moments centrés coïncident alors avec les moments non-centrés. Les moments impairs sont nuls car  $E\{\mu_i^{2p+1}\} = 0$ , et pour le moments pairs on a

$$\begin{aligned} \mu_{2p} &= E\{\Delta \tau_i^{2p}\} = E\{s_i^{2p}\} E\{\mu_i^{2p}\}, \\ &= \int_0^\infty s^{2p} e^{-s} ds \int_{-1}^1 \frac{1}{2} \mu^{2p} d\mu, \\ &= \Gamma(2p+1) \frac{1}{2} \frac{\mu^{2p+1}}{2p+1} \Big|_{-1}^1, \\ &= (2p)! \frac{1}{2} \frac{2}{2p+1} = \frac{(2p)!}{2p+1}. \end{aligned}$$

En particulier  $\sigma^2 \stackrel{\text{déf}}{=} \mu_2 = \frac{2}{3}$ .

**Moyenne conditionnelle.** On cherche à déterminer la moyenne conditionnelle de la variable  $T = \Delta \tau_i$  représentant les variations d'épaisseur optique lorsque celles-ci sont positives ou négatives. Le signe de  $T$  ne dépend que de celui de  $\mu_i$ . Les variables conditionnelles de  $\mu_i$  sachant que cette quantité est soit positive, soit négative, sont des variables uniformes respectivement entre 0 et 1, et entre  $-1$  et 0. Il vient

$$E\{T|T \geq 0\} = E\{s_i\} E\{\mu_i|\mu_i \geq 0\} = E\{\mu_i|\mu_i \geq 0\} = \frac{1}{2} . \quad (37)$$

On montrerait de même que

$$E\{T|T \leq 0\} = -\frac{1}{2} . \quad (38)$$

**Densité de probabilité.** Soient  $f_S$  et  $f_\mu$  les densités de ces deux variables. On a

$$f_S(s) = \exp(-s) \mathbf{1}_{s \geq 0}, \quad f_\mu(\mu) = \frac{1}{2} \mathbf{1}_{-1 \leq \mu \leq 1} .$$

La densité de probabilité  $f_z$  du produit  $Z = XY$  de deux variables indépendantes de densités  $f_X$  et  $f_Y$  s'obtient par la formule

$$f_Z(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) f_Y(z/x) \frac{dx}{|x|} .$$

Appliquée à  $s_i$  et  $\tau_i$ , cette formule conduit à la densité  $f_T$  commune à toutes les variables  $t = \Delta \tau_i$

$$f_T(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \mathbf{1}_{-1 \leq x \leq 1} \exp(-t/x) \mathbf{1}_{t/x \geq 0} \frac{dx}{|x|} ,$$

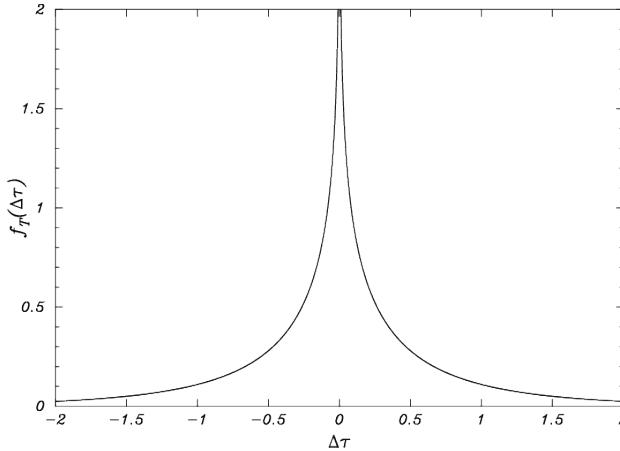


FIGURE 6 – Densité de probabilité de l'épaisseur optique de la diffusion isotrope dans le modèle plan parallèle.

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \exp(-t/x) \mathbf{1}_{t/x \geq 0} \frac{dx}{|x|}, \\
&= \frac{1}{2} \int_0^1 \exp(-|t|/x) \frac{dx}{x}, \\
&= \frac{1}{2} \int_1^\infty \exp(-|t|u) \frac{du}{u}.
\end{aligned}$$

La dernière expression est celle d'une intégrale exponentielle  $E_1$ , dont la définition<sup>4</sup> est incluse dans celles des intégrales exponentielles d'ordre  $n$

$$E_n(x) = \int_1^\infty e^{-xu} u^{-n} du, \quad x > 0. \quad (39)$$

L'accroissement de l'épaisseur optique  $\Delta\tau_i$  est donc une variable aléatoire définie sur  $]-\infty, \infty[$  dont la densité de probabilité est donnée par l'expression

$$f_T(t) = \frac{1}{2} E_1(|t|). \quad (40)$$

La figure 6 représente le graphe de cette densité. On notera l'approximation suivante, qui peut se révéler utile

$$\frac{1}{2} e^{-t} \ln\left(1 + \frac{2}{t}\right) < E_1(t) < e^{-t} \ln\left(1 + \frac{1}{t}\right).$$

**Fonction de répartition.** Par définition, la fonction de répartition  $F$  de la variable  $t$  est  $F(t) = \int_{-\infty}^t f(u) du$ . À partir de la propriété

$$\frac{d}{dt} E_n(t) = -E_{n-1}(t), \quad (41)$$

et des conditions  $F(-\infty) = 0$ ,  $F(\infty) = 1$  et  $F(0) = 0.5$  on détermine la fonction de répartition

$$F(t) = \begin{cases} \frac{1}{2} E_2(-t), & \text{si } t \leq 0; \\ 1 - \frac{1}{2} E_2(t), & \text{si } t \geq 0. \end{cases} \quad (42)$$

Le graphe de cette densité est illustré par la figure 7. On a

$$E_2(|t|) = e^{-|t|} - |t| E_1(|t|).$$

#### 4.4.2 Fonction caractéristique et loi des sommes

Il faut maintenant évaluer la densité de probabilité de la somme des  $N$  variables  $\sum_{i=1}^N \Delta\tau_i$ . Ces variables sont indépendantes et identiquement distribuées, la densité de leur somme est alors le produit de  $N$  convolutions successives de leurs densités individuelles. Dans le domaine de Fourier, cette opération revient à multiplier  $N$  fois le transformée de Fourier  $\hat{f}_T$  de la densité  $f_T$ . Nous prendrons comme définition de la transformée de Fourier, celle qui est connue en théorie des probabilités sous le nom de *fonction caractéristique*, et dont la définition est  $\hat{f}_T(\omega) = \mathbb{E}\{e^{i\omega T}\}$ . Il vient

$$\hat{f}_T(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt \int_1^\infty \frac{1}{2} e^{-|t|u} \frac{du}{u},$$

4. La fonction  $E_1$  diffère de l'intégrale exponentielle « officielle » qui est  $E_1(x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{-1} dt$ . On a  $E_1(x) = -E_1(-x)$ .

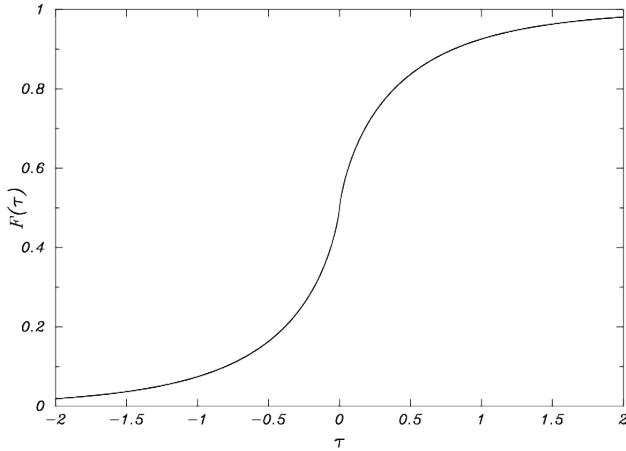


FIGURE 7 – Fonction de répartition  $F$  de l'épaisseur optique de la diffusion isotrope dans le modèle plan parallèle. L'expression analytique de cette fonction est donnée par la formule (42).

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{du}{u} \int_{-\infty}^\infty e^{|t|u+i\omega t} dt, \\
 &= \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{du}{u} \left( \int_{-\infty}^0 e^{t(u+i\omega)} dt + \int_0^\infty e^{t(-u+i\omega)} dt \right), \\
 &= \int_1^\infty \frac{du}{u^2 + \omega^2}.
 \end{aligned}$$

On procède ensuite au changement de variable  $z = \omega/u$ . Il vient

$$\hat{f}_T(\omega) = \frac{\arctan \omega}{\omega}. \quad (43)$$

Nous sommes à présent en mesure de calculer la densité  $f_{T_N}$  de la somme  $T_N = \sum_{i=1}^N \Delta\tau_i$  par l'intermédiaire de la transformée de Fourier inverse. On a

$$f_{T_N}(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{(\arctan \omega)^N}{\omega^N} e^{-i\omega\tau} d\omega. \quad (44)$$

Le résultat de cette intégrale ne s'exprime pas au moyen d'une formule analytique simple. Par conséquent, la plupart des résultats concernant la diffusion isotrope devront être obtenus à l'aide d'une transformée de Fourier numérique au rang desquelles la FFT est la plus efficace (le chapitre 4.4.5 présente un exemple de son utilisation). Cependant son usage est assez délicat et on pourra se reporter à l'appendice A.3 qui contient quelques indications concernant cette technique.

#### 4.4.3 Orientation des particules sortantes

Lorsqu'une particule sort de la couche diffusante, elle le fait avec une distribution des angles de diffusion qui dépend de l'épaisseur optique d'où elle est parvenue à s'échapper. Il est possible de caractériser analytiquement cette distribution.

Soit  $\theta$  l'angle de diffusion sous lequel la particule s'échappe, on a  $\pi \leq \theta \leq \pi/2$  puisque la particule est nécessairement rétrodiffusée. On note  $\mu = \cos \theta$  et  $\tau$  l'épaisseur optique atteinte par la particule juste avant qu'elle quitte le milieu diffusant. Soient  $M$  la variable aléatoire égale au cosinus de l'angle de diffusion des particules sortantes, et  $S$  la distance parcourue après la dernière diffusion. La condition d'échappement est  $\Delta\tau = SM < -\tau$ . La fonction de répartition  $F_{\text{esc}}$  de la variable  $M$ , sachant que la particule s'échappe, est donnée par l'expression

$$F_{\text{esc}}(\mu; \tau) \stackrel{\text{déf}}{=} \Pr\{M \leq \mu | S < -\tau/M\} = \frac{\Pr\{M \leq \mu, S < -\tau/M\}}{\Pr\{S < -\tau/M\}}.$$

La densité du couple  $(M, S)$  est  $\frac{1}{2} \mathbf{1}_{-1 \leq m \leq 1} e^{-s} \mathbf{1}_{s \geq 0}$ . Le numérateur est alors égal à

$$\begin{aligned}
 \Pr\{M \leq \mu, S < -\tau/M\} &= \int_{-1}^\mu \mathbf{1}_{-1 \leq m \leq 1} dm \int_{-\tau/m}^\infty e^{-s} \mathbf{1}_{s \geq 0} ds, \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-1}^\mu e^{\tau/m} \mathbf{1}_{-1 \leq m \leq 1} \mathbf{1}_{-\tau/m \geq 0} dm,
 \end{aligned}$$

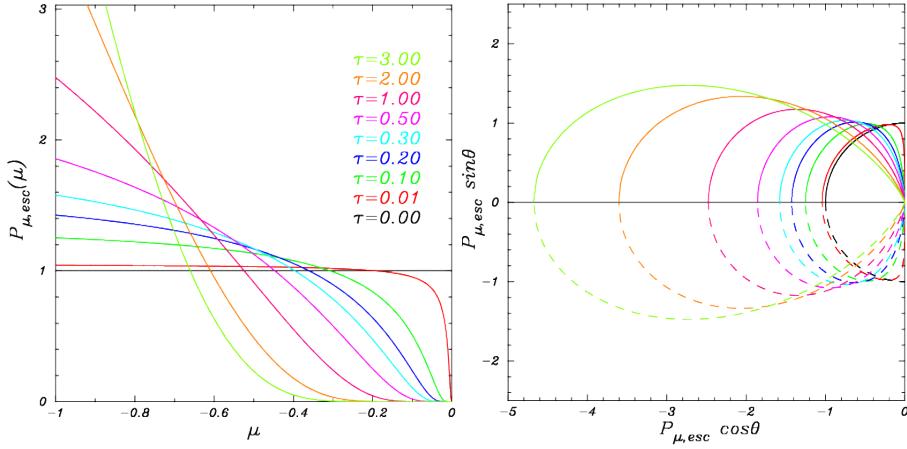


FIGURE 8 – À gauche, densité de probabilité de la variable  $\mu = \cos \theta$ , où  $\theta$  est l’angle d’émergence des particules rétrodiffusées depuis l’épaisseur optique  $\tau$ . Pour  $\tau = 0$  la densité de  $\mu$  est uniforme entre  $-1$  et  $0$ . Lorsque  $\tau$  augmente, seules les particules diffusées selon un angle de plus en plus proche de  $\pi$  sont capables de s’extraire du milieu. À droite, diagramme polaire de la fonction de phase de l’angle de diffusion  $\theta$ .

mais  $\tau \geq 0$ , d’où

$$= \frac{1}{2} \int_{-1}^{\mu} e^{\tau/m} \mathbf{1}_{-1 \leq m \leq 0} dm.$$

Le dénominateur est égal à la probabilité pour que la particule s’échappe, il joue le rôle de constante de normalisation. On a  $\Pr\{S < -\tau/M\} = \Pr\{SM < -\tau\}$ , qui est  $\Pr\{\Delta\tau < -\tau\} = F(-\tau) = \frac{1}{2}E_2(\tau)$  (voir équation (42)). Il vient

$$F_{\text{esc}}(\mu; \tau) = \frac{1}{E_2(\tau)} \int_{-1}^{\mu} e^{\tau/m} \mathbf{1}_{-1 \leq m \leq 0} dm.$$

La densité de probabilité  $P_{\mu, \text{esc}}$  de  $\mu$  est la dérivée de la fonction de répartition par rapport à  $\mu$ . Dans l’expression de  $F_{\text{esc}}$  la variable  $\mu$  n’intervient qu’en tant que borne supérieure d’une intégrale. On trouve alors pour  $\tau \geq 0$

$$P_{\mu, \text{esc}}(\mu; \tau) = \frac{e^{\tau/\mu}}{E_2(\tau)} \mathbf{1}_{-1 \leq \mu \leq 0}. \quad (45)$$

La fonction de phase  $P_{\theta, \text{esc}}$  de l’angle de diffusion  $\theta$  est donnée par la relation (10), soit  $P_{\theta, \text{esc}}(\theta) = P_{\mu, \text{esc}}(\cos \theta)$ . Les deux fonctions  $P_{\mu, \text{esc}}$  et  $P_{\theta, \text{esc}}$  sont représentées sur la figure 8.

#### 4.4.4 Particules sortant aussitôt après la première diffusion

Il est possible d’évaluer la fraction  $\pi_1$  de particules qui s’échappent dès la première diffusion. Lorsque la première diffusion a lieu à l’épaisseur optique  $\tau$ , ce qui arrive avec la densité  $e^{-\tau}$ , les particules ayant atteint ce niveau peuvent sortir du milieu avec la probabilité  $\frac{1}{2}E_2(\tau)$ . En sommant sur tous les  $\tau$  possibles, il vient

$$\begin{aligned} \pi_1 &= \int_0^\infty e^{-\tau} \frac{1}{2} E_2(\tau) d\tau = \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-\tau} d\tau \int_1^\infty \frac{e^{-\tau u}}{u^2} du, \\ &= \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{du}{u^2} \int_0^\infty e^{-\tau(1+u)} d\tau = \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{du}{u^2} \left. \frac{e^{-\tau(1+u)}}{-(1+u)} \right|_0^\infty, \\ &= \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{du}{u^2} \frac{1}{1+u}, \end{aligned}$$

on pose  $x = 1/u$ ,  $dx = -du/u^2$ , il vient

$$= -\frac{1}{2} \int_1^0 dx \frac{1}{1+1/x} = \frac{1}{2} \int_0^1 dx \frac{x}{1+x} = \frac{1}{2} (x - \ln(1+x)) \Big|_0^1.$$

D’où le résultat

$$\pi_1 = \frac{1}{2}(1 - \ln 2) \approx 0.1534... \quad (46)$$

Ainsi, plus de 15% des particules s’échappent du milieu dès la première diffusion. On s’intéresse à présent à l’angle suivant lequel ces particules émergent de la couche diffusante. La densité de particules parvenant à s’échapper depuis l’épaisseur  $\tau$  est  $e^{-\tau} \frac{1}{2} E_2(\tau) / \frac{1}{2}(1 - \ln 2)$ . Cette densité est, comme il se doit, normalisée à un. L’orientation des particules

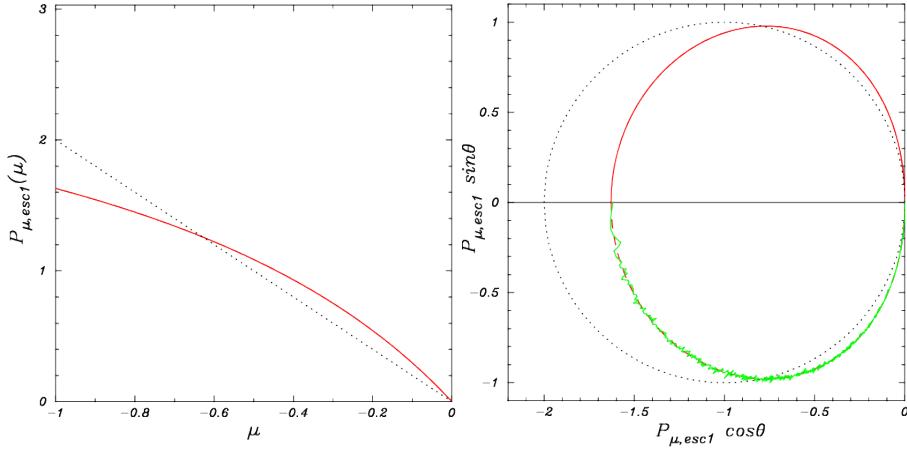


FIGURE 9 – Densité de  $\mu = \cos \theta$  et diagramme polaire de la fonction de phase de l’angle de diffusion  $\theta$  des particules sortant dès la première diffusion. À titre de comparaison on a reporté, en pointillés, la fonction de phase, égale à  $-2\mu$ , correspondant à des particules « thermalisées ». En vert, le résultat d’une simulation de Monte-Carlo réalisée avec  $3 \cdot 10^7$  particules.

selon  $\mu$  connaissant  $\tau$  est donnée par la densité  $e^{\tau/\mu}/E_2(\tau)$  donnée ci-dessus en (45). En intégrant sur tous les  $\tau$ , on obtient la densité  $P_{\mu,\text{esc}1}$  du  $\cos \theta$  des particules qui s’échappent immédiatement après la première diffusion. Il vient

$$P_{\mu,\text{esc}1}(\mu) = \int_0^\infty e^{-\tau} \frac{\frac{1}{2}E_2(\tau)}{\frac{1}{2}(1-\ln 2)} \frac{e^{\tau/\mu}}{E_2(\tau)} d\tau = \frac{1}{1-\ln 2} \int_0^\infty e^{-\tau(1-1/\mu)} d\tau.$$

D’où le résultat final

$$P_{\mu,\text{esc}1}(\mu) = \frac{1}{1-\ln 2} \frac{\mu}{\mu-1}. \quad (47)$$

La fonction de phase suivant la variable  $\mu$ , et suivant l’angle de diffusion  $\theta$ , est représentée sur la figure 9. On a tracé sur cette figure le cas « thermalisé » où la fonction de phase est proportionnelle à la surface émettrice projetée normalement à la ligne de visée. Par rapport à cette référence, on constate un déficit de particules rétrodiffusées suivant l’angle  $\theta = \pi$  et un excès au voisinage de  $\theta = \pi/2$ . Cette situation traduit le fait que les particules sortant après seulement une diffusion le font plus près de la surface que lorsqu’elles sortent après plusieurs diffusions.

#### 4.4.5 Quelques résultats obtenus par FFT

On cherche ici à calculer la proportion de particules s’échappant du milieu diffusif après au plus  $k$  diffusions. Soit  $\pi_k$  cette proportion, on a trouvé analytiquement ci-dessus  $\pi_1 \approx 15.34\%$ , cette valeur servira de test dans le calcul de  $\pi_k$  effectué par FFT. On se restreint toujours au cas plan parallèle et on envisage un milieu semi infini limité par le plan  $\tau = 0$ .

La fonction source correspond à une pénétration exponentielle de particules dans la couche diffusante, sa densité de probabilité est  $f(\tau) = e^{-\tau} \mathbf{1}_{\tau \geq 0}$ . On en tire l’expression de sa transformée de Fourier<sup>5</sup> (qui est également celle de sa fonction caractéristique)

$$\begin{aligned} \text{TF}(f)(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tau} \mathbf{1}_{\tau \geq 0} e^{i\omega\tau} d\tau = \int_0^{\infty} e^{-\tau(1-i\omega)} d\tau, \\ &= \frac{1}{1-i\omega} = \frac{1+i\omega}{1+\omega^2}. \end{aligned}$$

Si le milieu était infini on obtiendrait la densité de probabilité  $f_{T_k}$  de la variable indiquant l’épaisseur optique de la  $k^{\text{e}}$  diffusion, à l’aide du schéma itératif suivant

$$f_{T_1} = e^{-\tau} \mathbf{1}_{\tau \geq 0}, \quad f_{T_k} = \text{TF}^{-1} \left( \frac{\arctan \omega}{\omega} \text{TF}(f_{T_{k-1}})(\omega) \right).$$

Mais le milieu est semi infini, il ne comporte des diffuseurs que pour  $\tau \geq 0$ , il y a donc lieu de tronquer la fonction après avoir fait la transformée de Fourier inverse, suivant le schéma

$$f_{T_1} = e^{-\tau} \mathbf{1}_{\tau \geq 0}, \quad f_{T_k} = \text{TF}^{-1} \left( \frac{\arctan \omega}{\omega} \text{TF}(f_{T_{k-1}})(\omega) \right) \mathbf{1}_{\tau \geq 0}.$$

5. La transformée de Fourier inverse de cette fonction diverge, mais c’est sans importance car l’intégrale de la TF inverse est à prendre en valeur principale.

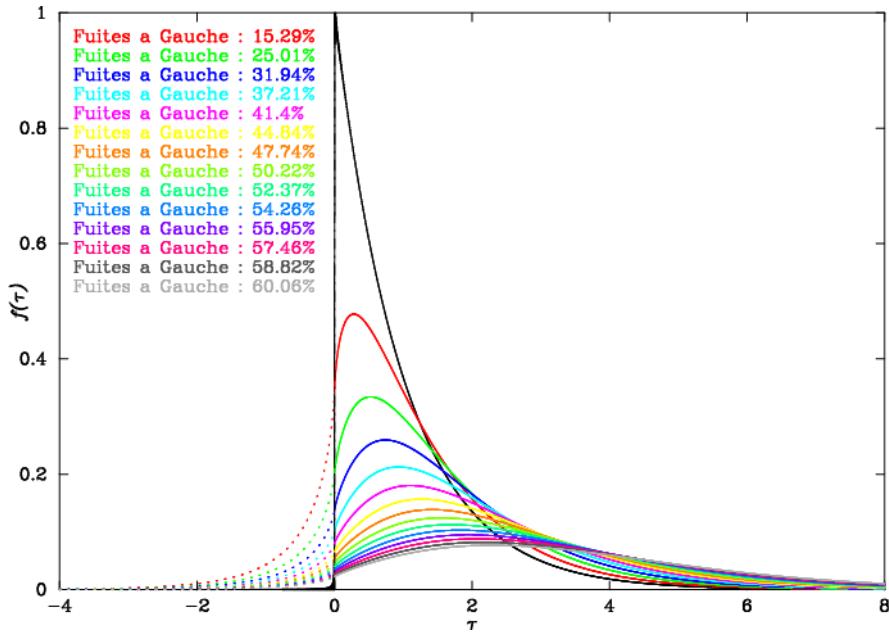


FIGURE 10 – Simulation numérique par FFT des densités de probabilité du lieu des diffusions successives dans un milieu semi infini. La courbe en noir représente la condition initiale, c'est-à-dire la pénétration exponentielle des particules. Le calcul permet d'estimer le pourcentage de particules s'étant échappées après  $k$  diffusions au plus. Le modèle est plan parallèle et la diffusion est isotrope, il n'y a pas d'absorption.

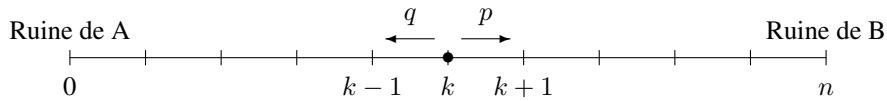
À partir du calcul de la deuxième densité :  $f_{T_2}$ , la troncature permet de calculer le nombre de particules qui s'échappent du milieu. La figure 10 illustre les résultats d'un programme ayant implémenté le schéma itératif ci-dessus. On trouve numériquement  $\pi_1 = 15.29\%$  ce qui est légèrement inférieur à la valeur théorique. Après 14 diffusions, environ 60% des particules se sont échappées, après 10 000 diffusions, à la précision des calculs près, elles se sont toutes échappées.

## 4.5 Approximation par des marches au hasard

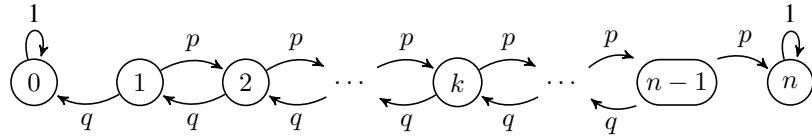
Le processus physique de diffusion, même dans le cas élémentaire de la diffusion isotrope, possède une complexité intrinsèque qui, à quelques exceptions près, déjoue les tentatives visant à obtenir des résultats suivant l'approche analytique. Il est cependant possible d'approximer le phénomène, tout en lui conservant nombre de ces caractéristiques, au moyen d'une marche au hasard. On rappelle brièvement dans le chapitre suivant le problème de la « ruine du joueur » qui est un exemple simple de marche au hasard et auquel le processus de diffusion est apparenté. Nous allons ensuite illustrer la méthode en comparant la réflectance d'un milieu plan-parallèle semi-infini obtenue par simulations de Monte-Carlo, avec celle calculée à l'aide de différentes marches au hasard. Le modèle inclura la possibilité de destruction de la particule.

### 4.5.1 Ruine du joueur et diffusion

Deux joueurs : A et B, participent à un jeu où, à chaque tour, le perdant rend un point à l'autre. Au départ le joueur A possède un capital de  $k$  points et le joueur B de  $n - k$  points. La somme totale est de  $n$  points au départ et reste égale à  $n$  car il n'y a pas de création de points dans le jeu ; les joueurs ne font que se les échanger d'un tour à l'autre. Le joueur A gagne un point avec la probabilité  $p$ , et le perd avec la probabilité  $q = 1 - p$ . Le jeu s'arrête lorsque l'un des deux joueurs est ruiné. On peut interpréter le jeu comme le déplacement aléatoire d'un mobile sur les coordonnées entières d'un axe ainsi que le montre la figure ci-dessous.



Cette marche s'inscrit dans le cadre plus général des chaînes de Markov, où le capital du joueur A représente les états de la chaîne. Celle-ci présente deux états absorbants : 0 et  $n$  à partir desquels l'état du jeu ne peut plus changer. Pour les autres états  $k$ , le jeu peut évoluer vers l'état  $k + 1$  avec la probabilité  $p$  ou vers l'état  $k - 1$  avec la probabilité  $q = 1 - p$ . Le schéma suivant représente cette chaîne de Markov particulière.



**Probabilité de la ruine.** On demande la probabilité  $a_k$  pour que le joueur A soit ruiné alors que son capital de départ est  $k$ . Le raisonnement qui suit est caractéristique de ce genre de problèmes, on le rencontrera à plusieurs reprises.

Si  $k = 0$ , A est ruiné dès le départ et le reste. On a

$$a_0 = 1. \quad (48)$$

Si  $k = n$ , le jeu reste bloqué à l'état  $n$ , le joueur A ne peut pas perdre. On a

$$a_n = 0. \quad (49)$$

Dans les autres cas, d'après la formule des probabilités totales, et en conditionnant sur le premier tour, on obtient

$$a_k = qa_{k-1} + pa_{k+1}. \quad (50)$$

Les équations (50) sont en nombre  $n - 2$  ce qui, avec les deux conditions limites (48) et (49), forme un système linéaire de  $n$  équations à  $n$  inconnues (les  $a_k$ ,  $k = 0, \dots, n$ ). Ce système peut être résolu en employant les méthodes classiques de l'algèbre linéaire, mais il existe un moyen plus direct qui consiste à deviner la solution et à vérifier qu'elle est correcte. Dans ce cas on suppose que  $a_k = \rho^k$ . Remplaçons  $a_k$  par cette valeur dans l'équation (50). Il vient :  $\rho^k = q\rho^{k-1} + p\rho^{k+1}$ , soit encore

$$-p\rho^2 + \rho - q = 0. \quad (51)$$

Ce trinôme possède les solutions

$$\rho_{1,2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4pq}}{-2p} = \frac{1 \pm (1 - 2p)}{2p}.$$

Elles sont distinctes si  $p \neq \frac{1}{2}$ . On a

$$\rho_1 = \frac{2p}{2p} = 1, \quad \rho_2 = \frac{2(1-p)}{2p} = \frac{q}{p}.$$

Comme le système est linéaire, sa solution est une combinaison linéaire de  $\rho_1$  et  $\rho_2$ , soit

$$a_k = c_1 + c_2 \left(\frac{q}{p}\right)^k. \quad (52)$$

On trouve la valeur des deux constantes  $c_1$  et  $c_2$  grâce aux conditions limites (48) et (49). Il vient pour la première  $c_1 1^0 + c_2 (q/p)^0 = c_1 + c_2 = 1$ , et pour la seconde  $c_1 1^n + c_2 (q/p)^n = c_1 + c_2 (q/p)^n = 0$ . On en tire  $c_2 = [1 - (p/q)^n]^{-1}$  et  $c_1 = -(q/p)^k [1 - (p/q)^n]^{-1}$ , ce qui conduit à la solution cherchée pour  $p \neq \frac{1}{2}$

$$a_k = \frac{\left(\frac{q}{p}\right)^k - \left(\frac{q}{p}\right)^n}{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^n} = 1 - \frac{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^k}{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^n}, \quad \text{si } p \neq \frac{1}{2}. \quad (53)$$

Si  $p = q = \frac{1}{2}$ , le trinôme caractéristique (51) ne possède que la seule racine double  $\rho_1 = \rho_2 = 1$ , mais  $1^n \neq 0$  et cette racine n'est pas solution de l'équation (49). La méthode est en défaut et il faut procéder autrement. On peut constater que  $a_k = k$  est une autre solution de l'équation (50), ou obtenir la solution en faisant tendre  $p$  vers  $\frac{1}{2}$  dans l'équation (53). Si on pose  $q/p = (\frac{1}{2} - \epsilon)/(\frac{1}{2} + \epsilon) = 1 - \epsilon + O(\epsilon^2)$  dans (53), il vient

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} 1 - \frac{1 - (1 - \epsilon)^k}{1 - (1 - \epsilon)^n} = 1 - \frac{k\epsilon}{n\epsilon}.$$

D'où la solution

$$a_k = 1 - \frac{k}{n}, \quad \text{si } p = \frac{1}{2}. \quad (54)$$

Cette solution satisfait les conditions aux limites. Il reste à montrer que cette solution est unique, c'est-à-dire qu'une solution de (50) s'écrit toujours sous la forme (52). L'idée repose sur le fait que l'équation (50) est une équation de récurrence d'ordre 2. Si l'on connaît une solution de l'équation (50), il est toujours possible de la faire coïncider pour  $k = 0$  et  $k = 1$  avec une équation du type (52) en ajustant les constantes  $c_1$  et  $c_2$ . Ensuite on pose  $k = 1$  dans l'équation (50), ce qui détermine la solution pour  $k = 2$ , les deux solutions coïncident car elles sont toutes deux solutions

de cette équation. On procède de même pour  $k = 2, \dots, n$ , les deux solutions sont donc identiques. Le raisonnement est le même pour  $p = \frac{1}{2}$ .

Si on s'intéresse maintenant à la probabilité  $b_k$  pour que le joueur B soit ruiné alors que le joueur A possède au départ un capital de  $k$  points, la démarche est identique sauf pour les conditions aux limites qui deviennent  $b_0 = 0$  et  $b_n = 1$ . On trouve alors  $c_1 + c_2 = 0$  et  $c_1 + c_2(q/p)^n = 1$ , on en tire  $c_1 = [1 - (q/p)^n]^{-1}$  et  $c_2 = -(q/p)^k[1 - (q/p)^n]^{-1}$ . D'où la solution

$$b_k = \frac{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^k}{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^n}, \quad \text{si } p \neq \frac{1}{2}. \quad (55)$$

On trouverait de même

$$b_k = \frac{k}{n}, \quad \text{si } p = \frac{1}{2}. \quad (56)$$

On constate alors que pour toutes les valeurs de  $p$  on a toujours  $a_k + b_k = 1$ . Ceci signifie que, quel que soit le capital initial de A, le jeu se termine toujours soit sur la ruine de A, soit sur la ruine de B. Il n'existe pas de situation où le jeu oscille indéfiniment entre les états 0 et  $n$  sans jamais les atteindre. Dans la terminologie des chaînes de Markov, on dit que les états autres que 0 et  $n$  sont *transitoires* (on dit aussi *transients*). Cette situation est favorable aux méthodes de Monte-Carlo puisque cela signifie qu'une particule, suivant ce modèle, finit toujours par sortir de la couche diffusante.

Considérons à présent le problème d'un jeu contre un individu, disons B, infiniment riche. Il s'agit alors du cas où  $n \rightarrow \infty$ . Si,  $p < \frac{1}{2}$ , alors  $q/p > 1$  et il en résulte que  $a_k = 0$  et  $b_k = 1$ . Dans le cas  $p = \frac{1}{2}$  la limite pour  $n \rightarrow \infty$  donne également  $a_k = 0$  et  $b_k = 1$ . En résumé, si  $p \leq \frac{1}{2}$  la ruine du joueur A est certaine. Cette éventualité se présente dès que le jeu lui est défavorable ou même équitable. Pour la diffusion, cela veut dire que la particule s'échappe toujours d'une couche semi-infinie dès lors que la diffusion est isopropre ou que la rétrodiffusion domine. En revanche, si  $p > \frac{1}{2}$  on obtient  $a_k = (q/p)^k$  et  $b_k = 1 - (q/p)^k$ . La dernière égalité ne doit pas s'interpréter comme la probabilité de ruine de B, car elle est impossible, mais comme la probabilité pour que le jeu ne s'arrête jamais. Cette éventualité représente un obstacle pour les simulations de Monte-Carlo.

**Durée moyenne du jeu.** On cherche à calculer la durée moyenne du jeu ou, ce qui est la même chose, le nombre moyen de tours menant à la ruine de l'un des deux joueurs. Soit  $t_k$  le temps moyen nécessaire pour aboutir à une ruine alors que le joueur A possède un capital de  $k$  points. Les deux conditions aux limites correspondant respectivement à la ruine de A et celle de B sont

$$t_0 = 0, \quad t_n = 0. \quad (57)$$

En dehors de ces cas, on fait appel à la formule de l'espérance totale en conditionnant sur le premier tour et en remarquant qu'en procédant ainsi, un tour a déjà été joué. Il vient

$$\begin{aligned} t_k &= q(t_{k-1} + 1) + p(t_{k+1} + 1), \\ &= qt_{k-1} + q + pt_{k+1} + p, \\ &= qt_{k-1} + pt_{k+1} + 1. \end{aligned}$$

Soit finalement

$$-pt_{k+1} + t_k - qt_{k-1} = 1. \quad (58)$$

Il s'agit d'une équation linéaire mais, contrairement au cas précédent, elle est non-homogène. La théorie des systèmes linéaires dit que la solution générale de cette équation est égale à une solution particulière de l'équation avec second membre, à laquelle s'ajoute la solution générale de l'équation sans second membre (qui dans ce cas appartient à un espace vectoriel de dimension 2). La solution générale du système homogène a été discutée au paragraphe précédent, il reste à trouver la solution particulière avec second membre. On découvre sans trop de difficultés que

$$t_k = \frac{k}{q-p},$$

est bien solution de (58). De sorte que, pour  $p \neq \frac{1}{2}$ , la solution générale du système non-homogène s'écrit sous la forme

$$t_k = \frac{k}{q-p} + c_1 + c_2 \left(\frac{q}{p}\right)^k.$$

En écrivant que cette équation doit satisfaire les conditions aux limites, on trouve

$$t_k = \frac{k}{q-p} - \frac{n}{q-p} \frac{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^k}{1 - \left(\frac{q}{p}\right)^n}, \quad \text{si } p \neq \frac{1}{2}. \quad (59)$$

Il faut de nouveau traiter à part le cas  $p = \frac{1}{2}$ . L'équation à résoudre devient alors  $-\frac{1}{2}t_{k+1} + t_k - \frac{1}{2}t_{k-1} = 1$ . L'équation homogène admet, comme dans le cas précédent, toutes les combinaisons linéaires des solutions 1 et  $k$ . L'équation avec second membre admet la solution particulière  $-k^2$ . Si bien que la solution générale s'écrit

$$t_k = -k^2 + c_1 + c_2 k.$$

Pour satisfaire les conditions aux limites ont doit avoir  $c_1 = 0$  et  $c_2 = n$ . La solution est alors

$$t_k = k(n - k), \quad \text{si } p = \frac{1}{2}. \quad (60)$$

La durée moyenne d'un jeu équitable est égale au produit du capital de A par celui de B. Contre un adversaire infiniment riche, et si  $p < \frac{1}{2}$ , la durée moyenne de jeu est

$$t_k = \frac{k}{q - p}.$$

Elle est infinie si  $p \geq \frac{1}{2}$ . Ceci implique que la diffusion isotrope d'une particule dans un milieu semi-infini prend en moyenne, toujours suivant ce modèle, un temps infini.

**Loi suivie par la durée du jeu.** On s'intéresse au cas où le joueur A possède un capital  $k \neq 0$ , le joueur B un capital infini et le jeu est équitable  $p = q = \frac{1}{2}$ .

Soit  $u_{k,n}$  la probabilité pour que A soit ruiné en  $n$  tours alors que son capital de départ était de  $k$  points. Le joueur A ne pouvant pas être ruiné en moins de  $k$  tours, on a donc  $n \geq k$ . On montre ensuite que  $k$  et  $n$  doivent avoir la même parité car chaque gain de A doit être effacé par une perte, de façon à ce qu'il soit ruiné au bout des  $n$  tours. Le nombre de tours en excès de  $k$  est  $n - k$ , cette quantité doit être paire, ce qui implique que  $k$  et  $n$  doivent avoir la même parité, ainsi le nombre  $(n - k)/2$  des formules ci-dessous sera toujours un entier. L'étape suivante consiste à évaluer le nombre de chemins qui partent de  $k$  et aboutissent à 0 pour la première fois. Soit  $T(n, k)$  ce nombre, le calcul est effectué à l'appendice A.4.3, page 67. On trouve

$$T(n, k) = \frac{2k}{n+k} \binom{n-1}{(n-k)/2}.$$

Chaque chemin possède la probabilité  $(1/2)^n$  d'avoir été parcouru, de sorte que

$$u_{k,n} = \begin{cases} \frac{1}{2^n} \frac{2k}{n+k} \binom{n-1}{(n-k)/2}, & \text{si } n \geq k, n - k \text{ pair;} \\ 0, & \text{si } n \geq k, n - k \text{ impair.} \end{cases} \quad (61)$$

Formule que l'on peut également écrire sous la forme

$$u_{k,k} = \frac{1}{2^k}, \quad u_{k,k+1} = 0, \quad u_{k,n} = \frac{(n-1)(n-2)}{(n+k)(n-k)} u_{k,n-2}, \quad (62)$$

qui montre que le maximum des  $u_{k,n}$  a lieu pour  $n = \lfloor \frac{1}{3}(k^2 + 2) \rfloor$  (et aussi pour  $n - 2$  si  $k$  n'est pas divisible par 3). La formule de Stirling permet d'approximer  $\binom{n-1}{(n-k)/2}$  par  $2^n / \sqrt{2\pi n}$  dès que  $n$  est grand devant  $k$ , d'où on tire

$$u_{k,n} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{n^{\frac{3}{2}}} (1 + O(n^{-1})), \quad \text{pour } n \gg k. \quad (63)$$

La figure 11 page suivante présente sur sa partie gauche, la loi suivie par  $u_{k,n}$  pour un capital de départ de  $k = 10$ . En accord avec les résultats précédents, la durée moyenne du jeu est infinie car la série  $\sum_{n=k}^{\infty} n u_{k,n}$  diverge. Afin de s'assurer que la partie possède une durée finie, il est possible de limiter à  $N$  le nombre maximum de tours qu'elle peut comprendre. Soit  $p_{k,N}$  la probabilité que la partie se termine en au plus  $N$  tours alors que la joueur A avait un capital de départ égal à  $k$ . On a :

$$p_{k,N} = \sum_{n=k}^N u_{k,n} = 1 - \sum_{n>N} u_{k,n}, \quad (64)$$

où la somme s'effectue de deux en deux termes. En approximant la série à l'aide d'une intégrale et en utilisant l'approximation (63), on en déduit la probabilité  $p_{k,N}$  de la ruine du joueur alors que son capital de départ était  $k$  et que la partie comprend au plus  $N$  tours. On obtient

$$\begin{aligned} p_{k,N} &\approx 1 - \frac{1}{2} \int_N^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{n^{\frac{3}{2}}} dn = 1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \frac{n^{-\frac{1}{2}}}{-\frac{1}{2}} \Big|_N^{\infty}, \\ &\approx 1 + \sqrt{\frac{2}{\pi}} k n^{-\frac{1}{2}} \Big|_N^{\infty}, \end{aligned}$$

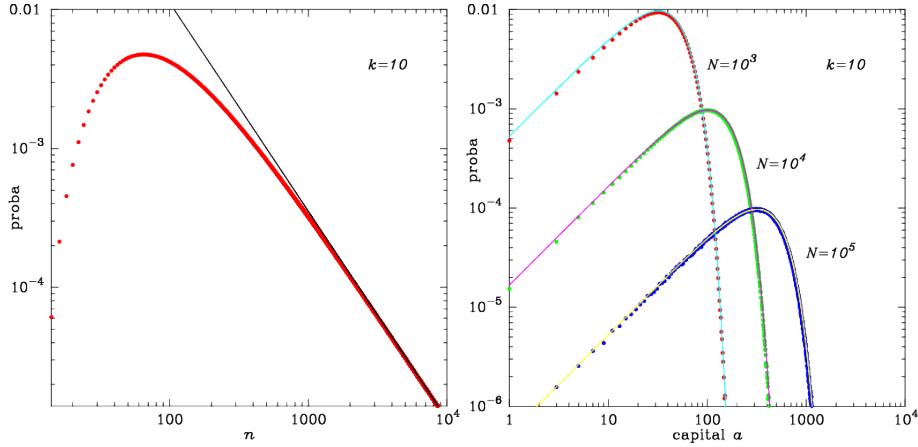


FIGURE 11 – À gauche, la courbe rouge représente la probabilité  $u_{k,n}$  pour que le joueur A soit ruiné en  $n$  tours alors que son capital de départ était de  $k$  (dans cet exemple  $k = 10$ ). La droite tracée en noir correspond à l'expression asymptotique (63). À droite, probabilité pour que le joueur A possède encore un capital non nul alors que  $N$  tours ont été joués. Dans les deux cas le jeu est équitable et la fortune de B est infinie.

d'où

$$p_{k,N} \approx 1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{N^{\frac{1}{2}}}, \quad \text{pour } N \gg k. \quad (65)$$

La figure 11 représente, sur sa partie droite, la probabilité pour que le capital de A soit égal à  $a$  au moment où le jeu s'arrête, c'est-à-dire lorsque le joueur est ruiné ou que  $N$  tours ont été joués. Le calcul a été effectué pour trois valeurs de  $N = 10^3, 10^4$  et  $10^5$ . Les probabilités pour que A soit ruiné, sont respectivement d'environ 0.7518, 0.9204 et 0.9747. La formule (65) aurait donné 0.7477, 0.9202 et 0.9748. Ces courbes ont été obtenues grâce à  $10^8$  simulations de Monte-Carlo. Une bonne approximation de la probabilité du gain de A, dès que  $N \gg k$ , est donné par la formule empirique

$$\Pr\{A = a\} = \frac{\frac{5}{3}ka^{\frac{8}{3}}N^{-\frac{7}{3}}}{e^{a^{\frac{5}{3}}N^{-\frac{5}{6}}} - 1}, \quad N \gg k, a > 0, \quad (66)$$

où  $a$  est le capital de A,  $k$  son capital initial et  $N$  le nombre maximum de tours. On peut juger sur la figure 11 de la bonne adéquation de la formule avec les simulations de Monte-Carlo. L'erreur relative est très élevée pour les grandes valeurs de  $a$ , alors que l'erreur absolue est négligeable. Du point de vue de la diffusion, ces courbes représentent la probabilité pour qu'une particule se trouve à l'épaisseur optique  $a$  après avoir subit au plus  $N$  diffusions lorsque le milieu est plan parallèle semi-infini.

#### 4.5.2 Approximation par une marche au hasard à deux états RW2

Afin de décrire approximativement le phénomène de la diffusion dans un milieu plan parallèle, on adopte à présent un modèle de marche au hasard de type « ruine du joueur ». Le modèle inclut en outre la possibilité de destruction de la particule.

Pour fixer les caractéristiques de cette marche, nous allons considérer séparément le cas où la particule est diffusée vers l'avant :  $\mu_i \geq 0$ , et celui où elle est rétrodiffusée :  $\mu_i < 0$ . La longueur du parcours effectué dans chacun de ces deux cas est gouverné par la loi conditionnelle de  $\mu_i$  qui est uniforme entre  $-1$  et  $0$  pour le premier cas et entre  $0$  et  $1$  pour le second. Il vient

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\{s_i \mu_i | \mu_i < 0\} &= \mathbb{E}\{s_i\} \mathbb{E}\{\mu_i | \mu_i < 0\} = 1 \times -\frac{1}{2} = -\frac{1}{2}, \\ \mathbb{E}\{s_i \mu_i | \mu_i \geq 0\} &= \mathbb{E}\{s_i\} \mathbb{E}\{\mu_i | \mu_i \geq 0\} = 1 \times \frac{1}{2} = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

La particule effectue donc, lorsqu'elle est dans le milieu diffusant, un parcours aléatoire où chaque pas  $\Delta\tau$  vaut en moyenne  $\frac{1}{2}$ , soit dans un sens soit dans l'autre, avec la probabilité  $\frac{1}{2}$ . Dans une première approche, on remplacera le processus réel par une marche au hasard dont les pas correspondent à ces moyennes. Les autres caractéristiques de cette marche, sont données ci-dessous.

- Au départ, on place le mobile sur la maille  $\tau_0 = k\Delta\tau$ ,  $k \neq 0$ , avec une probabilité  $p_{0,k}$  en accord avec le processus physique de pénétration du rayonnement incident. L'abscisse initiale  $\tau_0$  est le lieu de la première diffusion.
- À l'occasion d'une diffusion, le mobile a la probabilité  $1 - a$  d'être détruit.
- Si le mobile n'a pas été détruit, ce qui arrive avec la probabilité  $a$ , il possède la probabilité  $\frac{1}{2}$  de se déplacer de  $\tau$  en  $\tau + \Delta\tau$  et également  $\frac{1}{2}$  de se déplacer en  $\tau - \Delta\tau$ . Les pas sont indépendants.

- Il existe une barrière absorbante en  $\tau = 0$ . Si le mobile parvient en  $\tau = 0$ , la marche s'interrompt, la particule s'échappe du milieu diffusant.

Soit  $Z$  la variable aléatoire indiquant la position du mobile sur l'axe des  $\tau$ , et  $Z_i$  celle correspondant au pas effectué au cours de la  $i^{\text{e}}$  diffusion. Au bout de  $n$  diffusions, si le mobile est parti de  $\tau_0 = k\Delta\tau$  il se retrouve alors à l'abscisse  $Z = k\Delta\tau + \sum_{i=1}^n Z_i$ . Soit  $p_{0,k}$  la probabilité pour que le mobile commence sa marche à partir de  $\tau_0 = k\Delta\tau$ . Comme dans le paragraphe ci-dessus, on considère tous les chemins qui aboutissent en  $\tau = 0$  après  $n$  diffusions. Il y a  $T(n, k)$  chemins de ce type, ils possèdent toutes la probabilité  $(1/2)^n$  d'avoir été parcourus. On pose  $u_{k,n} = T(n, k)(1/2)^n$  la probabilité pour que le mobile atteigne  $\tau = 0$  en  $n$  pas alors qu'il est parti de l'épaisseur  $\tau = k\Delta\tau$  (si  $n < k$ , on posera par convention  $u_{k,n} = 0$ ). Le mobile possède en outre la probabilité  $a^n$  d'avoir survécu aux  $n$  possibilités de destruction au cours du chemin. La réflectance  $R(a)$  est alors donnée par la formule

$$R(a) = \sum_{k=1}^{\infty} p_{0,k} \sum_{n=0}^{\infty} a^n u_{k,n}. \quad (67)$$

On reconnaît dans la seconde somme, la fonction génératrice  $V_k$  du retour à l'origine pour  $p = q = \frac{1}{2}$  et pour la valeur  $s = a$  (voir appendice A.4.6, équations (136) et (145)). On a

$$V_k(a) = \lambda_2^k(a), \text{ avec } \lambda_2 = \frac{1}{a}(1 - (1 - a^2)^{\frac{1}{2}}).$$

Il vient alors

$$R(a) = \sum_{k=1}^{\infty} p_{0,k} \lambda_2^k.$$

Il reste à évaluer la probabilité  $p_{0,k}$  en fonction des conditions initiales. Quel que soit  $n$ , la condition pour que le mobile parvienne à s'échapper en  $n$  pas est

$$\tau_0 + \sum_{i=1}^n Z_i \leq 0, \quad (68a)$$

$$\tau_0 + \sum_{i=1}^{n-1} Z_i > 0. \quad (68b)$$

les pas  $Z_i$  sont égaux à  $\pm\Delta\tau$ , il s'ensuit que  $\sum_{i=1}^n Z_i$  est un multiple de  $\Delta\tau$ , soit  $\sum_{i=1}^n Z_i = p\Delta\tau$  où  $p$  est un entier. La relation (68a) montre que  $p$  est négatif, on pose  $k = -p$ ,  $k$  est alors un entier positif non nul (car  $\tau_0 > 0$ ). Par ailleurs,  $\sum_{i=1}^n Z_i = \sum_{i=1}^{n-1} Z_i - \Delta\tau$ , car le dernier pas est nécessairement négatif. Le système d'inégalités (68) s'écrit alors

$$\begin{aligned} \tau_0 &\leq k\Delta\tau, \\ \tau_0 &> (k-1)\Delta\tau. \end{aligned}$$

Soit  $(k-1)\Delta\tau < \tau_0 \leq k\Delta\tau$ . La probabilité  $p_{0,k}$  est alors égale à celle d'observer la première diffusion du processus réel dans l'intervalle  $(k-1)\Delta\tau < \tau_0 \leq k\Delta\tau$ . Puisque  $\Delta\tau = \frac{1}{2}$ , cet intervalle correspond aux épaisseurs optiques initiales  $\tau_0 : (k-1)/2 \leq \tau_0 \leq k/2$ . Il vient, pour  $k = 1, 2, \dots, \infty$  (le site  $k = 0$  n'appartient pas au milieu diffusif)

$$p_{0,k} = \int_{(k-1)/2}^{k/2} e^{-\tau} d\tau = e^{-(k-1)/2} - e^{-k/2} = e^{-\frac{k}{2}}(e^{\frac{1}{2}} - 1).$$

L'expression de la réflectance s'écrit alors

$$\begin{aligned} R(a) &= \sum_{k=1}^{\infty} (e^{\frac{1}{2}} - 1) e^{-\frac{k}{2}} \lambda_2^k(a) = (e^{\frac{1}{2}} - 1) \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\frac{k}{2}} \lambda_2^k(a), \\ &= (e^{\frac{1}{2}} - 1) e^{-\frac{1}{2}} \lambda_2(a) \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{k}{2}} \lambda_2^k(a) \\ &= (1 - e^{-\frac{1}{2}}) \lambda_2(a) \frac{1}{1 - e^{-\frac{1}{2}} \lambda_2(a)}, \\ &= \frac{(1 - e^{-\frac{1}{2}}) \lambda_2(a)}{1 - e^{-\frac{1}{2}} \lambda_2(a)}, \end{aligned}$$

D'où le résultat final

$$R(a) = \frac{(1 - e^{-\frac{1}{2}}) \frac{1}{a} (1 - (1 - a^2)^{\frac{1}{2}})}{1 - e^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{a} (1 - (1 - a^2)^{\frac{1}{2}})}. \quad (69)$$

Cette courbe est indiquée en bleu foncé sur la partie gauche de la figure 12. La différence entre cette courbe et celle, en rouge, calculée par une simulation de Monte-Carlo est également représentée sur la partie droite de la même figure.

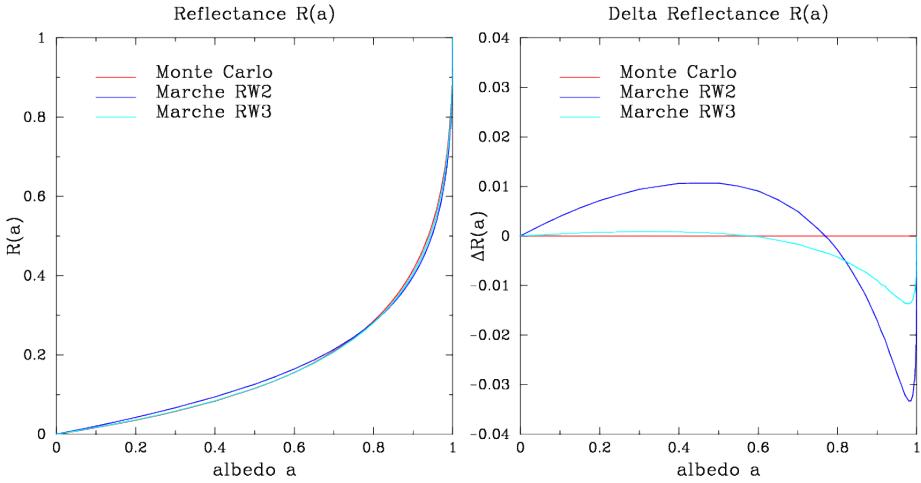


FIGURE 12 – À gauche, réflectance d'une couche semi-infinie dans le modèle plan parallèle en fonction de l'albedo des particules diffusantes. À droite, différence entre les réflectances calculées d'après les marches RW2 et RW3, et celles obtenues par une simulation de Monte Carlo. L'axe horizontal est l'albedo des diffuseurs, l'axe vertical celui de la réflectance de la couche.

**Limitation du temps de calcul.** Lorsque que l'albedo  $a = 1$ , la simulation de RW2 prend, en moyenne, un temps infini. Dans ces conditions, il est souhaitable d'arrêter les calculs alors que la particule a diffusée  $N$  fois. Grâce à la formule (65) il est possible d'estimer la probabilité pour qu'une particule ne se soit pas échappée alors qu'elle avait été injectée au pas  $k$ . Pour tous les  $k$  possibles, la probabilité  $p_N$  pour que la particule subisse  $N$  diffusions est donnée par une valeur moyenne

$$\begin{aligned} p_N &= \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{N^{\frac{1}{2}}} p_{0,k}, \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{k=1}^{\infty} k e^{-\frac{k}{2}} (e^{\frac{1}{2}} - 1), \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} (e^{\frac{1}{2}} - 1) \sum_{k=1}^{\infty} k e^{-\frac{k}{2}}, \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} (e^{\frac{1}{2}} - 1) \frac{e^{-\frac{1}{2}}}{(1 - e^{-\frac{1}{2}})^2}, \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{1 - e^{-\frac{1}{2}}} \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned}$$

A l'inverse, si on se fixe  $1 - \alpha$  la probabilité pour que la particule s'échappe avant  $N$  diffusions, la formule précédente permet de calculer  $N$ . Il vient

$$N = \frac{2}{\pi} \frac{1}{(1 - e^{-\frac{1}{2}})^2} \alpha^{-2} \approx 4\alpha^{-2}. \quad (70)$$

Tout se passe comme si les diffuseurs avaient un albedo  $a_{\text{lim}}$  donné par la formule

$$a_{\text{lim}} \approx \left( \frac{2}{N^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{N}}.$$

#### 4.5.3 Approximation par une marche au hasard à trois états RW3

L'approximation RW2 est assez bonne, elle reproduit assez bien l'allure générale de la courbe  $R(a)$  obtenue par les simulations de Monte Carlo. Il est cependant possible d'améliorer cette approximation en considérant la marche au hasard à trois possibilités : soit le mobile exécute un pas  $+1$  ou  $-1$  avec la probabilité  $p_1$ , soit il reste sur place avec la probabilité  $p_0$ . Afin d'obtenir une moyenne conditionnelle égale à  $-\frac{1}{2}$  ou  $+\frac{1}{2}$  selon que  $\tau \leq 0$  ou  $\tau \geq 0$ , il faudra prendre  $p_0 = \frac{1}{2}$  et  $p_1 = \frac{1}{4}$ . Soit RW3 cette marche.

Un calcul analogue à celui effectué pour RW2, et dont on trouvera les détails à l'appendice A.4.7, conduit à l'expression de la fonction génératrice  $V_k$

$$V_k(a) = \lambda_2^k(a), \text{ avec } \lambda_2(a) = \frac{1}{a} \left( (2-a) - 2(1-a)^{\frac{1}{2}} \right).$$

Cette fonction représente la probabilité pour qu'une particule située en  $\tau = k\Delta\tau$  parvienne à s'échapper de la couche, alors qu'elle peut être détruite à chaque diffusion avec la probabilité  $1 - a$ . Des considérations analogues à celles de RW2 amènent au résultat

$$R(a) = \frac{(1 - e^{-1})\lambda_2(a)}{1 - e^{-1}\lambda_2(a)}. \quad (71)$$

L'adéquation de RW3 au processus physique réel, tel qu'il est déterminé par la simulation de Monte Carlo, peut être jugée d'après les courbes tracées en cyan sur la figure 12.

#### 4.5.4 Approximation par une marche au hasard symétrique RW( $2n + 1$ )

Dans cette marche, le mobile possède la probabilité  $p_k$  d'effectuer un pas de longueur  $k\Delta\tau$ , où  $k$  est un entier allant de  $-n$  à  $n$ . La marche est symétrique, on a  $p_{-k} = p_k$ . Le mobile est placé au départ sur le site  $k$  avec la probabilité  $p_{0,k}$

$$p_{0,k} = \int_{(k-1)\Delta\tau}^{k\Delta\tau} e^{-\tau} d\tau = (e^{\Delta\tau} - 1)e^{-k\Delta\tau}.$$

La probabilité pour que le mobile rejoigne l'origine depuis le site  $k$  sans avoir été détruit est donnée par  $V_k(a)$ , où  $V_k$  est la fonction génératrice des  $u_{k,n}$ . Il vient

$$R(a) = (e^{\Delta\tau} - 1) \sum_{k=1}^{\infty} e^{-k\Delta\tau} V_k(a),$$

D'après l'appendice A.4.7, la fonction génératrice peut s'écrire sous la forme  $V_k(a) = \sum_{r=1}^n c_r \lambda_r^k(a)$ . On obtient alors

$$\begin{aligned} R(a) &= (e^{\Delta\tau} - 1) \sum_{k=1}^{\infty} e^{-k\Delta\tau} \sum_{r=1}^n c_r \lambda_r^k, \\ &= \sum_{r=1}^n (e^{\Delta\tau} - 1) c_r \sum_{k=1}^{\infty} e^{-k\Delta\tau} \lambda_r^k, \\ &= \sum_{r=1}^n (e^{\Delta\tau} - 1) e^{-\Delta\tau} \lambda_r c_r \sum_{k=0}^{\infty} e^{-k\Delta\tau} \lambda_r^k, \end{aligned}$$

d'où on tire le résultat final

$$R(a) = \sum_{r=1}^n c_r \frac{(1 - e^{-\Delta\tau})\lambda_r}{1 - e^{-\Delta\tau}\lambda_r}. \quad (72)$$

Dans cette expression les coefficients complexes  $c_r$  sont les solutions du système linéaire de Vandermonde

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ \lambda_1^{-1} & \lambda_2^{-1} & \lambda_3^{-1} & \dots & \lambda_n^{-1} \\ \lambda_1^{-2} & \lambda_2^{-2} & \lambda_3^{-2} & \dots & \lambda_n^{-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \lambda_1^{-n+1} & \lambda_2^{-n+1} & \lambda_3^{-n+1} & \dots & \lambda_n^{-n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix},$$

et les fonctions complexes  $\lambda_r(a)$  sont les  $n$  racines, de module inférieur à un, de l'équation caractéristique

$$a \sum_{k=-n}^n p_k \lambda^k - 1 = 0$$

ou, compte tenu que la marche est symétrique,

$$(ap_0 - 1) + \sum_{k=1}^n ap_k(\lambda^k + \lambda^{-k}) = 0.$$

Après multiplication par  $\lambda^{2n}$ , cette équation devient un polynôme de degré  $2n$ . Dans ce polynôme,  $a$  représente l'albedo des diffuseurs,  $p_0$  la probabilité de rester sur place et  $p_k$  la probabilité d'effectuer un pas de longueur  $\pm k\Delta\tau$ . Les probabilités  $p_0, p_1, \dots, p_n$  sont calculées, suivant l'algorithme exposé ci-après, de façon à reproduire au mieux la fonction de répartition (42) illustrée par la figure 7. Le fait que  $R(a)$  soit une fonction réelle positive, alors que les  $c_r$  et  $\lambda_r(a)$  sont complexes, résulte des conditions aux contours imposées sur la marche au hasard.

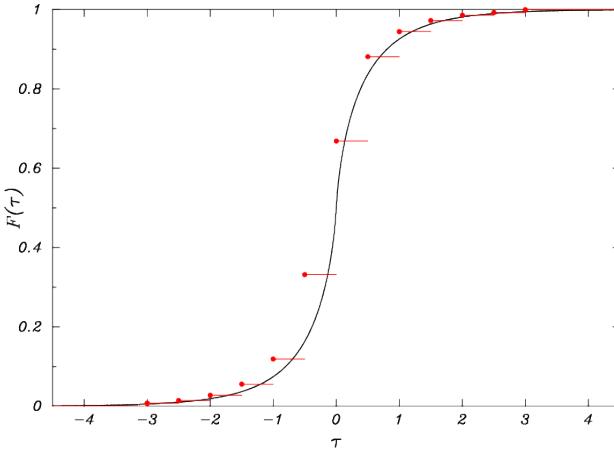


FIGURE 13 – La figure représente : en rouge, la fonction de répartition des épaisseurs optiques obtenues par une marche au hasard RW6 de pas élémentaire  $\Delta\tau = 0.5$  et pour les 13 valeurs de  $\tau$  allant de  $-6\Delta\tau$  à  $+6\Delta\tau$ ; et en noir, la fonction de répartition du processus réel. Il n'a pas été procédé à un ajustement des  $p_k$  afin de contraindre le pas positif moyen à être égal à  $\frac{1}{2}$ .

#### 4.5.5 Choix des probabilités $p_k$ de la marche discrète

La fonction de répartition  $F_{2n+1}$  des pas  $\Delta\tau_i$  de la marche au hasard à  $2n+1$  états est donnée par l'expression

$$\forall i, F_{2n+1}(\tau) \stackrel{\text{déf}}{=} \Pr\{\Delta\tau_i \leq \tau\} = \sum_{k=-n}^n p_k \mathbf{1}_{\lfloor \tau/\Delta\tau \rfloor \geq k}.$$

Afin que l'approximation du phénomène réel par la marche au hasard soit la meilleure possible, il faut que les  $p_k$  soient choisis de façon à ce que la distance de Kolmogorov entre  $F$  et  $F_{2n+1}$  soit la plus petite possible. Une façon d'atteindre ce but est d'identifier  $p_k/\Delta\tau$  avec, sauf pour les bords, l'approximation aux différences finies de la dérivée de  $F$  en  $k\Delta\tau$ . Soit

$$p_k = \begin{cases} \frac{1}{2}(F((-n+1)\Delta\tau) + F(-n\Delta\tau)), & \text{si } k = -n, \\ \frac{1}{2}(F((k+1)\Delta\tau) - F((k-1)\Delta\tau)), & \text{si } -n < k < n, \\ 1 - \frac{1}{2}(F(n\Delta\tau) + F((n-1)\Delta\tau)), & \text{si } k = n, \end{cases}$$

où  $F$  est donnée par l'expression (42).

En suivant ce procédé, la moyenne conditionnelle des pas positifs ne sera pas nécessairement égale à  $\frac{1}{2}$ . On peut tenter d'imposer cette valeur en ajustant les  $p_k$ . Soit  $\langle \Delta\tau \rangle$  le pas moyen positif avant correction, en posant pour tous les  $k \neq 0$ ,  $p'_k = p_k/(2\langle \Delta\tau \rangle)$ , on obtiendra un pas moyen positif égal à  $\frac{1}{2}$ . On affectera ensuite à  $p'_0$  la probabilité nécessaire afin que la somme des  $p'_k$  soit égale à un. Ce dernier ajustement n'affectera en rien la valeur du nouveau pas moyen positif à condition que la procédure soit licite, c'est-à-dire que  $p'_0$  ne soit pas négatif.

Finalement, on choisira la valeur du pas élémentaire  $\Delta\tau$ , de façon à ce que la distance de Kolmogorov entre les fonctions de répartitions réelles et approchées ne correspondent pas aux abscisses  $-n\Delta\tau$  ou  $n\Delta\tau$ .

La procédure qui vient d'être décrite, permet d'approcher le phénomène réel sans qu'il soit nécessaire d'avoir recours à une très lourde simulation de Monte-Carlo. À titre d'exemple, la figure 14 représente la différence des réflectances d'une couche plan-parallèle semi-infinie calculées d'après les formules données ci-dessus pour  $\Delta\tau = 0.1$  et  $n = 40$  et des simulations de Monte-Carlo. Il a été nécessaire de lancer  $4.4 \times 10^9$  particules afin d'obtenir le bruit de calcul présent sur la partie gauche de la figure.

## 5 La diffusion de Rayleigh

La diffusion de Rayleigh est un exemple de diffusion non-isotope, mais à symétrie cylindrique (la fonction de phase de dépend pas de l'azimut lorsque la lumière incidente n'est pas polarisée). La géométrie de la diffusion dépend de la position de l'impulsion de la particule  $\vec{p}$  avant diffusion. À cause de cette dépendance, il faut distinguer l'angle  $\alpha$  de diffusion de l'angle  $\theta$  entre l'impulsion  $\vec{p}$  et l'axe de pénétration des particules. De même, il faut tenir compte de l'azimut de diffusion  $\beta$ . Cette géométrie est illustrée par le triangle sphérique de la figure 2. La formule dite *des cosinus* permet de calculer le nouvel angle  $\theta'$  de façon unique grâce à son cosinus. On a :

$$\cos \theta' = \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos \beta. \quad (73)$$

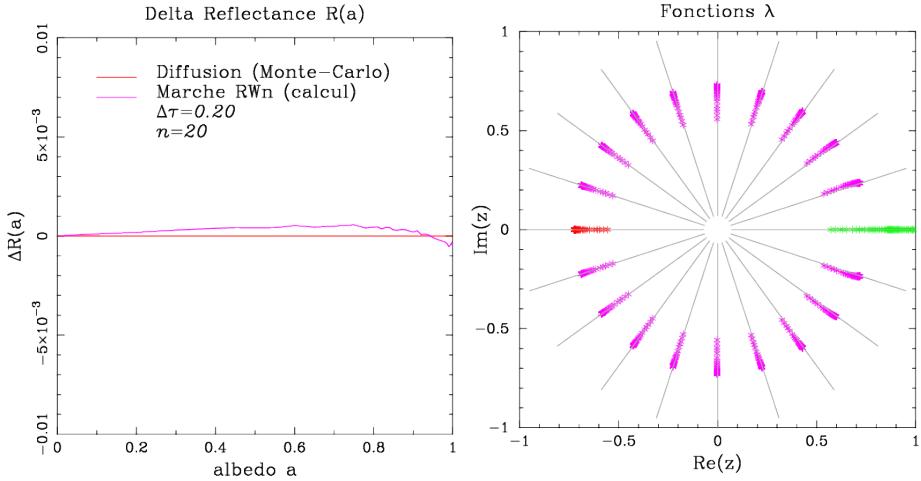


FIGURE 14 – À gauche, différence entre les réflectances calculées d’après les marches RWn (voir figure 27), et celles obtenues par une simulation de Monte-Carlo pour le phénomène de diffusion réel. À droite, représentation graphique des fonctions  $\lambda_r$  dans le plan complexe. Le module de ces fonctions augmente avec l’albedo  $a$ .

La fonction de phase de l’angle de diffusion  $\alpha$  est

$$P_\alpha(\alpha) = \frac{3}{8}(1 + \cos^2 \alpha),$$

et la densité de probabilité de  $m = \cos \alpha$  est

$$P_m(m) = \frac{3}{8}(1 + m^2).$$

Finalement on note, comme dans le cas isotrope,  $\mu = \cos \theta$ .

## 5.1 Quelques résultats analytiques

La condition initiale  $\theta = 0$ , portant sur le flux incident, impose dans l’équation (73) :  $\cos \theta = 1$  et  $\sin \theta = 0$ , qui se réduit alors à  $\cos \theta' = \cos \alpha = m$ . Cette simplification permet d’établir quelques résultats portants sur la première diffusion.

**Densité et fonction de répartition.** On note  $T_1$  la variable aléatoire associée à la variation d’épaisseur optique  $\Delta\tau_1 = ms$ . La densité de probabilité  $f_{T_1}$  de  $T_1$  peut être calculée d’une manière similaire au cas isotrope, il suffit simplement de substituer la densité de  $\mu$  du cas isotrope par celle de  $m$  du cas Rayleigh. On obtient, en posant  $t = \Delta\tau_1$  pour simplifier l’écriture

$$\begin{aligned} f_{T_1}(t) &= \int_0^1 \frac{3}{8}(1 + m^2) \exp(-|t|/m) \frac{dm}{m}, \\ &= \frac{3}{8} \int_1^\infty (1 + u^{-2}) \exp(-|t|u) \frac{du}{u}. \end{aligned}$$

La dernière intégrale s’exprime à l’aide d’intégrales exponentielles

$$f_{T_1}(t) = \frac{3}{8} (E_1(|t|) + E_3(|t|)). \quad (74)$$

Le graphe de cette fonction est illustré figure 15, il se distingue peu du cas isotrope.

La fonction de répartition  $F_{T_1}$  s’obtient par intégration de  $f_{T_1}$  avec les conditions  $F_{T_1}(-\infty) = 0$ ,  $F_{T_1}(\infty) = 1$  et  $F_{T_1}(0) = 0.5$ . On trouve

$$F_{T_1}(t) = \begin{cases} \frac{3}{8}(E_2(-t) + E_4(-t)), & \text{si } t \leq 0; \\ 1 - \frac{3}{8}(E_2(t) + E_4(t)), & \text{si } t \geq 0. \end{cases} \quad (75)$$

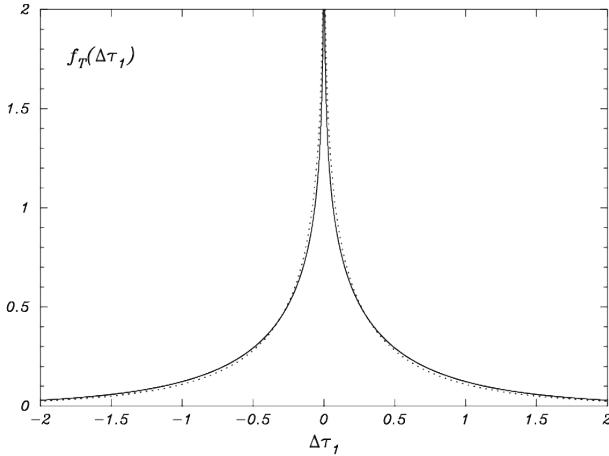


FIGURE 15 – Densité de probabilité du premier pas  $\Delta\tau_1$  dans un processus de diffusion de Rayleigh. Pour comparer, on a tracé en pointillé la même fonction correspondant au cas isotrope.

**Fraction des particules sortant dès la première diffusion.** On obtient, à l'aide de la fonction de répartition  $F_{T_1}$ , la fraction  $\pi_1$  de particules s'échappant du milieu diffusant dès la première diffusion

$$\begin{aligned}\pi_1 &= \int_0^\infty e^{-\tau} F_{T_1}(-\tau) d\tau = \frac{3}{8} \int_0^\infty e^{-\tau} (E_2(\tau) + E_4(\tau)) d\tau, \\ &= \frac{3}{8}(1 - \ln 2) + \frac{3}{8} \int_0^\infty e^{-\tau} E_4(\tau) d\tau.\end{aligned}$$

La première intégrale a déjà été calculée pour le cas isotrope, pour la seconde il vient

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-\tau} E_4(\tau) d\tau &= \int_0^\infty e^{-\tau} d\tau \int_1^\infty \frac{e^{-\tau u}}{u^4} du, \\ &= \int_1^\infty \frac{du}{u^4} \int_0^\infty e^{\tau(1+u)} du = \int_1^\infty \frac{du}{u^4} \frac{1}{1+u},; \\ &= \int_1^\infty \left[ \frac{1}{u^4} - \frac{1}{u^3} + \frac{1}{u^2} - \frac{1}{u} + \frac{1}{1+u} \right] du, \\ &= \left[ -\frac{1}{3u^3} + \frac{1}{2u^2} - \frac{1}{u} + \ln\left(\frac{1+u}{u}\right) \right]_1^\infty, \\ &= \frac{5}{6} - \ln 2.\end{aligned}$$

On en déduit la fraction  $\pi_1$  cherchée

$$\pi_1 = \frac{1}{16}(11 - 12\ln 2) \approx 0.1676. \quad (76)$$

Cette fraction est plus élevée d'environ 1.5% que celle trouvée dans le cas isotrope, ce résultat est cohérent car, dans le cas Rayleigh, pour la première diffusion il y a plus de particules diffusées au voisinage de l'axe de pénétration du faisceau incident que dans le cas isotrope.

## 5.2 Simuler une diffusion de Rayleigh.

Remarque préliminaire : Pour traiter correctement la diffusion de Rayleigh, surtout dans le cas où elle est multiple, il faut tenir compte de la polarisation des ondes électromagnétiques. Dans un soucis de simplification, on n'en tiendra pas compte à ce stade. Les résultats obtenus seront donc incomplets. La diffusion en tenant compte de la polarisation est traitée plus loin avec la diffusion de Mie.

La particule est diffusée aléatoirement suivant l'azimut  $B$  et l'angle polaire  $A$ . Ces variables aléatoires sont indépendantes,  $B$  est réparti uniformément entre 0 et  $2\pi$  et la fonction de répartition de  $A$  est donnée par :

$$\begin{aligned}\Pr(A \leq \alpha) &= \int_0^\alpha \frac{3}{8}(1 + \cos^2 t) \sin t dt, \\ &= \frac{1}{2} - \frac{3}{8} \cos \alpha - \frac{1}{8} \cos^3 \alpha,\end{aligned}$$

Dans le cas plan-parallèle, il est plus avantageux de considérer la variable  $M = \cos A$ . Ce changement de variable est bijectif mais à dérivée négative par conséquent, lorsque  $M$  croît,  $A$  décroît de telle sorte que, en posant  $m = \cos \alpha$ , on obtient :

$$\begin{aligned}\Pr(M \leq m) &= \Pr(A > \alpha) = 1 - \Pr(A \leq \alpha), \\ &= 1 - \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{8} \cos \alpha - \frac{1}{8} \cos^3 \alpha\right), \\ &= 1 - \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{8}m - \frac{1}{8}m^3\right), \\ &= \frac{1}{8}m^3 + \frac{3}{8}m + \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

La simulation de  $M$  par l'inversion de  $\frac{1}{8}M^3 + \frac{3}{8}M + \frac{1}{2} = U$  s'obtient à l'aide de la formule de Cardan. Si  $U$  désigne une variable uniforme entre 0 et 1, on trouve  $M$  de la façon suivante

$$\begin{aligned}\Gamma &= 4U - 2, \quad \Delta = (\Gamma^2 + 1)^{\frac{1}{2}}, \\ M &= (\Gamma + \Delta)^{\frac{1}{3}} + (\Gamma - \Delta)^{\frac{1}{3}}.\end{aligned}$$

Cette formule produit le résultat escompté, mais il y a mieux à faire. Écrivons la fonction de répartition  $F(m)$  de  $M$  de la façon suivante :

$$\begin{aligned}F(m) &\stackrel{\text{déf}}{=} \Pr(M \leq m) = \frac{1}{8}m^3 + \frac{3}{8}m + \frac{1}{2}, \\ &= \frac{1}{8}(m^3 + 3m + 4), \\ &= \frac{1}{8}(m^3 + 1 + 3(m + 1)), \\ &= \frac{1}{4}\left(\frac{m^3 + 1}{2}\right) + \frac{3}{4}\left(\frac{m + 1}{2}\right).\end{aligned}$$

La fonction  $\frac{m+1}{2}$  est la fonction de répartition d'une variable aléatoire  $M = 2U - 1$ , uniforme entre -1 et 1. La fonction  $\frac{m^3+1}{2}$  est la fonction de répartition de la variable aléatoire  $V$  :

$$\frac{V^3 + 1}{2} = U, \quad \text{soit} \quad V = (2U - 1)^{\frac{1}{3}} = M^{\frac{1}{3}}.$$

D'où l'algorithme suivant :

#### **Algorithme M** Simulation de $m = \cos \alpha$ suivant Rayleigh (méthode 1).

**M1.** Choisir 2 nombres indépendants répartis uniformément entre 0 et 1.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1$  et  $U_2$

**M2.** Procéder à la simulation.

$2U_1 - 1 \rightarrow M$

Si  $U_2 \leq 0.25$  alors  $M^{\frac{1}{3}} \rightarrow M$

Il faut faire attention en Fortran à la gestion du signe de la puissance  $\frac{1}{3}$ . La transcription correcte de l'équation  $r = \sqrt[3]{x}$  est :

`x = Sign(Abs(x) ** (1./3.), x)`

Le calcul de la racine troisième peut prendre du temps pour certaines implantations du langage de programmation. Afin de disposer d'autres algorithmes et de choisir le plus rapide, on fait appel aux statistiques d'ordre. Nous allons montrer que si  $F_{(1)}$  et  $F_{(3)}$  désignent les fonctions de répartition de la plus petite, respectivement de la plus grande, parmi trois variables aléatoires réparties uniformément entre -1 et 1, alors la fonction de répartition de  $M$  s'écrit

$$F(m) = \frac{1}{2}F_{(1)}(m) + \frac{1}{2}F_{(3)}(m). \quad (77)$$

*Démonstration.* Il s'agit de simuler une variable aléatoire  $M$  dont la fonction de répartition est :  $F(m) = \frac{1}{8}m^3 + \frac{3}{8}m + \frac{1}{2}$ , entre -1 et +1.

Soit  $U$  une variable uniforme entre 0 et 1, et  $V = 2U - 1$ . La fonction de répartition  $F_V$  de  $V$  est donnée par :

$$F_V(m) \stackrel{\text{déf}}{=} \Pr(V \leq m) = \Pr(2U - 1 \leq m) = \Pr(U \leq \frac{1}{2}(m + 1)) = \frac{1}{2}(m + 1).$$

Cherchons maintenant la fonction de répartition  $F_{(3)}$  de la plus grande des trois variables indépendantes  $V_1, V_2$  et  $V_3$  qui toutes suivent la répartition de  $V$ . Soit  $V_{(3)}$  cette variable. Par définition  $F_{(3)}(m) = \Pr(V_{(3)} \leq m)$ . Pour que le maximum des  $V_i$  soit inférieur ou égal à  $m$  il faut que  $V_1, V_2$  et  $V_3$  soient tous inférieurs ou égaux à  $m$ , ce qui arrive avec la probabilité  $F_V^3(m)$ . Il vient :

$$F_{(3)}(m) = \left(\frac{1}{2}(m + 1)\right)^3 = \frac{1}{8}x^3 + \frac{3}{8}m^2 + \frac{3}{8}x + \frac{1}{8}.$$

	Inversion	Algorithme M		
	Cardan	Méthode 1	Méthode 2	Méthode 3
a)	362 sec	64,6 sec	63,5 sec	46,4 sec
b)	145 sec	35,4 sec	34,1 sec	21,4 sec

TABLE 1 – Temps de calcul de  $10^9$  diffusions Rayleigh suivant différentes méthodes et configurations : a) Intel® Core™ 2 Duo CPU E6750@2.66GHz et le compilateur gfortran -O2 version 4.8.4. et b) Intel® Core™ i3 CPU 4160@3.60GHz et le compilateur gfortran -O2 version 4.9.2.

On cherche à présent la fonction de répartition  $F_{(1)}$  de la plus petite des trois variables. Pour que la plus petite des trois soit inférieure ou égale à  $m$ , il ne faut pas qu'elles soient toutes les trois supérieures à  $m$ . Ce qui arrive avec la probabilité  $1 - (1 - F(m))^3$ . Il vient :

$$F_{(1)}(x) = 1 - \left(1 - \frac{1}{2}(m+1)\right)^3 = \frac{1}{8}m^3 - \frac{3}{8}m^2 + \frac{3}{8}m + \frac{7}{8}.$$

On constate alors que  $F(m) = \frac{1}{2}(F_{(1)}(m) + F'_{(3)}(m))$ .  $\square$

Dans ces conditions, pour simuler  $M$  il suffit de choisir avec une probabilité  $\frac{1}{2}$  soit le minimum, soit le maximum des 3 valeurs  $V_1, V_2$  et  $V_3$ . C'est le rôle d'une quatrième variable  $U_4$ . Comme les valeurs extrêmes des  $V$  s'obtiennent à partir des valeurs correspondantes des  $U$ , le changement de variable  $2U - 1$  et les fonctions min et max commutent, d'où l'algorithme M qui suit.

**Algorithme M** *Simulation de  $m = \cos \alpha$  suivant Rayleigh (méthode 2).*

**M1.** Choisir quatre nombres indépendants répartis uniformément entre 0 et 1.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2, U_3$  et  $U_4$

**M2.** Procéder à la simulation.

Si  $U_4 \leq 0.5$  alors  $2\min(U_1, U_2, U_3) - 1 \rightarrow M$

Sinon  $2\max(U_1, U_2, U_3) - 1 \rightarrow M$

Mais cet algorithme qui exige de simuler quatre variables uniformes et le calcul du minimum ou du maximum de trois d'entre elles, n'est pas beaucoup plus rapide que la méthode 1 exposée plus haut. En réalité il n'est pas nécessaire de simuler la quatrième variable, ni de calculer le minimum ou le maximum. En effet, si on simule trois variables uniformes, une fois sur trois  $U_1$  sera le minimum, une fois sur trois il sera le maximum et une fois sur trois il sera la valeur médiane. De même pour  $U_3$ . Si  $U_1$  n'est pas la valeur médiane, conditionnellement à cet événement,  $U_1$  possède la probabilité  $\frac{1}{2}$  d'être soit le minimum soit le maximum, ce qui est conforme à l'équation (77). Dans le cas où  $U_1$  est la valeur médiane, alors  $U_3$  (ou  $U_2$ ) ne l'est pas et toujours conditionnellement à cet événement,  $U_3$  possède la probabilité  $\frac{1}{2}$  d'être soit le minimum soit le maximum, ce qui est encore conforme à l'équation (77). Finalement  $U_1$  est la valeur médiane si, et seulement si,  $U_1 > U_2$  et  $U_1 < U_3$  sont tous les deux vrais ou tous les deux faux. En fortran on écrit U1>U2 . Eqv . U1<U3. Ce qui conduit à l'algorithme suivant.

**Algorithme M** *Simulation de  $m = \cos \alpha$  suivant Rayleigh (méthode 3).*

**M1.** Choisir trois nombres indépendants répartis uniformément entre 0 et 1.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2$  et  $U_3$

**M2.** Procéder à la simulation.

Si  $(U_2 - U_1)(U_3 - U_1) < 0$  alors  $2U_3 - 1 \rightarrow M$

Sinon  $2U_1 - 1 \rightarrow M$

La table 5.2 résume les performances des trois versions de l'algorithme M.

### 5.3 Programme de la diffusion Rayleigh.

Voici, à titre d'exemple, un algorithme qui réalise la simulation de la diffusion de Rayleigh dans un couche d'épaisseur optique  $\tau_{\max}$ . Cette quantité permet d'obtenir immédiatement une idée de la transparence du nuage (par exemple, pour  $\tau_{\max} = 1$  la particule possède une chance sur  $e$ , soit environ 3, de passer au travers de la couche sans subir de diffusion). Le cas  $\tau_{\max} = \infty$  est inclus dans cet algorithme car on sait en R0  $e^{-\tau_{\max}}$  et non  $\tau_{\max}$ , au prix, il est vrai, du calcul d'une exponentielle dans le test de sortie en R9. La constante  $\epsilon$  en R1 est le plus petit réel représentable en machine tel que  $1 + \epsilon > 1$ .

### Algorithme R Diffusion de Rayleigh.

#### R0. Choix des paramètres.

Saisir( $e^{-\tau_{\max}}$ ), caractérisant le milieu.  
 Saisir(seed), initialisation des simulations.  
 Saisir( $N_{\text{part}}$ ), nombre de particules lancées.  
 $1 - e^{-\tau_{\max}} \rightarrow b$   
 $0 \rightarrow N$

#### R1. Mise en place de la fonction de phase.

Saisir( $N_{\text{phase}}$ ), nombre d'angles solides  
 Reserver phase(1 :  $N_{\text{phase}}$ )  
 $2(1 + \epsilon)/N_{\text{phase}} \rightarrow \Delta\mu$   
 $0 \rightarrow \text{phase}$

#### R2. $\mu = \cos \theta$ du photon abordant la couche.

$1 \rightarrow \mu$

#### R3. Mise en place de la fonction source (1<sup>re</sup> diffusion).

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$   
 $-\ln(1 - bU) \rightarrow \tau$

#### R4. Choix de $m = \cos \alpha$ .

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2$  et  $U_3$   
 Si  $U_1 > U_2 \Leftrightarrow U_1 < U_3$  alors  $2U_3 - 1 \rightarrow m$   
 Sinon  $2U_1 - 1 \rightarrow m$

#### R5. Choix de $\beta$ l'azimut de diffusion.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U; 2\pi U \rightarrow \beta$

#### R6. Calcul du nouveau $\mu$ par trigonométrie sphérique.

$\mu m + \sqrt{(1 - \mu^2)(1 - m^2)} \cos \beta \rightarrow \mu$

#### R7. Choix de la distance parcourue par le photon.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U; -\ln U \rightarrow s$

#### R8. Calcul de la profondeur optique de pénétration.

$\tau + s\mu \rightarrow \tau$ .

#### R9. Est-on toujours dans le milieu diffusant ?

Si  $e^{-\tau} \leq 1$  et si  $e^{-\tau} \geq 1 - b$  faire progresser le photon en **R4**.

#### R10. Sortie de la particule : sauvegarde de la direction du vecteur d'onde.

$\lfloor \frac{\mu+1}{\Delta\mu} \rfloor + 1 \rightarrow k$ , calcul de l'indice.  
 phase( $k$ ) + 1  $\rightarrow$  phase( $k$ ).  
 $N + 1 \rightarrow N$ , un photon de plus a été traité.

#### R11. Les simulations sont-elles terminées ?

Si  $N < N_{\text{part}}$ , lancer un nouveau photon en **R2**.

#### R12. Fin des simulations : mise en forme des résultats.

Pour  $k = 1$  à  $N_{\text{phase}}$   
 $(\text{phase}(k)/N_{\text{part}})(N_{\text{phase}}/2) \rightarrow \text{phase}(k)$ , normalisation.  
 $\text{phase}(k) \rightarrow \rho$ ;  $\arccos(\Delta\mu(k - \frac{1}{2}) - 1) \rightarrow \theta$   
 Écrire  $\rho$  et  $\theta$   
 Arrêt.

### 5.3.1 Comment valider l'algorithme ?

Comme dans le cas isotrope, on peut valider l'algorithme en comparant les résultats des simulations avec ce qui serait attendu, dans deux cas limite : le cas optiquement mince, et le cas optiquement épais. Le figure 16 illustre le résultat de ce test. Dans le cas optiquement mince, il n'y a pratiquement pas d'écart avec la fonction de phase théorique, et dans le cas optiquement épais la fonction de phase est proche de ce que l'on attendrait pour un corps noir.

## 5.4 La diffusion de Rayleigh chromatique

La section efficace de la diffusion de Rayleigh dépend fortement de la longueur d'onde, la loi est en  $\lambda^{-4}$ . Si, par exemple, le libre parcours moyen d'un photon bleu est  $\ell_B$ , alors celui d'un photon rouge sera environ 16 fois plus grand  $\ell_R \approx \ell_B$ . Plus précisément :

$$\frac{\ell_{\lambda_1}}{\ell_{\lambda_2}} = \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^4. \quad (78)$$

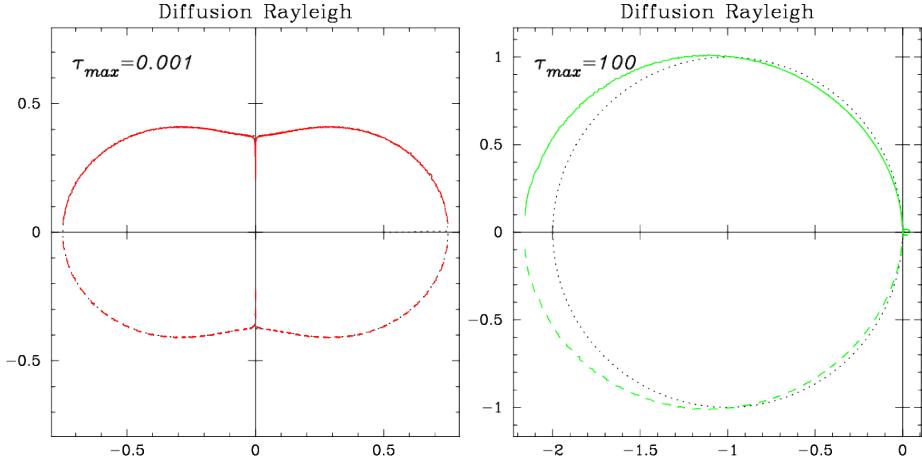


FIGURE 16 – Fonctions de phase de la diffusion de Rayleigh obtenues par simulation du cas optiquement mince, à gauche, et du cas optiquement épais, à droite. Il a été lancé  $10^8$  particules. Pour plus de lisibilité, on a symétrisé les fonctions de phase autour de l’axe des  $x$ .

Cette formule ne tient pas compte de la variation de la polarisabilité des diffuseurs avec l’indice de réfraction, lui-même fonction de  $\lambda$ , voir équation (92). Il s’agit néanmoins d’une très bonne approximation pour le problème de la couleur du ciel.

## 5.5 La couleur du ciel

La diffusion de la lumière solaire par l’atmosphère terrestre résulte de la diffusion résonnante de l’onde électromagnétique incidente par le nuage d’électrons des molécules N<sub>2</sub> et O<sub>2</sub>. Il s’agit d’une diffusion élastique, la fréquence de l’onde diffusée est identique à celle de l’onde incidente. De plus, sauf pour quelques raies moléculaires, il n’y a pas d’absorption. On fera l’hypothèse supplémentaire que les contributions des diffuseurs s’additionnent de façon incohérente.

Dans le but d’obtenir une image en couleurs du ciel, on partira du principe que la lumière naturelle (c’est-à-dire celle du Soleil) est blanche. On fera alors diffuser trois sortes de photons dont les longueurs d’ondes correspondront aux trois couleurs de base du système RGB. Soit approximativement

$$\lambda_R = 0.710\mu\text{m}, \quad \lambda_G = 0.510\mu\text{m}, \quad \lambda_B = 0.440\mu\text{m}.$$

L’image en couleurs du ciel sera obtenue en superposant les trois images rouge, verte et bleue obtenues pour ces trois longueurs d’ondes. On fait ainsi l’hypothèse que la détection d’un photon de chacune des trois couleurs créé une sensation de blanc. Dans chacune de ces couleurs, on calculera le nombre de photons reçu par unité d’angle solide pour toutes les directions  $\theta, \phi$ . On se placera toujours dans l’approximation d’une atmosphère homogène plane-parallèle.

Le problème possédant la symétrie cylindrique, il suffira de compter le nombre de photons diffusés dans l’angle solide  $\Delta\Omega = 2\pi \sin \theta \Delta\theta = 2\pi \Delta\mu$ . Ce nombre est égal à la fonction de phase multipliée par le nombre de photons qui ont été effectivement diffusés à la longueur d’onde considérée.

### Algorithme S La couleur du ciel, sans polarisation.

#### S0. Choix des $\lambda$ du système RGB (lumière blanche) en $\mu\text{m}$ .

$$0.700 \rightarrow \lambda_R; 0.510 \rightarrow \lambda_G; 0.440 \rightarrow \lambda_B$$

*! Calcul des libres parcours moyens par rapport au bleu.*

$$(\lambda_R/\lambda_B)^4 \rightarrow l_R$$

$$(\lambda_G/\lambda_B)^4 \rightarrow l_G$$

#### S1. Lecture de l’épaisseur de la couche, normalisée pour le bleu.

Renseigner( $D$ ), caractérisant le milieu.

*! Calcul de la couleur du soleil.*

$$\exp(-D/l_R) \rightarrow \text{sun}_R$$

$$\exp(-D/l_G) \rightarrow \text{sun}_G$$

$$\exp(-D) \rightarrow \text{sun}_B$$

#### S2. Choix du nombre de particules.

Renseigner( $N_{\text{part}}$ ), nombre de particules lancées

#### S3. Mise en place des fonctions de phase.

Renseigner( $N_{\text{phase}}$ ), nombre d’angles solides

Reserver phaseR(1 :  $N_{\text{phase}}$ ), phaseG(1 :  $N_{\text{phase}}$ ), phaseB(1 :  $N_{\text{phase}}$ )

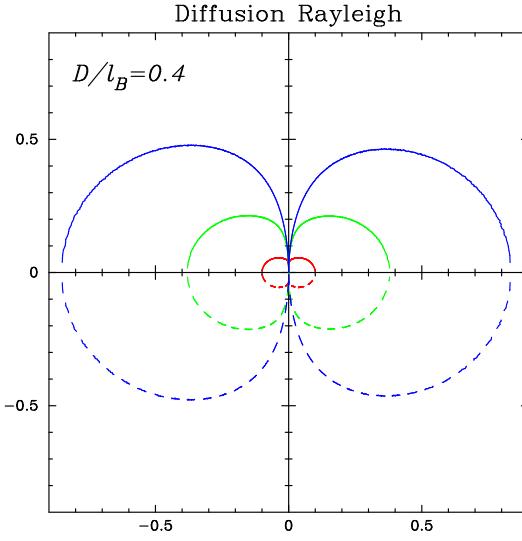


FIGURE 17 – Fonctions de phase de la diffusion Rayleigh de la lumière blanche naturelle suivant le système RGB. Le libre parcours moyen des photons B à  $\lambda_B = 0.440\mu\text{m}$  est de  $2.5D$ .

**S4.** *Simulation de la diffusion par l'algorithme R pour R G et B.*

PhaseRayleigh( $N_{\text{part}}, D/l_R$ ) → phaseR

PhaseRayleigh( $N_{\text{part}}, D/l_G$ ) → phaseG

PhaseRayleigh( $N_{\text{part}}, D$ ) → phaseB

**S6.** *Calcul du nombre de photons diffusés par couleurs.*

$N_{\text{part}}(1 - \exp(-D/l_R)/(1 - \exp(-D)) \rightarrow N_R$

$N_{\text{part}}(1 - \exp(-D/l_G)/(1 - \exp(-D)) \rightarrow N_G$

$N_{\text{part}} \rightarrow N_B$

**S7.** *Sauvegarde des résultats.*

Écrire :  $N_R$ ,  $N_G$  et  $N_B$

Écrire : phaseR, phaseG et phaseB

Arrêt

Les données sauvegardées par l'algorithme S permettent de réaliser une projection, par exemple stéréographique, de la lumière diffusée et rétrodiffusée. On étudie les principales caractéristiques de la projection stéréographique au chapitre suivant à la suite duquel on donne l'algorithme P permettant de la réaliser.

*Remarque 2.* A propos de la figure 43. Les résultats obtenus afin de déterminer la couleur du ciel, sont assez corrects bien que la polarisation ne soit pas prise en compte dans les calculs. En effet, lorsque la lumière incidente n'est pas polarisée et pour un libre parcours moyen plus grand que l'épaisseur de la couche, il n'y a majoritairement qu'une seule diffusion et sa fonction de phase associée est bien celle de Rayleigh. Nous sommes dans ce cas car la lumière solaire n'est pas polarisée et le libre parcours moyen de la lumière RGB est plus grand que  $2.5D$ .

**Algorithme P** *Projection stéréographique de la lumière diffusée.*

**P0.** *Préparation des images en couleurs du ciel.*

Renseigner( $N_{\text{pix}}$ ), nombre de pixels des images du ciel

*! Réserver les valeurs R G B pour le ciel (lumière diffusée).*

MapFR( $1:N_{\text{pix}}, 1:N_{\text{pix}}$ ), MapFG( $1:N_{\text{pix}}, 1:N_{\text{pix}}$ ), MapFB( $1:N_{\text{pix}}, 1:N_{\text{pix}}$ )

*! Réserver les valeurs R G B pour le ciel (lumière rétrodiffusée).*

MapBR( $1:N_{\text{pix}}, 1:N_{\text{pix}}$ ), MapBG( $1:N_{\text{pix}}, 1:N_{\text{pix}}$ ), MapBB( $1:N_{\text{pix}}, 1:N_{\text{pix}}$ )

**P1.** *Échelle des images en  $t = \tan(\theta/2)$  de  $-1$  à  $1$ .*

Reserver : tScale( $1:N_{\text{pix}}$ )

$\Delta t = 2./N_{\text{pix}}$

*! Construire tScale :*

$\text{tScale} = -1 + [1:N_{\text{pix}}]\Delta t - \Delta t/2$

**P2.** *Lecture des données.*

Lire :  $N_R$ ,  $N_G$  et  $N_B$

Lire : phaseR, phaseG et phaseB

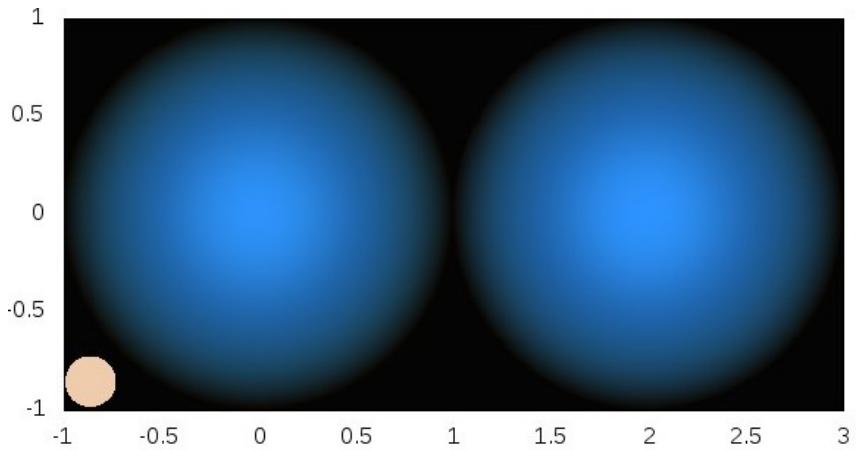


FIGURE 18 – Projection stéréographique de la lumière solaire diffusée par une atmosphère homogène plan-parallèle d'épaisseur  $D$ . Le Soleil est ponctuel et est au zénith. On a représenté à gauche la lumière diffusée, et à droite la lumière rétro-diffusée. Le libre parcours moyen des photons bleus à  $\lambda = 0.440\mu\text{m}$  est de  $2.5D$ . La partie gauche de cette projection correspond au ciel vu par un observateur situé au niveau du sol. La couleur approximative du Soleil vu du sol est indiquée en bas à gauche.

**P3.** *Calcul des phases exprimées en nombre de photons.*

$N_{\text{RphaseR}} \rightarrow \text{phaseR}$

$N_{\text{GphaseG}} \rightarrow \text{phaseG}$

$N_{\text{BphaseB}} \rightarrow \text{phaseB}$

**P4.** *Calcul des coefficients de lissage des phases afin d'atténuer le bruit de calcul.*

$\text{Lisse}(\text{phaseR}) \rightarrow \text{coeffR}$

$\text{Lisse}(\text{phaseG}) \rightarrow \text{coeffG}$

$\text{Lisse}(\text{phaseB}) \rightarrow \text{coeffB}$

**P5.** *Calcul des couleurs R G B pour les pixels des images.*

Pour  $i = 1$  à  $N_{\text{pix}}$

$\text{tScale}(i) \rightarrow x$

Pour  $j = 1$  à  $N_{\text{pix}}$

$\text{tScale}(j) \rightarrow y$

$x^2 + y^2 \rightarrow t^2$

$(1 - t^2)/(1 + t^2) \rightarrow \mu$

! Interpolation des fonctions de phase en  $\mu$  et  $-\mu$ .

Interpoler( $\text{coeffR}, \mu$ )  $\rightarrow \text{MapFR}(i, j)$  ! Photons R diffusés

Interpoler( $\text{coeffG}, \mu$ )  $\rightarrow \text{MapFG}(i, j)$  ! Photons G diffusés

Interpoler( $\text{coeffB}, \mu$ )  $\rightarrow \text{MapFB}(i, j)$  ! Photons B diffusés

Interpoler( $\text{coeffR}, -\mu$ )  $\rightarrow \text{MapBR}(i, j)$  ! Photons R rétrodiffusés

Interpoler( $\text{coeffG}, -\mu$ )  $\rightarrow \text{MapBG}(i, j)$  ! Photons G rétrodiffusés

Interpoler( $\text{coeffB}, -\mu$ )  $\rightarrow \text{MapBB}(i, j)$  ! Photons B rétrodiffusés

Fin de la boucle en  $j$

Fin de la boucle en  $i$

**P6.** *Affichage des images couleurs.*

Afficher( $\text{MapFR}, \text{MapFG}, \text{MapFB}$ )

Afficher( $\text{MapBR}, \text{MapBG}, \text{MapBB}$ )

Arrêt

*Remarque 3.* Notez qu'en P5 n'a pas été nécessaire de faire appel au jacobien car la fonction de phase est donnée par unité d'angle solide et sa variable est  $\mu$ . On a supposé que la réponse de l'œil aux composantes R, G et B était proportionnelle au nombre de photons. C'est une hypothèse qui, d'un point de vue physiologique, mériterait d'être validée.

## 6 La diffusion de Mie

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

La diffusion d'une onde électromagnétique par une sphère diélectrique homogène plongée au sein d'un milieu lui-même homogène est un problème qui doit être traité en tant que solution des équations de Maxwell pour ce type de

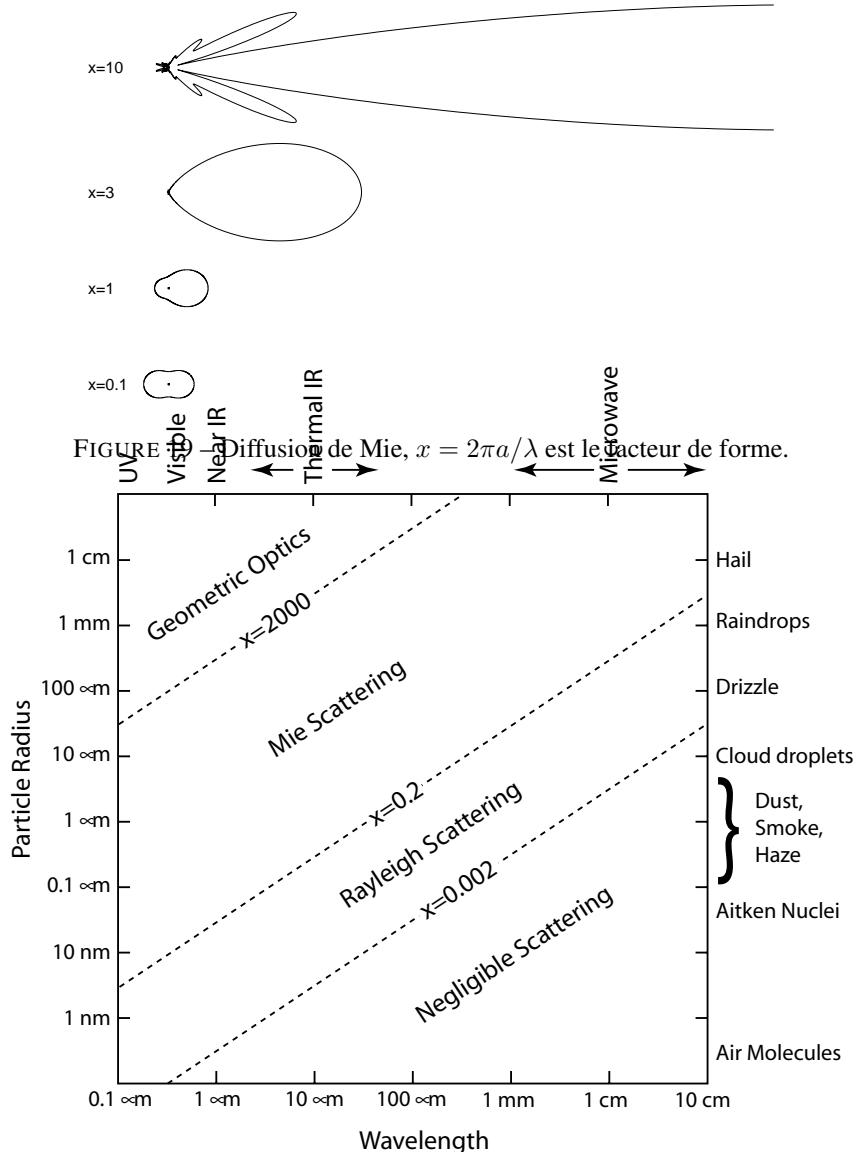


FIGURE 20 – Validité des approximations Rayleigh et Mie (d’après Wallace et Hobbs [28] p.123). Dans le domaine du visible, par exemple, la diffusion de la lumière par les molécules de l’air a lieu suivant le régime de Rayleigh.

conditions. Le calcul, effectué pour la première fois par Gustav Mie en 1908, peut être mené à bien de bout en bout, mais il est extrêmement laborieux (basé sur des développements en harmoniques sphériques). Le résultat ne dépend cependant 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 complexe de réfraction du milieu :

$$m = n + i\kappa$$

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

Lorsque 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 constater sur la figure 19.

Notez que pour un rayon nettement supérieur à la longueur d’onde, l’essentiel de l’énergie est diffusée vers l’avant. Le domaine de validité approximatif de ces théories est illustré sur la figure 20. On trouvera plus de précisions dans Krügel (2003) [18].

0	$\parallel$	$\perp$	$+45^\circ$	$-45^\circ$	$\text{circ}^+$	$\text{circ}^-$
$\begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} I \\ I \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} I \\ -I \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ I \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ -I \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ I \end{pmatrix}$

TABLE 2 – Vecteurs de Stokes correspondants à de la lumière non polarisée puis entièrement polarisée, respectivement linéairement suivant le plan  $\parallel$ , suivant le plan  $\perp$ , et enfin à  $+45^\circ$  et  $-45^\circ$  par rapport aux plans  $\parallel$  et  $\perp$ , enfin circulairement polarisée dans le sens direct puis rétrograde.

## 6.2 Éléments de la théorie de la diffusion de Mie

### 6.2.1 La polarisation des ondes électromagnétiques

Une onde électromagnétique est entièrement décrite par son champ électrique car on peut en déduire son champ magnétique à partir des équations de Maxwell. En règle générale, on considère le champ électrique  $E$  comme étant la somme d'un champ parallèle  $E_{\parallel}$  et d'un champ transverse  $E_{\perp}$ , par rapport à un plan de référence qui, dans le cas de la diffusion, est le plan de diffusion. Cette opération est licite car les équations de Maxwell sont linéaires.

Les champs  $E_{\parallel}$  et  $E_{\perp}$  sont des nombres complexes, ils contiennent l'information sur l'amplitude et la phase de l'onde. Les ondes électromagnétiques réelles sont des paquets d'ondes et non des ondes planes monochromatiques (ne serait-ce qu'à cause du principe d'incertitude d'Heisenberg). Si la bande passante  $\Delta\nu$  du paquet d'ondes est petite devant  $\nu$ , alors on montre que ce paquet peut être représenté, pour sa partie temporelle, par le nombre complexe  $E = A(t)e^{-i\phi(t)}$ , où  $A(t)$  et  $\phi(t)$  sont des fonctions lentement variables sur un temps  $1/\nu$ . En revanche, sur un temps  $1/\Delta\nu$ , qui est le temps de corrélation, il existe deux situations extrêmes : soit les ondes  $E_{\parallel}$  et  $E_{\perp}$  se déduisent l'une de l'autre, c'est-à-dire qu'elles sont corrélées et alors l'onde est dite *polarisée*; soit il n'y a aucune relation entre elles, elles sont décorrélées et l'onde est dite *non polarisée*. Toutes les situations intermédiaires existent entre corrélation et décorrélation, on dit alors que l'onde est *partiellement polarisé*.

Le vecteur champ électrique d'une onde polarisée décrit une ellipse dont les éléments caractérisent le type et le degré de polarisation de l'onde. Par rapport à un repère situé dans le plan de l'ellipse, on détermine entièrement la forme de celle-ci grâce à quatre nombres : son grand axe, son petit axe, l'inclinaison de son grand axe et finalement la phase du point qui parcourt l'ellipse. Ces quantités ne sont cependant pas directement observables, c'est pourquoi on préfère représenter la polarisation de l'onde à l'aide des *paramètres de Stokes*, également au nombre de quatre.

### 6.2.2 Les paramètres de Stokes

Les paramètres de Stokes sont des moyennes temporelles de quantités portant sur l'intensité du champ électrique. Le temps durant lequel s'effectuent ces moyennes est de l'ordre de grandeur du temps de corrélation  $1/\Delta\nu$ , l'opérateur  $\langle \rangle$  désigne cette moyenne. Plus précisément on a :

$$\begin{aligned} I &= \langle E_{\parallel} \bar{E}_{\parallel} + E_{\perp} \bar{E}_{\perp} \rangle, \\ Q &= \langle E_{\parallel} \bar{E}_{\parallel} - E_{\perp} \bar{E}_{\perp} \rangle, \\ U &= \langle E_{\parallel} \bar{E}_{\perp} + E_{\perp} \bar{E}_{\parallel} \rangle = 2\Re \langle E_{\parallel} \bar{E}_{\perp} \rangle, \\ V &= i \langle E_{\parallel} \bar{E}_{\perp} - E_{\perp} \bar{E}_{\parallel} \rangle = 2\Im \langle E_{\parallel} \bar{E}_{\perp} \rangle. \end{aligned} \tag{79}$$

Ces paramètres peuvent être mesurés expérimentalement à l'aide de polariseurs dont les axes sont convenablement placés par rapport aux directions  $\parallel$  et  $\perp$ . On a :

- I, l'intensité totale ;
- Q, la différence des intensités mesurées par deux polariseurs dont les axes correspondent aux directions  $\parallel$  et  $\perp$  ;
- U, même mesure que précédemment mais pour des polariseurs tournés de  $45^\circ$  ;
- V, même mesure que Q mais un déphasage de  $\pi$  est appliqué sur un des deux polariseurs.

Pour une onde complètement polarisée on a :  $I^2 = Q^2 + U^2 + V^2$ , pour une onde partiellement polarisée on a :  $I^2 > Q^2 + U^2 + V^2$  et pour une onde non polarisée on a :  $I > 0, Q = U = V = 0$ . La table 2 donne des vecteurs de Stokes correspondant à quelques cas caractéristiques.

### 6.2.3 Degré de polarisation

On mesure le degré de polarisation par la quantité  $P$  comprise entre 0 et 1

$$P = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2 + V^2}}{I}, \tag{80}$$

et les degrés de polarisations linéaire  $P_{\text{lin}}$  et circulaire  $P_{\text{circ}}$  par

$$P_{\text{lin}} = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2}}{I}, \quad P_{\text{circ}} = \frac{V}{I}. \quad (81)$$

#### 6.2.4 Angle de polarisation

L'angle de polarisation  $\chi$  est l'angle entre le plan de polarisation et le plan de référence qui définit les polarisations linéaires parallèles. On a

$$\chi = \frac{1}{2} \arctan \frac{U}{Q}, \text{ ou } \chi + \frac{\pi}{2}. \quad (82)$$

Cette formule donne deux valeurs qui diffèrent de  $\pi/2$ , on doit choisir l'angle  $\chi$  tel que

$$\operatorname{sgn}(\cos 2\chi) = \operatorname{sgn} Q. \quad (83)$$

En fortran 95 il est possible d'utiliser l'instruction : `chi = 0.5*atan2(U,Q)`.

#### 6.2.5 La matrice de diffusion dans le cas d'une sphère homogène (Mie)

Pour cette géométrie, la matrice qui permet de faire passer du champ incident  $E_i$  au champ  $E_s$  diffusé par la sphère est diagonale. On a pour le champ diffusé par la première interaction avec une particule (voir [12] §4 par exemple)

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & 0 \\ 0 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix}. \quad (84)$$

Nous ne tiendrons pas compte du terme de phase ni de la dépendance spatiale qui est nécessaire pour une équation portant sur le champ mais qui est superflue ici car incluse dans les simulations portant sur les particules représentant l'intensité de ce champ. Le vecteur d'onde  $k$  a été introduit de façon à ce que le terme  $kr$  soit sans dimension et que, par conséquent, les quantités  $S_1$  et  $S_2$  le soient également. On omettra la dépendance en  $k$  lorsque l'on aura affaire à un rayonnement monochromatique.

La matrice permettant de faire passer du vecteur de Stokes incident au vecteur de Stokes diffusé est appelée la matrice de Mueller, on la note  $M$ . On a, en adoptant les conventions exposées ci-dessus et en négligeant le facteur  $1/(k^2 r^2)$

$$\begin{pmatrix} I_s \\ Q_s \\ U_s \\ V_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} & S_{34} \\ 0 & 0 & -S_{34} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i \\ Q_i \\ U_i \\ V_i \end{pmatrix}. \quad (85)$$

Les quantités  $S_{11}$ ,  $S_{12}$ ,  $S_{33}$  et  $S_{34}$  qui interviennent dans la matrice de Mueller ne dépendent que de l'angle de diffusion  $\alpha$ . On a pour un diffuseur sphérique

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{1}{2}(|S_2|^2 + |S_1|^2), & S_{12} &= \frac{1}{2}(|S_2|^2 - |S_1|^2), \\ S_{33} &= \Re(S_2 \bar{S}_1), & S_{34} &= \Im(S_2 \bar{S}_1). \end{aligned}$$

En général  $S_{12}$  n'est pas nul et on remarque que même si l'onde incidente n'était pas polarisée, alors la diffusion de Mie polariseraient linéairement l'onde diffusée. Le degré de polarisation dépend de l'angle de diffusion  $\alpha$  (voir figure 21).

#### 6.2.6 Rotation du plan de référence des polarisations

On doit actualiser les composantes du vecteur de Stokes lorsque le plan de référence par rapport auquel sont définies les polarisations, doit subir une rotation d'angle  $\beta$ . Cet angle est compté positivement dans le sens direct défini par le vecteur  $\vec{p}$  de l'impulsion du photon avant diffusion. On a

$$\begin{aligned} E'_\parallel &= E_\parallel \cos \beta + E_\perp \sin \beta, \\ E'_\perp &= -E_\parallel \sin \beta + E_\perp \cos \beta. \end{aligned}$$

Soit sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} E'_\parallel \\ E'_\perp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_\parallel \\ E_\perp \end{pmatrix}.$$

En remarquant que

$$\begin{pmatrix} \langle E'_\parallel \bar{E}'_\parallel \rangle & \langle E'_\parallel \bar{E}'_\perp \rangle \\ \langle E'_\perp \bar{E}'_\parallel \rangle & \langle E'_\perp \bar{E}'_\perp \rangle \end{pmatrix} = \langle \begin{pmatrix} E'_\parallel \\ E'_\perp \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_\parallel & E_\perp \end{pmatrix} \rangle,$$

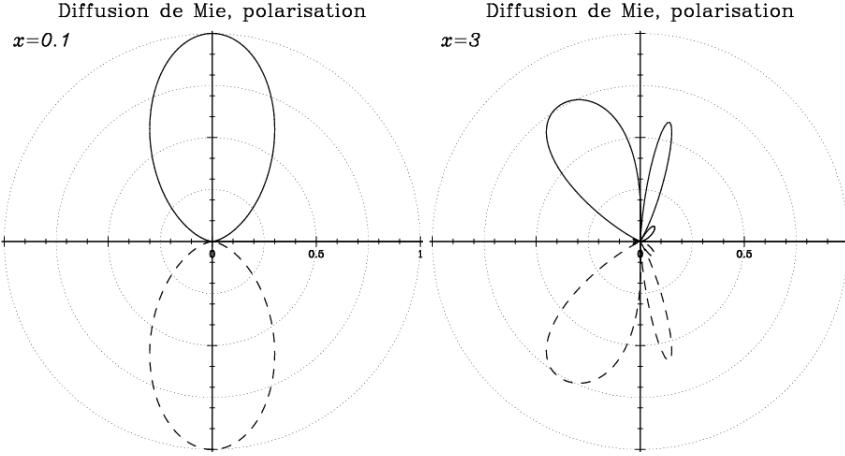


FIGURE 21 – Polarisation de l’onde diffusée, lorsque l’onde incidente ne l’est pas. La figure de gauche correspond au cas Rayleigh, on y remarque que l’onde diffusée à  $\alpha = 90^\circ$  est entièrement polarisée.

il vient

$$\begin{pmatrix} \langle E'_\parallel \bar{E}'_\parallel \rangle & \langle E'_\parallel \bar{E}'_\perp \rangle \\ \langle E'_\perp \bar{E}'_\parallel \rangle & \langle E'_\perp \bar{E}'_\perp \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle E_\parallel \bar{E}_\parallel \rangle & \langle E_\parallel \bar{E}_\perp \rangle \\ \langle E_\perp \bar{E}_\parallel \rangle & \langle E_\perp \bar{E}_\perp \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}.$$

Un calcul un peu long mais ne présentant aucune difficulté conduit à

$$\begin{aligned} I' &= I, \\ Q' &= Q \cos(2\beta) + U \sin(2\beta), \\ U' &= U \cos(2\beta) - Q \sin(2\beta), \\ V' &= V, \end{aligned}$$

qu’il convient d’écrire sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} I' \\ Q' \\ U' \\ V' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\beta) & \sin(2\beta) & 0 \\ 0 & -\sin(2\beta) & \cos(2\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}. \quad (86)$$

On note  $R(\beta)$  la matrice  $4 \times 4$  qui permet de faire passer d’un plan de polarisation à un autre suite à une rotation d’angle  $\beta$ . Dans les mêmes conditions, on passe d’une matrice de Mueller  $M$  à une autre  $M'$  par  $M' = R(\beta)MR(-\beta)$ . L’action de la matrice  $R(\beta)$  sur le vecteur de Stokes laisse invariantes les quantités  $I$ ,  $Q^2 + U^2$  et  $V$ , c’est-à-dire qu’elle ne modifie pas l’intensité du rayonnement ni les polarisations linéaire et circulaire.

Le vecteur de Stokes d’un champ électrique polarisé linéairement suivant un angle  $\beta$  par rapport à un polariseur est solution de l’équation

$$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = R(\beta) \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ 0 \end{pmatrix} \text{ soit : } \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ 0 \end{pmatrix} = R(-\beta) \begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = I \begin{pmatrix} 1 \\ \cos(2\beta) \\ \sin(2\beta) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (87)$$

On retrouve ainsi les valeurs des colonnes 3 à 6 de la table 2 page 39, pour  $\beta = 0$ ,  $\frac{\pi}{2}$ ,  $\frac{\pi}{4}$  et  $-\frac{\pi}{4}$ .

### 6.2.7 La fonction de phase de la diffusion de Mie

Pour une onde incidente dont les paramètres de Stokes sont  $(I_i, Q_i, U_i, V_i)$ , la fonction de phase  $P$  est donnée, à un facteur de normalisation près, par  $I_s$  qui, d’après l’équation (85) est égale à  $S_{11}(\alpha)I_i + S_{12}(\alpha)Q_i$ . Par rapport à un plan de référence situé à l’azimut  $\beta$  on a

$$P(\alpha, \beta) \propto S_{11}(\alpha)I_i + S_{12}(\alpha)(Q_i \cos(2\beta) + U_i \sin(2\beta)). \quad (88)$$

Cette fonction possède la période  $\pi$  en  $\beta$ , elle est axisymétrique autour de l’axe du vecteur d’onde du photon incident. La constante de normalisation est  $(\pi x^2 Q_{\text{sca}} I_i)^{-1}$ , où  $Q_{\text{sca}}$  est le facteur d’efficacité de la diffusion dont la valeur peut être calculée à l’aide du programme présenté au chapitre 6.3.

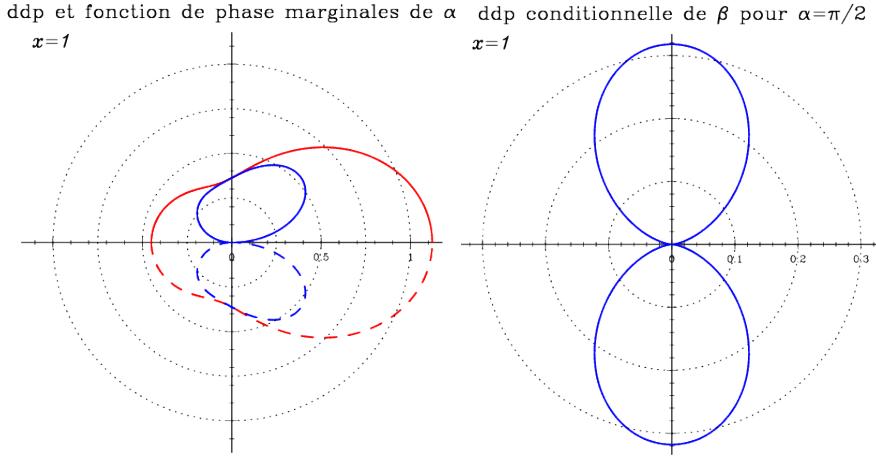


FIGURE 22 – Représentation polaire des densités de probabilités marginales de  $\alpha$  et conditionnelle de  $\beta$  sachant  $\alpha$ , en bleu. On a aussi représenté en rouge la fonction de phase marginale de  $\alpha$ . La lumière incidente est 100% linéairement polarisée suivant le plan  $\parallel$ .

La fonction  $P(\alpha, \beta) \sin \alpha$  est la densité de probabilité du couple  $(\alpha, \beta)$ , elle est le produit de la densité marginale  $f_\alpha$  de  $\alpha$  par la densité conditionnelle  $f_\beta$  de  $\beta$  sachant  $\alpha$ . On a pour la densité marginale de l'angle diffusion  $\alpha$

$$f_\alpha(\alpha) = \int_0^{2\pi} P(\alpha, \beta) \sin \alpha d\beta = \frac{2}{x^2 Q_{\text{sca}}} S_{11}(\alpha) \sin \alpha. \quad (89)$$

Ce résultat ne dépend pas de l'état de polarisation de l'onde incidente. On obtient pour la densité de probabilité conditionnelle de l'azimut  $\beta$ , sachant  $\alpha$

$$f_\beta(\beta|\alpha) = \frac{P(\alpha, \beta)}{\int_0^{2\pi} P(\alpha, \beta) \sin(\alpha) d\beta} = \frac{1}{2\pi} \left( 1 + \frac{S_{12}(\alpha)}{S_{11}(\alpha) I_i} (Q_i \cos(2\beta) + U_i \sin(2\beta)) \right). \quad (90)$$

Au terme de cette introduction à la diffusion de Mie, il ressort que les seules données qu'il faut connaître sont, d'une part, les paramètres de Stokes de l'onde incidente initiale et, d'autre part, le facteur de forme  $x$  et les valeurs de  $S_1$ ,  $S_2$  et  $Q_{\text{sca}}$  nécessaires pour évaluer la fonction de phase. Le programme BHMIE issu de l'ouvrage de Bohren et Huffman [1] permet d'obtenir ces quantités.

### 6.3 Le programme BHMIE de C.F. Bohren et D. Huffman

Le programme BHMIE mis à disposition librement sur la toile calcule diverses données relatives à la diffusion de Mie. Il a été traduit en fortran 95 et inclus dans le module mie.f90. On l'utilise de la façon suivante :

```

Integer, Parameter :: wp = Selected_real_kind(15)
Real(Kind=wp) :: x
Complex(wp) :: refrel
Integer, Parameter :: nang=91 ! Par exemple
Complex(Kind=wp), Dimension(2*nang-1) :: S1, S2
Real(Kind=wp) :: Qext, Qsca, Qback, Gsca

Call BHMIE(x, refrel, nang, S1, S2, Qext, Qsca, Qback, Gsca)

```

#### Paramètres d'entrée

**x** Est le facteur de forme

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

$a$  est le rayon de la sphère diffusante et  $\lambda$  est la longueur d'onde de la lumière incidente dans le milieu où est plongée la sphère. Si on prend l'exemple de gouttelettes d'eau dans un nuage terrestre,  $a$  va de  $2\mu\text{m}$  à  $250\mu\text{m}$  environ. Si on cherche à construire une image en couleur à partir du système RGB, on pourra prendre comme plus haut :

$$\lambda_R = 0.710\mu\text{m} \quad \lambda_G = 0.510\mu\text{m} \quad \lambda_B = 0.440\mu\text{m}.$$

**refrel** Est l'indice complexe  $m$  du diélectrique qui compose la sphère diffusante, divisé par l'indice réel du milieu dans lequel elle est plongée. Pour les phénomènes atmosphériques, il s'agit de l'air. D'après le serveur RefractiveIndex.info, on pourra prendre pour l'eau à 19°C

$$n_R = 1.3296, \quad n_G = 1.33535, \quad n_B = 1.34096, \\ \kappa_R = 5.50 \cdot 10^{-8}, \quad \kappa_G = 2.00 \cdot 10^{-9}, \quad \kappa_B = 1.00 \cdot 10^{-9}.$$

Ces valeurs sont approximatives, car mal connues,  $\kappa_R$  est incertain. Pour l'indice de l'air on prendra

$$n_{\text{air},R} = 1.00027537, \quad n_{\text{air},G} = 1.00027814, \quad n_{\text{air},B} = 1.00028124.$$

Consulter également l'article de P. E. Ciddor [2].

**nang** Le nombre d'angles de diffusion compris entre 0 et  $\pi/2$ . Ce paramètre doit être supérieur ou égal à 2; si  $nang = 2$ , le programme calculera les paramètres de diffusion pour les angles  $\alpha = 0, \pi/2$  et  $\pi$ . En effet, le programme considère les angles entre 0 et  $\pi$ , il y aura, par conséquent,  $2nang - 1$  angles calculés allant de  $\alpha = 0$  à  $\pi$  par pas de  $\Delta\alpha = \pi/(2(nang - 1))$ .

Dans l'implémentation actuelle du code,  $nang$  ne doit pas être supérieur à 1000.

## Paramètres de sortie

**S1** Valeur complexe  $S_1$  de la matrice de diffusion. Elle relie l'onde incidente et l'onde diffusée pour leurs composantes perpendiculaires au plan de diffusion.

**S2** Valeur complexe  $S_2$  de la matrice de diffusion. Elle relie l'onde incidente et l'onde diffusée pour leurs composantes parallèles au plan de diffusion.

**Qext** Facteur d'efficacité<sup>6</sup> pour l'extinction

$$Q_{\text{ext}} = \frac{C_{\text{ext}}}{\pi a^2},$$

où  $C_{\text{ext}}$  est la section efficace d'extinction (c'est-à-dire en tenant compte de l'absorption et de la diffusion) .

**Qsca** Facteur d'efficacité pour la diffusion

$$Q_{\text{sca}} = \frac{C_{\text{sca}}}{\pi a^2},$$

où  $C_{\text{sca}}$  est la section efficace de diffusion.

**Qback** Efficacité de la rétrodiffusion

$$Q_{\text{back}} = \frac{1}{\pi a^2} \frac{dC_{\text{sca}}}{d\Omega}.$$

**Gsca** Valeur moyenne de  $\cos \alpha$ , le cosinus de l'angle de diffusion. Cette valeur est le coefficient d'asymétrie  $g$  entrant dans l'expression de l'approximation de la fonction de phase de la diffusion de Mie par les fonctions de Henyey-Greenstein.

$$g = \int_0^\pi \cos \alpha P_\alpha(\alpha) \sin \alpha d\alpha.$$

De préférence à  $S_1$  et  $S_2$ , on utilise le vecteur de Stokes et la matrice de Mueller. On rappelle ci-dessous les formules qui permettent de calculer les coefficients de cette matrice. On a :

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{1}{2}(|S_2|^2 + |S_1|^2), \\ S_{12} &= \frac{1}{2}(|S_2|^2 - |S_1|^2), \\ S_{33} &= \Re(S_2 \bar{S}_1), \\ S_{32} &= \Im(S_2 \bar{S}_1). \end{aligned} \tag{91}$$

Le symbole  $\Re$  désigne la partie réelle et  $\Im$  la partie imaginaire,  $\bar{z}$  désigne le complexe conjugué de  $z$  et  $|z|$  son module.

---

6. Les facteurs d'efficacité sont des nombres sans dimension, ils représentent des sections efficaces par unité de surface frontale de la particule diffusante.

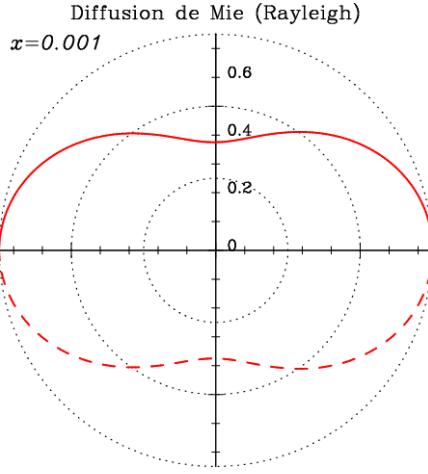


FIGURE 23 – Fonction de phase marginale  $P_\alpha$  calculée à l'aide de BHMIE pour  $x = 0.001$  et de la lumière incidente non-polarisée. Cette fonction est très proche de celle de Rayleigh. La plus grande différence en valeur absolue entre la courbe calculée et la courbe théorique n'est que de  $2.9 \cdot 10^{-5}$ .

## 6.4 Tester BHMIE

Les programmes trouvés sur la toile n'indiquent pas toujours les unités qu'ils utilisent ni jusqu'à quelle précision les calculs ont été menés. C'est pourquoi il est impératif de les tester en comparant leurs résultats avec ceux prévus par la théorie dans quelques cas limites simples.

Le premier test à faire est de vérifier que lorsque  $x \rightarrow \infty$  alors  $Q_{\text{ext}} \rightarrow 2$ . Autrement dit, il s'agit de s'assurer qu'une particule de grande taille relative, retire du faisceau incident *deux fois* l'énergie qui atteint sa surface projetée  $\pi a^2$ . Une partie par contact direct à sa surface et une partie par diffraction.

On s'attachera ensuite à comparer les résultats obtenus à l'aide de BHMIE avec ceux prédis par la théorie de Rayleigh. À cette fin le paramètre de forme doit être assez petit, par exemple  $x = 0.001$ . Pour une onde incidente non polarisé :  $I_i = 1, Q_i = U_i = V_i = 0$ , on obtient l'intensité de l'onde diffusée  $I_s = \frac{1}{2}(|S_2|^2 + |S_1|^2)$ . La fonction de phase est donnée par l'équation (88) ; on trouve  $P(\alpha, \beta) = I_s$  qui est fonction de  $\alpha$  mais pas de  $\beta$ .

### 6.4.1 La fonction de phase

Nous allons tout d'abord comparer la fonction de phase calculée  $P_\alpha$  avec celle prévue par la théorie. Cette fonction est une densité de probabilité marginale obtenue par intégration sur l'azimut de diffusion  $\beta$ . On a dans le cas Rayleigh (voir équation (7) page 4)

$$P_\alpha = 2\pi P = \frac{3}{8}(1 + \cos^2 \alpha).$$

Afin de comparer  $P_\alpha$  avec les résultats obtenus par BHMIE, il est nécessaire de normaliser l'intensité  $I_s$  donnée par ce programme. La constante de normalisation  $C$  pour la phase marginale est  $C = 2/(x^2 Q_{\text{sca}})$ . Il vient  $P_{\text{BHMIE}} = 2\pi C I_s$  et  $P_{\alpha \text{BHMIE}} = C I_s(\alpha)$ . On comparera directement la fonction  $C I_s(\alpha)$  avec son équivalent théorique  $P_\alpha$  donné ci-dessus. On trouvera une illustration graphique du résultat de ce test sur la figure 23 de la présente page.

### 6.4.2 La dépendance en fonction de $a$ et $\lambda$ .

Dans la limite Rayleigh de la diffusion de Mie (diffusion sur des sphères diélectriques), les coefficients  $S_1$  et  $S_2$  de la matrice de diffusion sont donnés par les expressions

$$\begin{aligned} S_1 &= -x^3 \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}, \quad \text{pour la composante } \perp, \\ S_2 &= -x^3 \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \cos \theta \quad \text{pour la composante } \parallel, \end{aligned}$$

où  $m$  est l'indice de refraction complexe relatif (refrel). On calcule ensuite  $S_{11} = \frac{1}{2}(|S_2|^2 + |S_1|^2)$ , et l'intensité du rayonnement diffusé en fonction du rayonnement incident en réintroduisant le facteur  $kr = \lambda/2\pi r$  qui avait été omis dans le calcul du champ électrique diffusé (voir équation (84)). On obtient à la distance  $r$

$$I_s(r) = \frac{1}{2} \frac{I_i}{r^2} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 a^6 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 (1 + \cos^2 \theta).$$

La diffusion Rayleigh diminue fortement lorsque la longueur d'onde augmente, la dépendance est en  $\lambda^{-4}$  en revanche, elle augmente considérablement avec  $a$  la taille des diffuseurs. Ils doivent cependant rester suffisamment petits pour que l'approximation Rayleigh reste valable, soit environ  $x \leq 0.1$ .

Le flux diffusé  $F_s$  à la distance  $r$  de la particule diffusante est donné par

$$F_s = \int I_s r^2 d\Omega .$$

On obtient

$$\begin{aligned} F_s &= \frac{1}{2} I_i \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 a^6 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 \int (1 + \cos^2 \theta) d\Omega , \\ &= \frac{1}{2} I_i \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 a^6 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 2\pi \frac{8}{3} , \\ &= I_i \frac{8}{3} \pi \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 a^6 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 . \end{aligned}$$

La section efficace de diffusion  $C_{\text{sca}}$  est une surface fictive, orientée normalement par rapport au flux incident, située au niveau de la particule diffusante, et qui intercepterait la fraction du flux incident diffusé par la particule. On a  $F_d = C_{\text{sca}} I_i$ , on obtient ensuite le facteur d'efficacité  $Q_{\text{sca}}$  donné par BHMIE en divisant  $C_{\text{sca}}$  par  $\pi a^2$  la surface projetée réelle de la particule. Il vient

$$C_{\text{sca}} = \frac{8}{3} \pi \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 a^6 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 , \quad Q_{\text{sca}} = \frac{8}{3} x^4 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 . \quad (92)$$

D'une façon analogue, on obtiendrait, toujours dans la limite Rayleigh de la diffusion de Mie

$$Q_{\text{ext}} = -4x \operatorname{Im} \left( \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) . \quad (93)$$

Ces formules permettent de tester le programme BHMIE. À la suite de ce test, on pourra donner la dépendance en lambda de la diffusion en fonction du paramètre de taille  $x$ , dans des cas autres que celui de Rayleigh.

#### 6.4.3 L'arc-en-ciel

L'arc-en-ciel est un des plus beaux phénomènes naturels qu'il nous soit donné d'admirer. Il se manifeste lorsque la lumière du soleil est rétrodiffusée par une fine couche de gouttelettes d'eau de diamètre supérieur ou égal à environ  $250\mu\text{m}$ . On distingue un arc primaire situé à environ  $42^\circ$  du point antisolaire, sa largeur est d'environ  $1.5^\circ$ , et un arc secondaire plus large, dont le bord est situé à environ  $50.3^\circ$  du point antisolaire. Entre ces deux arcs, on observe un déficit de lumière, c'est ce que l'on nomme la bande d'Alexandre. Il est possible de donner une interprétation de ces arcs à partir des principes de l'optique géométrique. Ils sont le résultat pour le premier d'une seule, et pour le second de deux réflexions totales à l'intérieur de la gouttelette d'eau supposée sphérique. Cependant, la théorie de Mie est nécessaire afin de rendre compte correctement de phénomènes plus complexes tels que les arcs surnuméraires par exemple. Le programme BHMIE est à même de représenter la structure d'un arc-en-ciel et l'accord des résultats qu'il produit avec les données observationnelles constitue un autre test de son implementation (voir la figure 24 et l'image 45).

### 6.5 L'approximation de Henyey-Greenstein

On utilise parfois en astrophysique, mais aussi en imagerie médicale par exemple, les fonctions de Henyey-Greenstein dans le but de représenter de façon approximative la fonction de phase de la diffusion de Mie. Ces fonctions rendent assez bien compte de la forme du lobe principal de la fonction de phase, mais elles ignorent les lobes secondaires. Cette limitation les rendent imprropres à décrire le phénomène de l'arc-en-ciel par exemple.

#### 6.5.1 Forme analytique

Les fonctions de Henyey-Greenstein ne dépendent que d'un seul paramètre  $g$  qui est l'espérance du cosinus de l'angle de diffusion :  $g = E\{\cos \alpha\}$ . L'expression analytique des ces fonctions est

$$P_{\text{HG}}(\alpha) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 - 2g \cos \alpha + g^2)^{\frac{3}{2}}} . \quad (94)$$

Le paramètre  $g$  est compris entre  $-1$  et  $1$ . Comme il convient, la quantité  $P_{\text{HG}}(\alpha) d\Omega$  est la probabilité de trouver une diffusion dans l'angle solide  $d\Omega$ . Si  $g = 0$ , la fonction de phase est une sphère et la répartition de l'impulsion des photons après diffusion est isotrope. Si  $g = 1$ , la fonction de phase est une delta de Dirac pointée vers la direction avant ( $\alpha = 0$ ), l'impulsion n'est alors pas redistribuée. De même si  $g = -1$  où la distribution delta pointe vers l'arrière.

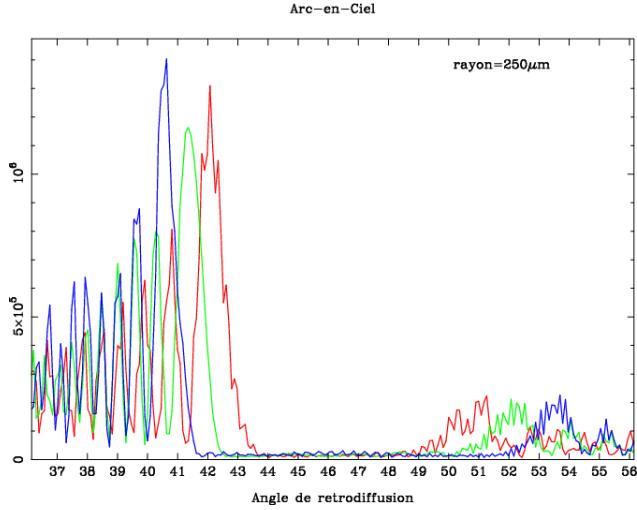


FIGURE 24 – Arc-en-ciel tel qu'il est calculé pour une seule diffusion à l'aide du programme BHMIE et pour les trois couleurs du système RGB. Le rayon des gouttelettes d'eau est de  $250\mu\text{m}$ . On retrouve bien l'arc primaire entre  $40.5^\circ$  et  $42^\circ$  environ (la limite est donnée pour la couleur orange), et l'arc secondaire au-delà de  $50.3^\circ$ . La bande d'Alexandre comprise entre  $43^\circ$  et  $50^\circ$  est également bien représentée. La théorie de Mie rend compte des arcs surnuméraires en particulier aux angles de rétrodiffusion  $\gamma = \pi - \theta$  inférieurs à  $40^\circ$ .

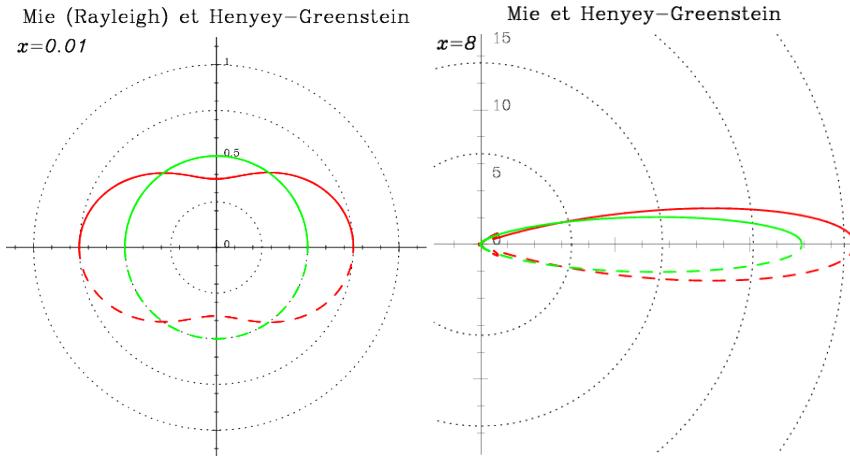


FIGURE 25 – Comparaison entre les fonctions de phase marginales (intégrées sur l'azimut  $\beta$ ) obtenues par la théorie de Mie, en rouge, et sa représentation par une fonction de Henyey-Greenstein de même  $\cos \alpha$  moyen, en vert.

Lorsque l'on procède au changement de variable  $\mu = \cos \alpha$  suivant la formule (9) page 4, on trouve

$$P_\mu(\mu) = \frac{1}{2} \frac{1 - g^2}{(1 - 2g\mu + g^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (95)$$

où  $P_\mu(\mu)$  est la densité de probabilité de la variable  $\mu$ . Bien que possédant le même  $\cos \alpha$  moyen, les fonctions de Henyey-Greenstein peuvent considérablement s'écartez de leur équivalent exact calculé suivant la théorie de Mie. La figure 25 présente deux exemples de cette comparaison.

La fonction  $P_\mu$  peut être développée sur la base des polynômes de Legendre  $P_n$  suivant la formule

$$P_\mu(\mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) g^n P_n(\mu).$$

Les trois premiers polynômes sont :  $P_0(\mu) = 1$ ,  $P_1(\mu) = \mu$  et  $P_2(\mu) = \frac{1}{2}(3\mu^2 - 1)$ .

On trouve chez certains auteurs une définition des fonctions de Henyey-Greenstein qui n'inclut pas le facteur  $1/4\pi$  de l'équation (94) ou celui de  $1/2$  de l'équation (95). Nous avons adopté une convention qui donne à ces fonctions le caractère d'une densité de probabilité. Elles sont donc normées sur la sphère unité pour la première et sur l'intervalle  $[-1, +1]$  pour la seconde.

### 6.5.2 Simulation de la diffusion avec les fonctions HG

La fonction de répartition de  $P_\mu$  est facilement calculable, on trouve

$$\int_{-1}^{\mu} \frac{1}{2} \frac{1-g^2}{(1-2gm+g^2)^{\frac{3}{2}}} dm = \frac{1-g^2}{2g} \left[ \frac{1}{(1-2g\mu+g^2)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{1+g} \right]. \quad (96)$$

Il faut procéder ensuite à l'inversion de cette équation en vue de la simulation de  $\mu$ . On trouve

$$\mu = \frac{1}{2g} \left[ 1 + g^2 - \left( \frac{1-g^2}{1+2gU-g} \right)^2 \right],$$

où  $U$  est une variable uniforme entre 0 et 1. L'algorithme **HG** qui suit présente une amélioration par rapport à cette formule qui sans elle prendrait la forme 0/0 lorsque  $g$  tend vers 0.

**Algorithme HG** *Simulation de l'angle de diffusion  $\alpha$  suivant les fonctions de phase de Henyey-Greenstein pour le paramètre  $g = E\{\cos \alpha\}$ ,  $0 \leq g \leq 1$ .*

**HG1.**  $\frac{1}{2}g(3-g^2) \rightarrow c_0$  ;  $1+g^2 \rightarrow c_1$  ;  $\frac{1}{2}g(1+g^2) \rightarrow c_2$

**HG2.** LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$  ;  $2U-1 \rightarrow Z$

$$\frac{c_0 + Z(c_1 + c_2 Z)}{(1+gZ)^2} \rightarrow \mu; \arccos(\mu) \rightarrow \alpha$$

On remarquera que dans le cas  $g = 0$  on trouve  $\mu = Z$  ce qui est conforme à la distribution uniforme pour laquelle  $E\{\cos \alpha\} = 0$ . Dans l'autre cas limite  $g = 1$ , on trouve  $\mu = 1$ , ce qui est conforme à une distribution où tous les angles  $\alpha$  sont nuls.

Il est facile de modifier l'algorithme **R**, simulant la diffusion de Rayleigh, de façon à ce que la fonction de phase corresponde aux fonctions de Henyey-Greenstein. Les étapes **R0** à **R12** restent inchangées sauf l'étape **R4** qui doit être remplacée par **H4** ci-dessous. Il est auparavant nécessaire d'ajouter entre **R0** et **R1** l'étape d'initialisation **H0.5**. Dans l'exemple suivant on a tenu compte de l'absorption éventuelle des particules en fonction de l'albedo des diffuseurs.

**Algorithme H** *Diffusion de Mie simulée avec l'approximation d'Henyey-Greenstein.*

**H0.5** *Initialisation des paramètres des fonctions HG.*

Saisir( $g$ ), l'espérance de  $\cos \alpha$

$\frac{1}{2}g(3-g^2) \rightarrow c_0$  ;  $1+g^2 \rightarrow c_1$  ;  $\frac{1}{2}g(1+g^2) \rightarrow c_2$

Saisir(albedo), l'albedo d'une diffusion

**H4.** *Simulation des fonctions HG.*

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

Si  $U >$  albedo, alors lancer un nouveau photon en **H3** (= **R3**)

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

$2U-1 \rightarrow Z$

$$\frac{c_0 + Z(c_1 + c_2 Z)}{(1+gZ)^2} \rightarrow m$$

Suivant cette mise en œuvre, le compteur  $N$  enregistre le nombre de photons qui parviennent à s'échapper de la couche, et la simulation s'arrête lorsque  $N$  atteint une limite fixée à l'avance. Cette disposition risque d'allonger considérablement le temps calcul si l'albedo des diffuseurs est très proche de zéro.

### 6.5.3 Les relations de similitude

D'après les travaux de van de Hulst et Grossman et van de Hulst (voir les références [15], [13] et [14]) il est possible de calculer approximativement la réflectance d'une atmosphère plan-parallèle où la diffusion est anisotrope ( $g \neq 0$ ), à partir des résultats obtenus pour la diffusion isotrope. Il suffit pour cela de modifier l'épaisseur optique  $\tau$  de la couche diffusante et l'albedo  $a$  des particules, afin d'obtenir une épaisseur optique  $\tau'$  et un albedo  $a'$  correspondant au cas isotrope. Ce sont ces relations entre  $\tau$  et  $\tau'$  d'une part et  $a$  et  $a'$  de l'autre, que l'on nomme « relations de similitudes ». Lorsque la fonction de phase est une fonction de Henyey-Greenstein, les auteurs ont montré (voir également les équations (13) et (14) de l'article de Hansen [10]) que ces relations prenaient la forme simple

$$\tau' = \tau(1-g), \quad 1-a' = \frac{1-a}{1-g}, \quad \text{où } g = E\{\cos \alpha\}. \quad (97)$$

Nous allons vérifier la validité de cette formule dans le cas du calcul de la réflectance  $R$  d'une couche diffusante semi infinie ( $e^{-\tau_{\max}} = 0$ ). La quantité  $R$  est définie comme le rapport de l'énergie rétrodiffusée à l'énergie injectée dans la couche. Pour ce cas particulier de couche semi infinie, la similitude ne porte que sur  $a$  et  $a'$ . La figure 27 résume les

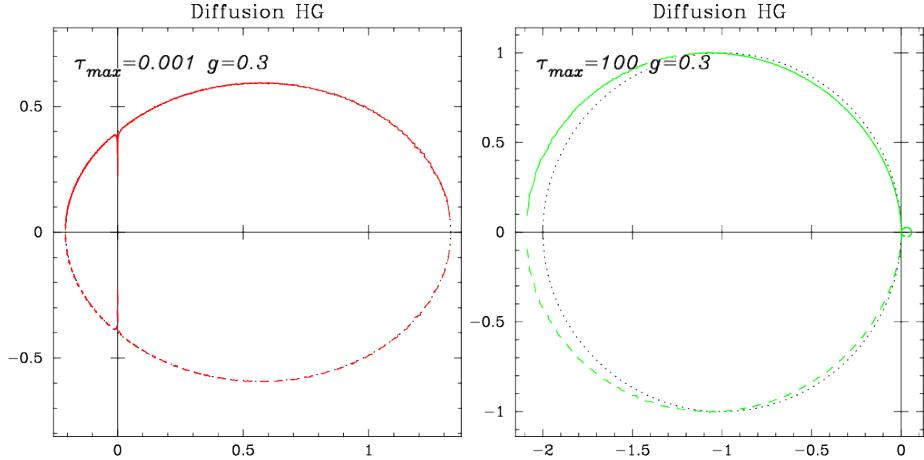


FIGURE 26 – Fonctions de phase de la diffusion de Mie suivant l’approximation de Henyey-Greenstein. Le paramètre  $g = E\{\cos \alpha\}$  est égal à 0.3. L’albedo de la diffusion a été pris égal à 1. On a simulé le cas optiquement mince, à gauche, et le cas optiquement épais, à droite. Il a été lancé  $10^8$  particules. Pour plus de lisibilité, on a symétrisé les fonctions de phase autour de l’axe de pénétration des particules.

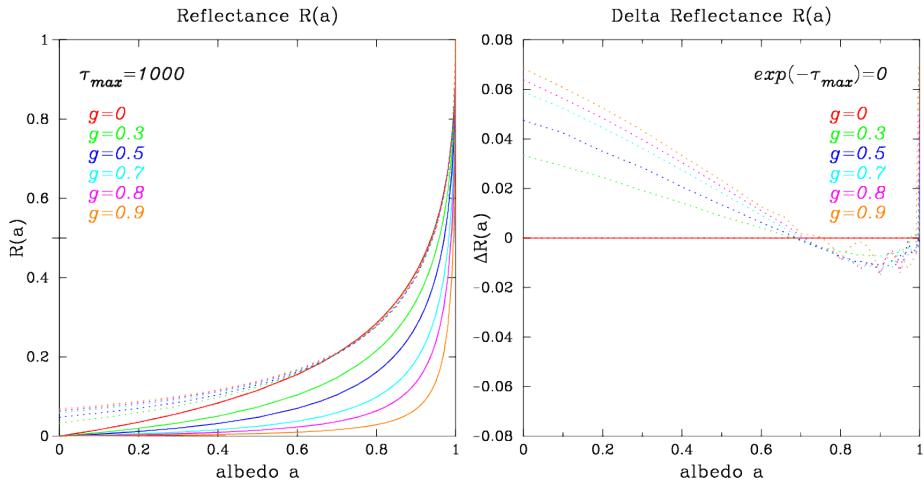


FIGURE 27 – À gauche, réflectance d’une couche semi-infinie dans le modèle plan parallèle anisopropre en fonction de l’albedo des particules. Les fonctions de phase sont celles d’Henyey-Greenstein. Les courbes en pointillés correspondent aux cas anisotropes ramenés au cas isotrope à l’aide des relations de similitude. À droite, différence entre la réflectance isotrope et les courbes issues des relations de similitude.

résultats, on y trouve à gauche la réflectance de la couche en fonction de l’albedo des particules. La diffusion suit la fonction de phase de Henyey-Greenstein pour des facteurs  $g$  allant de  $g = 0$  (cas isotrope, en rouge) à  $g = 0.9$  (en orange sur le graphique). On y a également reporté, en pointillés, les courbes de réflectances ramenées au cas isotrope à l’aide des relations de similitudes. La figure de droite représente la différence entre ces courbes et le cas isotrope. On y constate que pour des allbedos compris entre 0.5 et 1, l’approximation n’implique pas de différence supérieure à 0.01, ce qui peut être acceptable.

#### 6.5.4 Les fonctions HG généralisées

Il existe de nombreuses autres approximations des fonctions de phase en dehors de celles d’Henyey-Greenstein (voir, par exemple, l’article [26] qui en présente plusieurs). En général, il n’est pas possible de les simuler facilement, à l’exception de la suivante

$$P_\mu(\mu; \epsilon) = K(1 + g^2 - 2g\mu)^{-(1+\epsilon)}, \text{ où } K = \frac{2\epsilon g(1 - g^2)^{2\epsilon}}{(1 + g)^{2\epsilon} - (1 - g)^{2\epsilon}}. \quad (98)$$

Ces fonctions admettent celles d’Henyey-Greenstein comme cas particulier pour le paramètre  $\epsilon = \frac{1}{2}$ . La moyenne de  $\mu$  n’est pas  $g$  mais est donnée par l’expression

$$E\{\mu\} = \frac{2g\epsilon L - (1 + g^2)}{2g(\epsilon - 1)}, \text{ avec } L = \frac{(1 + g)^{2\epsilon} + (1 - g)^{2\epsilon}}{(1 + g)^{2\epsilon} - (1 - g)^{2\epsilon}}. \quad (99)$$

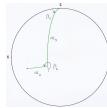


FIGURE 28 – Marche au hasard du vecteur d’onde sur la sphère unité définie par les angles de diffusion  $\alpha$  et par les azimuts de diffusion  $\beta$ .

On simule une variable  $M$  de densité  $P_\mu$  à l’aide de la variable aléatoire  $U$  uniforme entre 0 et 1. On a

$$M = \frac{1}{2g} \left[ 1 + g^2 - \left( kU + (1+g)^{-2\epsilon} \right)^{-\frac{1}{\epsilon}} \right], \quad k = \frac{(1+g)^{2\epsilon} - (1-g)^{2\epsilon}}{(1-g^2)^{2\epsilon}}. \quad (100)$$

## 6.6 Simuler la diffusion de Mie

Afin de simuler le processus de diffusion, il est nécessaire de suivre en parallèle deux « marches au hasard ». La première concerne la pénétration du photon dans la couche diffusante et la seconde rend compte de l’évolution de son vecteur d’onde sur la sphère unité sous l’effet des diffusions. La marche au hasard sur la sphère unité est déterminée par des pas suivant des arcs de grands cercles égaux aux angles  $\alpha$ , et par des changements de directions d’angles  $\beta$  entre deux pas successifs (voir figure 28). On suit l’évolution du vecteur d’onde du photon jusqu’au moment où ce dernier sort de la couche diffusante ou y est absorbé.

### 6.6.1 Les paramètres du problème

La couche diffusante est de modèle plan-parallèle, elle est caractérisée par son épaisseur optique  $\tau_{\max} = \int_0^D z/\ell(z)dz$  où  $D$  est l’épaisseur de la couche et  $\ell(z)$  le libre parcours moyen des particules. Les paramètres de la simulation sont  $N_{\text{part}}$ ,  $N_{\text{phase}}$  et  $\text{seed}$ .

### 6.6.2 Donner les conditions initiales

Le vecteur de Stokes initial  $S_i$  sera, par exemple, pris égal à  $S_i = (1, 0, 0, 0)$  correspondant à de la lumière non polarisée. Le vecteur d’onde initial  $\vec{p}$  et l’axe de rotation initial  $\vec{u}$  seront pris égaux à

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

La première égalité signifie que la lumière incidente arrive perpendiculairement à la couche diffusante, et la seconde que l’angle  $\alpha_1$  de la première diffusion est défini dans le plan méridien de référence avant qu’il subisse une rotation d’angle  $\beta_1$  (voir § 6.6.11).

En débutant la simulation, on ne considérera que les photons qui interagissent effectivement avec les diffuseurs de la couche.

### 6.6.3 Valider la diffusion du photon

Les données du programme BHMIE permettent de calculer la probabilité pour que le photon soit diffusé au moment où il rencontre un nouveau diffuseur. Cette probabilité est l’albedo de la sphère diffusante. On a

$$\text{albedo} = \frac{Q_{\text{sca}}}{Q_{\text{ext}}}.$$

Si un nombre aléatoire  $U$  uniforme entre 0 et 1 est plus petit qu’« albedo » alors le photon est diffusé, sinon il est absorbé et on doit relancer un photon à partir de l’étape décrite au chapitre 6.6.2.

### 6.6.4 Trouver la nouvelle direction $\alpha, \beta$ d’après la fonction de phase

Le vecteur de Stokes  $S_i$  permet de calculer la fonction de phase  $P(\alpha, \beta)$  d’après la formule (88) page 41. Cette fonction dépend des angles  $\alpha$  et  $\beta$  et, en général, si on tient compte de la polarisation, ces deux variables aléatoires ne sont pas indépendantes. Il est possible de générer en même temps le couple  $(\alpha, \beta)$  ou de générer d’abord la variable  $\alpha$  suivant sa loi marginale, puis la variable  $\beta$  suivant sa loi conditionnelle sachant  $\alpha$ . Ces deux manières font classiquement appel à une méthode due à von Neumann.

### 6.6.5 La méthode par réjection de von Neumann

La méthode par réjection, ou méthode du rejet, consiste à simuler une variable aléatoire  $X$  de densité connue  $f$  à partir d'une autre variable  $Y$  de densité  $g$  dont la simulation, par exemple par la méthode d'inversion, est facile à mettre en œuvre. La densité  $g$  multipliée par une constante positive  $M$  doit pouvoir majorer  $f$  pour tout  $x$  de son support

$$\forall x, g(x) \neq 0, \frac{f(x)}{g(x)} \leq M. \quad (101)$$

La densité  $f$  est la loi « cible » et  $g$  est la loi « enveloppe ». La procédure est la suivante

1. On génère  $Y$  suivant la loi  $g$ , facile à simuler. Soit  $y$  la valeur trouvée.
2. On génère  $U$  suivant la loi uniforme entre 0 et 1. Les variables  $Y$  et  $U$  doivent être indépendantes. On obtient  $u$ .
3. Si  $u \leq \frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)}$ , alors  $x = y$ , sinon on retourne à l'étape 1.

La fonction de répartition de  $X$  est, par définition, égale à  $\Pr\{X \leq x\}$ . Montrons qu'elle est égale à  $\Pr\{Y \leq x | U \leq \frac{1}{M} \frac{f(Y)}{g(Y)}\}$  qui est la probabilité de succès du test à l'étape 3 de la procédure.

*Démonstration.* Le couple de variables aléatoires indépendantes  $(Y, U)$  possède la loi conjointe  $f_{Y,U}$  donnée par l'expression  $f_{Y,U}(y, u) = g(y)\mathbf{1}_{[0,1]}(u)$ . Calculons la fonction de répartition de  $Y$  sujette à la condition pour que  $X$  soit identifié à  $Y$ . C'est un probabilité conditionnelle qui se calcule à l'aide de la formule  $\Pr\{A|B\} = \Pr\{A, B\}/\Pr\{B\}$ . Il vient

$$\begin{aligned} \Pr\{Y \leq x | U \leq \frac{1}{M} \frac{f(Y)}{g(Y)}\} &= \frac{\Pr\{Y \leq x, U \leq \frac{1}{M} \frac{f(Y)}{g(Y)}\}}{\Pr\{U \leq \frac{1}{M} \frac{f(Y)}{g(Y)}\}}, \\ &= \frac{\int_{-\infty}^x g(y) dy \int_0^{\min(\frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)}, 1)} du}{\int_{-\infty}^{+\infty} g(y) dy \int_0^{\min(\frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)}, 1)} du}, \end{aligned}$$

mais  $\min(\frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)}, 1) = \frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)}$ , d'où

$$\begin{aligned} &= \frac{\int_{-\infty}^x \frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)} g(y) dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{M} \frac{f(y)}{g(y)} g(y) dy}, \\ &= \frac{\int_{-\infty}^x \frac{1}{M} f(y) dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{M} f(y) dy}, \\ &= \frac{\int_{-\infty}^x f(y) dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} f(y) dy} = \Pr\{X \leq x\}. \end{aligned}$$

La loi suivie par  $X$  est identique à la loi conditionnelle de  $Y$ . □

On a démontré au passage que  $\Pr\{U \leq \frac{1}{M} \frac{f(Y)}{g(Y)}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{M} f(y) dy = \frac{1}{M}$ . Cette quantité mesure la probabilité de succès de la méthode, c'est-à-dire la probabilité de produire le nombre  $X$  à l'étape 3. Pour obtenir l'efficacité maximum, il faut que le majorant  $M$  soit le plus petit possible tout en respectant la condition (101). On a

$$\frac{f(x)}{g(x)} \leq \max_x \frac{f(x)}{g(x)} \leq M,$$

qui montre que l'on peut choisir  $M_{\text{opt}} = \max_x f(x)/g(x)$ . On obtiendra également l'efficacité théorique de la méthode, soit  $M_{\text{opt}}^{-1}$ .

La procédure se généralise à des variables à plusieurs dimensions, elle devient

1. On génère  $(Y_1, \dots, Y_n)$  suivant la loi  $g$ , facile à simuler. Soit  $(y_1, \dots, y_n)$  la valeur trouvée.
2. On génère  $U$  suivant la loi uniforme entre 0 et 1. Les variables  $(Y_1, \dots, Y_n)$  d'une part et  $U$  de l'autre doivent être indépendantes. On obtient  $u$ .
3. Si  $u \leq \frac{1}{M} \frac{f(y_1, \dots, y_n)}{g(y_1, \dots, y_n)}$ , alors  $(x_1, \dots, x_n) = (y_1, \dots, y_n)$ , sinon on retourne à l'étape 1.

Elle est validée par une démonstration similaire à celle qui précède. Il n'est pas nécessaire, mais il est plus pratique, que les variables  $Y_1, \dots, Y_n$  soient indépendantes. On démontre également que l'efficacité théorique est  $M_{\text{opt}}^{-1}$  avec

$$M_{\text{opt}} = \max_{x_1, \dots, x_n} \frac{f(x_1, \dots, x_n)}{g(x_1, \dots, x_n)}. \quad (102)$$

### 6.6.6 Simulation du couple $(\alpha, \beta)$

La fonction  $f$  est la fonction de phase  $P(\alpha, \beta)$  et on prendra pour fonction  $g$  la loi uniforme sur une sphère de densité  $g(\alpha, \beta) = 1/4\pi$ . On obtient  $\alpha$  et  $\beta$  à l'aide de deux variables uniformes indépendantes  $U_1$  et  $U_2$ ,  $\alpha = \arccos(2U_1 - 1)$  et  $\beta = 2\pi U_2$ . Une troisième variable uniforme  $U_3$  est utilisée pour l'étape de validation. On a  $M_{\text{opt}} = 4\pi \max_{\alpha, \beta} P(\alpha, \beta)$  et l'efficacité  $M_{\text{opt}}^{-1}$ . Le maximum de  $P$  dans le cas de la diffusion de Mie a lieu pour  $\alpha = 0$ , valeur pour laquelle  $S_{12}(0) = 0$ . Il vient

$$\frac{1}{M_{\text{opt}}} = \frac{1}{4\pi P(0, 0)} = \frac{x^2 Q_{\text{sca}}}{4S_{11}(0)}. \quad (103)$$

L'étape de validation s'écrit alors

$$U_3 \leq \frac{P(\alpha, \beta)}{P(0, 0)} = \frac{S_{11}(\alpha)I_i + S_{12}(\alpha)(Q_i \cos(2\beta) + U_i \sin(2\beta))}{S_{11}(0)I_i}. \quad (104)$$

Cette procédure est très rapide et facilement programmable mais elle devient rapidement inefficace lorsqu'on s'éloigne du cas Rayleigh (voir figure 32 page 55). Il est plus intéressant de procéder par étape et de générer d'abord l'angle  $\alpha$  suivant sa loi marginale, puis  $\beta$  suivant sa loi conditionnelle sachant  $\alpha$ .

### 6.6.7 Simulation de $\alpha$ par sa loi marginale

La fonction de phase  $P(\alpha, \beta)$  peut s'exprimer comme le produit de la densité marginale de  $\alpha$  par la densité conditionnelle de  $\beta$  sachant  $\alpha$  (voir chapitre 6.2.7). On a, pour un vecteur de Stokes incident  $S_i = (I_i, Q_i, U_i, V_i)$

$$P(\alpha, \beta) = \frac{S_{11}(\alpha)I_i + S_{12}(\alpha)(Q_i \cos(2\beta) + U_i \sin(2\beta))}{\pi x^2 Q_{\text{sca}} I_i}. \quad (105)$$

Il ne faut cependant pas oublier que  $P(\alpha, \beta)$  est la densité de probabilité par unité d'angle solide au voisinage de la direction repérée par les coordonnées  $\alpha, \beta$ . La densité de probabilité du couple  $(\alpha, \beta)$  est  $P(\alpha, \beta) \sin \alpha$ . La densité marginale de  $\alpha$  s'obtient en intégrant  $P(\alpha, \beta) \sin \alpha$  sur tous les angles  $\beta$ . Il vient, en notant que les fonctions trigonométriques sont de moyenne nulle

$$f_\alpha(\alpha) = \int_0^{2\pi} P(\alpha, \beta) \sin \alpha d\beta = \frac{2S_{11}(\alpha)}{x^2 Q_{\text{sca}}} \sin \alpha. \quad (106)$$

Les calculs sont facilités par l'utilisation de la variable  $\mu = \cos \alpha$  de préférence à  $\alpha$ . On obtient la densité marginale  $f_\mu$  de  $\mu$  au moyen de la formule du changement de variable

$$\begin{aligned} f_\mu(\mu) &= f_\alpha(\alpha) \left| \frac{d\mu}{d\alpha} \right|^{-1}, \\ &= \frac{2}{x^2 Q_{\text{sca}}} S_{11}(\alpha) \sin \alpha \frac{1}{\sin \alpha}, \\ &= \frac{2}{x^2 Q_{\text{sca}}} S_{11}(\arccos \mu). \end{aligned}$$

On envisage à présent plusieurs types de fonctions enveloppe.

**L'enveloppe uniforme.** Dans ce cas, la variable  $\mu$  est uniformément répartie entre  $-1$  et  $1$ . On a  $g_\mu(\mu) = \frac{1}{2}$  et on obtient  $\mu$  par  $M = 2U - 1$ . La figure 29 montre la fonction de phase marginale simulée suivant ce procédé. L'efficacité  $M_{\text{opt}}^{-1}$  est donnée par

$$\frac{1}{M_{\text{opt}}} = \left[ \max_\mu \frac{2S_{11}(\arccos \mu)/x^2 Q_{\text{sca}}}{1/2} \right]^{-1} = \frac{x^2 Q_{\text{sca}}}{4S_{11}(0)}. \quad (107)$$

Comme il se doit ce résultat est identique à celui trouvé en (103) pour le cas 2D uniforme. Pour des particules de très petits facteurs de forme, la phase marginale correspond au cas Rayleigh  $f_\mu(\mu) = \frac{3}{8}(1 + \mu^2)$ . On obtient alors

$$\frac{1}{M_{\text{opt}}} = \left[ \max_\mu \frac{\frac{3}{8}(1 + \mu^2)}{1/2} \right]^{-1} = \left[ \frac{6/8}{1/2} \right]^{-1} = \frac{2}{3}, \quad x \ll 1. \quad (108)$$

L'efficacité de la phase enveloppe uniforme diminue fortement lorsque  $x$  augmente. Dans le cas de la figure 29 par exemple, l'efficacité de la procédure est d'environ 66% pour  $x = 0.1$ , alors qu'elle n'est que d'environ 45% pour  $x = 1$ , pour  $x = 3$  elle n'est plus que de 9.5% environ (voir figure 32).

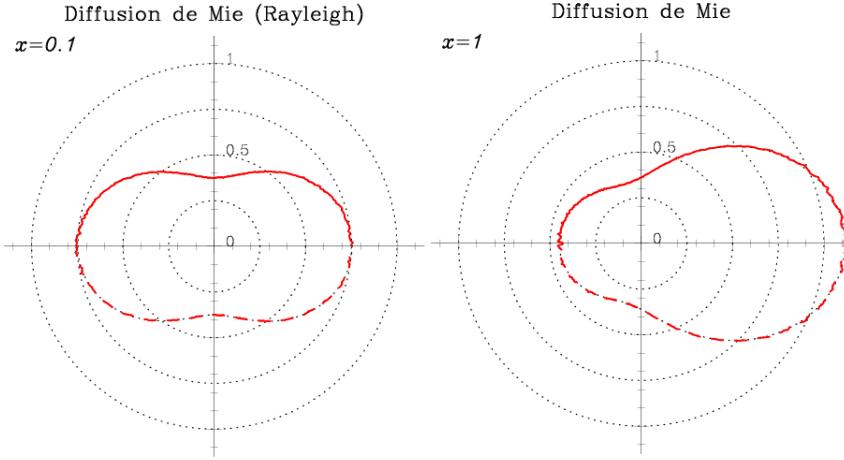


FIGURE 29 – Simulation de l’angle polaire  $\alpha$  de diffusion de la lumière par des particules sphériques de facteur de forme  $x = 0.1$  et  $x = 1$ . La fonction de phase marginale tracée en rouge est calculée à l’aide des simulations, elle ne se distingue pas, à cette échelle, de celle calculée à l’aide du programme BHMIE. La fonction enveloppe utilisée ici est uniforme en  $\mu = \cos \alpha$  et  $10^7$  particules ont été lancées.

**L’enveloppe Rayleigh.** Il est possible d’obtenir 100% d’efficacité pour les petits  $x$  en prenant la phase Rayleigh en tant que phase enveloppe. On a (voir équation (11) page 4)

$$g_\mu(\mu) = \frac{3}{8}(1 + \mu^2)\mathbf{1}_{-1 \leq \mu \leq 1}. \quad (109)$$

On simule cette enveloppe grâce à l’algorithme **M** page 33. Comme pour l’enveloppe uniforme, l’efficacité chute rapidement (en  $x^{-2}$ ) au-delà de  $x = 0.2$  approximativement.

**L’enveloppe Henyey-Greenstein.** L’équation (95) page 46, donne l’expression de cette enveloppe

$$g_\mu(\mu) = \frac{1}{2} \frac{1 - g^2}{(1 - 2g\mu + g^2)^{\frac{3}{2}}} \mathbf{1}_{-1 \leq \mu \leq 1} \quad (110)$$

On la simule grâce à l’algorithme **HG** page 47. Le paramètre  $g$  doit être adapté de façon à obtenir la plus grande efficacité. On a procédé ainsi pour obtenir la figure 32 et les données de la table 3. Pour les petites valeurs de  $x$ , on a  $g = 0$  et l’enveloppe devient uniforme, l’efficacité est alors de  $\frac{2}{3}$ .

**La famille d’enveloppes POLYn.** L’idéal serait de disposer d’une famille de courbes dépendant d’un paramètre  $w$  s’adaptant aux valeurs de  $x$  de façon à envelopper au plus près les diverses fonctions de phase de Mie, et possédant le cas Rayleigh comme cas particulier. Considérons l’expérience numérique suivante : soient trois variables aléatoires  $M_1, M_2, M_3$  uniformément réparties entre  $-1$  et  $+1$ . On a

$$M_i = 2U_i - 1, \quad i = 1, 2, 3,$$

où les  $U_i$  sont des variables uniformes entre 0 et 1. Soient les deux statistiques

$$\begin{aligned} M_{(1)} &= \min(M_1, M_2, M_3), \\ M_{(3)} &= \max(M_1, M_2, M_3). \end{aligned}$$

Elles possèdent les fonctions de répartition suivantes

$$\begin{aligned} F_{(1)} &\equiv \Pr\{M_{(1)} \leq m\} = 1 - \left(1 - \frac{m+1}{2}\right)^3 = \frac{1}{8}(m^3 - 3m^2 + 3m + 7), \\ F_{(3)} &\equiv \Pr\{M_{(3)} \leq m\} = \left(\frac{m+1}{2}\right)^3 = \frac{1}{8}(m^3 + 3m^2 + 3m + 1). \end{aligned}$$

On constate alors que

$$0.5F_{(1)} + 0.5F_{(3)} = \frac{1}{8}m^3 + \frac{3}{8}m + \frac{1}{2}.$$

Cette fonction est égale, en posant  $m = \mu$ , à la fonction de répartition de la diffusion de Rayleigh. On obtient les fonctions de phase par dérivation des fonctions de répartition. On considérera alors la famille d’enveloppes

$$g_\mu(\mu; w) = \frac{3}{8}[w(1 + \mu)^2 + (1 - w)(1 - \mu)^2],$$

qui pour  $w = 0.5$  est identique à l’enveloppe Rayleigh et pour  $w > 0.5$  ressemble à la fonction de phase de Mie pour des  $x$  pas trop élevés (voir figure 30). On doit chercher le paramètre  $w$  donnant la meilleure efficacité théorique. On simule les variables possédant la fonction de phase  $P_{\text{env}}$  de la façon suivante

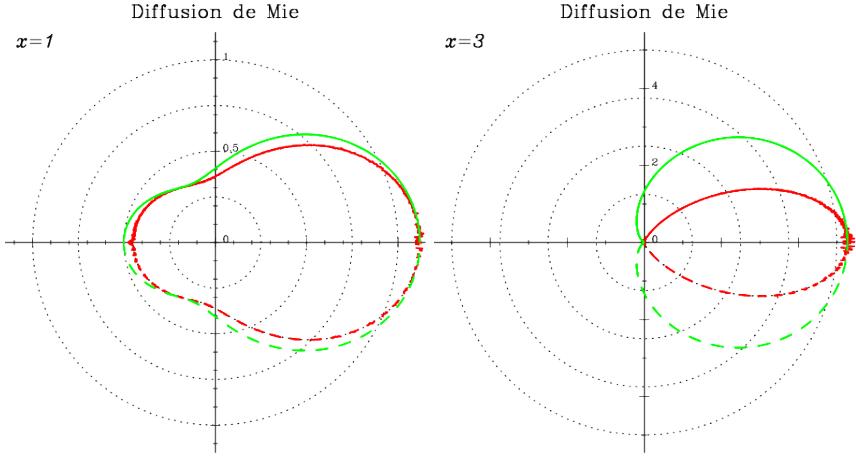


FIGURE 30 – Simulation, suivant la méthode du rejet, de la fonction de phase Mie pour les facteurs de forme  $x = 1$  et  $x = 3$ . La courbe rouge est la fonction de phase simulée, la courbe verte est l'enveloppe de la fonction de phase théorique donnée par BHMIE. L'efficacité de la méthode, pour la famille d'enveloppes Poly3 considérée ici, est d'environ 93% pour  $x = 1$  et de 28% pour  $x = 3$ , elle chute rapidement au-delà.

#### **Algorithme E** *Simulation de $m = \mu = \cos \alpha$ suivant la famille d'enveloppes POLY3*

**E1.** Choisir quatre nombres indépendants répartis uniformément entre 0 et 1.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2, U_3$  et  $U_4$

**E2.** Si  $U_4 \leq w$  alors  $M = 2 \max(U_1, U_2, U_3) - 1$

Sinon  $M = 2 \min(U_1, U_2, U_3) - 1$

On a utilisé la méthode de l'enveloppe afin de simuler le phénomène de diffusion pour des fonctions de phase correspondant à des  $x > 0.1$ , voir figure 30. L'utilisation de la famille Poly3 est efficace jusqu'à  $x \approx 1$ . Pour aller au-delà, on peut adapter la méthode en considérant le minimum et le maximum de plusieurs variables uniformes. La figure 31 présente deux exemples de diffusions simulées avec cette méthode pour  $x = 2$  et  $x = 4$ . Afin de simuler cette famille d'enveloppes, on utilisera l'un ou l'autre des deux algorithmes équivalents suivants. On choisira celui qui obtient la meilleure performance pour un processeur donné.

#### **Algorithme Pn** *Simulation de $m = \cos \alpha$ suivant la famille d'enveloppes POLYn. Méthode 1*

**Pn1.** Choisir  $n + 1$  nombres indépendants répartis uniformément entre 0 et 1.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2, \dots, U_{n+1}$

**Pn2.**  $2 \max(U_1, U_2, \dots, U_n) - 1 \rightarrow M$

Si  $U_{n+1} > w$  alors  $-M \rightarrow M$

#### **Algorithme Pn** *Simulation de $m = \cos \alpha$ suivant la famille d'enveloppes POLYn. Méthode 2*

**Pn1.** Choisir deux nombres indépendants répartis uniformément entre 0 et 1.

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U_1, U_2$

**Pn2.**  $2U_1^{\frac{1}{n}} - 1 \rightarrow M$

Si  $U_2 > w$  alors  $-M \rightarrow M$

Le dernier algorithme permet de généraliser la méthode aux valeurs de  $n$  non entières. Les expériences numériques montrent que la famille Polyn n'est efficace, pour  $n \geq 4$ , que sur un petit domaine, par exemple Poly5 possède un maximum marqué au voisinage de  $x = 2$ . Il n'est pas utile de considérer les familles au-delà de Poly7 car elles sont moins performantes que l'enveloppe Henyey-Greenstein.

La table 3, page suivante, et la figure 32, page 55, résument les performances de différentes fonctions enveloppe. Les très faibles efficacités constatées dès que  $x$  augmente ont pour origine la mauvaise adéquation de la fonction enveloppe à la fonction de phase qui est extrêmement complexe pour des facteurs de forme élevés.

#### **6.6.8 Difficulté posée par des diffuseurs de grande taille**

La figure 32 montre qu'à partir d'environ  $x \geq 7$ , la méthode de l'enveloppe voit ses performances chuter considérablement. La source de cette perte d'efficacité provient des nombreux lobes secondaires présents dans la fonction de phase, notamment dans sa partie rétrodiffusée, et qu'il est difficile de représenter par une fonction enveloppe appropriée.

Il est assez simple de comprendre d'où provient une partie de ces lobes. Lorsque la taille des diffuseurs augmente ( $x \rightarrow \infty$ ) on peut scinder la fonction de phase en au moins deux contributions distinctes : l'une due à la diffraction de

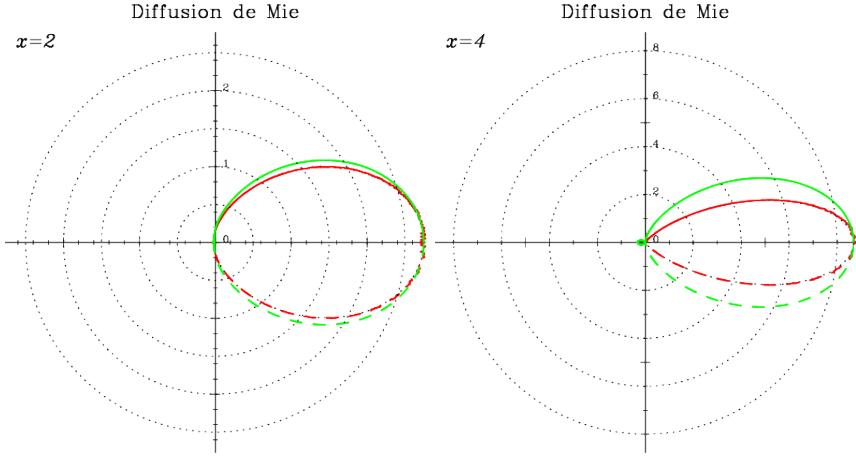


FIGURE 31 – Extension de la méthode de l'enveloppe utilisée pour la figure 30 à la famille Polyn, pour des facteurs de forme  $x = 2$  et  $x = 4$ . L'efficacité de la méthode est d'environ 89.5% pour  $x = 2$  avec 5 variables uniformes et de 44% pour  $x = 4$  avec 8 variables uniformes.

$x$	Uniforme	Rayleigh	Polyn	HG
0.01	66.66%	<b>100%</b>	$n = 3, 100\%$	66.67%
0.03	66.64%	99.96%	$n = 3, \mathbf{99.99\%}$	66.67%
0.1	66.37%	99.57%	$n = 3, \mathbf{99.93\%}$	66.67%
0.3	64.09%	96.13%	$n = 3, \mathbf{99.41\%}$	66.70%
1	44.59%	66.88%	$n = 3, \mathbf{92.62\%}$	71.23%
2	18.13%	27.20%	$n = 5, \mathbf{89.56\%}$	72.72%
3	9.46%	14.19%	$n = 7, 56.40\%$	<b>66.45%</b>
4	5.71%	8.56%	$n = 8, 44.04\%$	<b>64.92%</b>
10	1.67%	2.51%	$n = 9, 13.13\%$	<b>21.29%</b>
30	<1%	<1%	$n = 13, 2.69\%$	<b>10.86%</b>
100	<1%	<1%	$n = 18, <1\%$	<b>5.22%</b>
300	<1%	<1%	$n = 20, <1\%$	<b>2.09%</b>
1000	<1%	<1%	$n = 24, <1\%$	<b>0.76%</b>
Temps moyen	4.5sec	6.4sec	de 6.8 à 22sec	5.5 sec

TABLE 3 – Efficacité théorique de la méthode du rejet pour différentes phases enveloppes. Les nombres en caractères gras indiquent la meilleure performance pour un  $x$  donné. L'efficacité expérimentale s'écarte très peu de ces valeurs. Le temps de calcul est donné pour  $3 \times 10^7$  simulations sur un processeur intel® Core™ 2 Duo P7450@2.13GHz.

l'onde par le diffuseur et l'autre à la réflexion et la réfraction des rayons lumineux frappant directement le diffuseur (que l'on traite à la façon de l'optique géométrique). La partie diffractée ressemble à une fonction d'Airy et son expression est donnée (voir chapitre 12.32 de [12]) par

$$S_1(\theta) = S_2(\theta) = x^2 \frac{J_1(x\theta)}{x\theta},$$

où  $J_1$  est la fonction de Bessel de première espèce. Entre les lobes, la fonction de phase n'est pas nulle, car il faut ajouter la contribution due aux rayons lumineux frappant directement la particule. Cette dernière contribution ajoute elle-même d'autres lobes à la fonction de phase. La figure 33 page suivante illustre cette situation.

Dans un tel contexte, il faut envisager de traiter séparément, toujours par la méthode de l'enveloppe, les parties diffusée et rétrodiffusée et, dans les cas les plus difficiles, par l'inversion numérique de la fonction de répartition, elle-même calculée numériquement à partir des données fournie par BHMIE.

#### 6.6.9 Simulation de $\beta$ par sa loi conditionnelle sachant $\alpha$

Après avoir obtenu l'angle polaire  $\alpha$ , il faut simuler l'azimut  $\beta$  suivant sa densité de probabilité conditionnelle sachant la valeur prise par  $\alpha$ . Pour cela, il est nécessaire de calculer la fonction de répartition conditionnelle de  $\beta$ . On part de sa densité de probabilité conditionnelle telle qu'elle est donnée par l'équation (90) page 42

$$f_\beta(\beta|\alpha) = \frac{1}{2\pi} \left( 1 + \frac{S_{12}(\alpha)}{S_{11}(\alpha)I_i} (Q_i \cos(2\beta) + U_i \sin(2\beta)) \right).$$

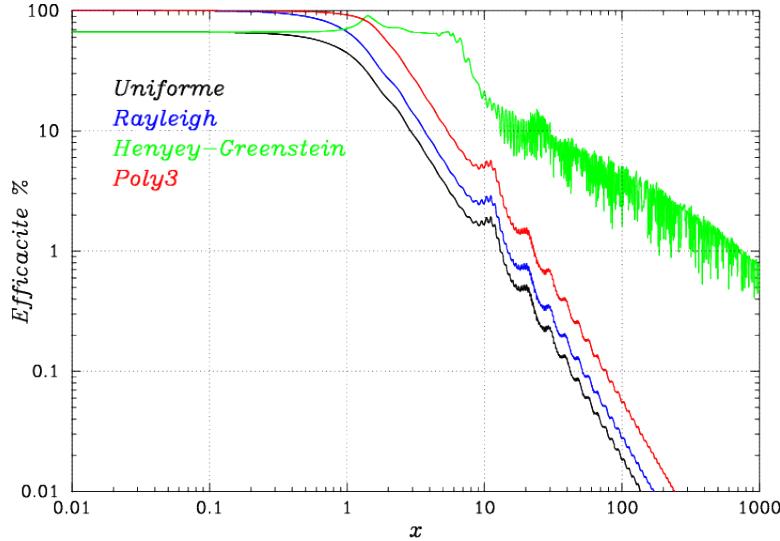


FIGURE 32 – Efficacité de la méthode par réjection de von Neumann en fonction du paramètre de forme  $x$ . Diverses fonctions enveloppes  $g$  ont été utilisées afin de simuler la diffusion de Mie.

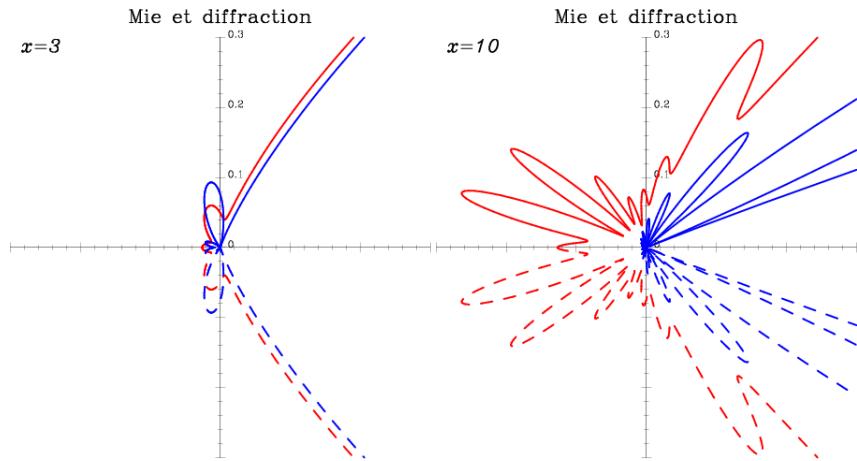


FIGURE 33 – agrandissement de la partie centrale de la fonction de phase mettant en évidence le rôle joué par la diffraction pour  $x = 3$  et  $x = 10$ . La courbe rouge est la fonction de phase de Mie, et la bleue est une fonction de phase ne prenant en compte que le seul phénomène de diffraction.

Introduisons l'angle de polarisation  $\chi$

$$\cos 2\chi = \frac{Q_i}{(Q_i^2 + U_i^2)^{\frac{1}{2}}}, \quad \sin 2\chi = \frac{U_i}{(Q_i^2 + U_i^2)^{\frac{1}{2}}}.$$

Il est possible de calculer cet angle à l'aide de la fonction atan2, on obtiendra<sup>7</sup> :  $\chi = \frac{1}{2} \text{atan2}(\sin 2\chi, \cos 2\chi) = \frac{1}{2} \text{atan2}(U_i, Q_i)$ . En remarquant que  $P_{\text{lin}}$ , le degré de polarisation linéaire, est égal à  $(Q_i^2 + U_i^2)^{\frac{1}{2}} / I_i$ , il vient

$$f_\beta(\beta|\alpha) = \frac{1}{2\pi} \left( 1 + \frac{S_{12}(\alpha)}{S_{11}(\alpha)} P_{\text{lin}} \cos 2(\beta - \chi) \right).$$

La fonction de répartition  $F_\beta$  est l'intégrale de la densité :  $F_\beta(\beta|\alpha) = \int_0^\beta f_\beta(t|\alpha) dt$ . On trouve

$$F_\beta(\beta|\alpha) = \frac{1}{2\pi} \left( \beta + \frac{1}{2} \frac{S_{12}(\alpha)}{S_{11}(\alpha)} P_{\text{lin}} (\sin 2(\beta - \chi) + \sin 2\chi) \right).$$

On vérifie qu'il s'agit bien d'une fonction de répartition. Elle est définie pour l'intervalle  $0 \leq \beta \leq 2\pi$  où elle est croissante, car  $f_\beta(\beta|\alpha) \geq 0$ , et on a  $F_\beta(0|\alpha) = 0$  et  $F_\beta(2\pi|\alpha) = 1$ . En vue des simulations, il est utile de noter que  $F_\beta(\pi|\alpha) = 1/2$ .

Afin de procéder à la simulation de l'azimut, il faut résoudre pour  $\beta$  l'équation suivante

$$F_\beta(\beta|\alpha) = U,$$

7. L'angle  $2\chi$  est aussi l'azimut du vecteur de coordonnées  $Q, U, V$  caractérisant l'état de polarisation de la lumière dans un repère cartésien 3D.

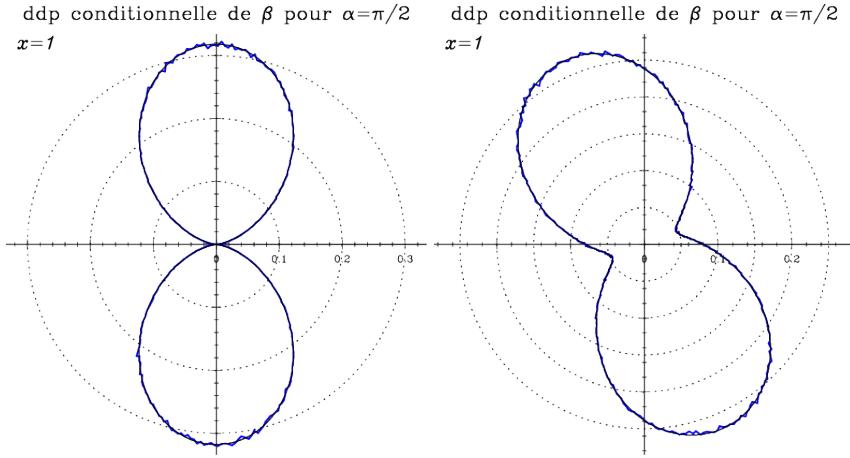


FIGURE 34 – Simulation de l’azimut de diffusion  $\beta$  d’après sa loi conditionnelle sachant  $\alpha$ . Pour ces simulations, on a choisi  $\alpha = \pi/2$ ,  $x = 1$ . Les paramètres de Stokes de l’onde incidente sont  $Q = 1$ ,  $U = 0$  pour le graphique de gauche et  $Q = 0.5$ ,  $U = 0.5$  pour celui de droite.

où  $U$  est une variable aléatoire uniforme entre 0 et 1. Ce qui est équivalent à rechercher la solution de l’équation

$$\beta + A \sin 2(\beta - \chi) + B = 0,$$

où  $A$ ,  $B$  et  $\chi$  sont des valeurs connues. On a posé

$$A = \frac{1}{2} \frac{S_{12}(\alpha)}{S_{11}(\alpha)} P_{\text{lin}}, \quad B = A \sin 2\chi - 2\pi U.$$

La solution de type  $F(\beta) = 0$  peut s’obtenir par point fixe, dichotomie ou une combinaison des deux. D’après la propriété  $F(\pi) = 1/2$ , la solution est à chercher dans l’intervalle  $[0, \pi]$  si  $U \leq \frac{1}{2}$  et dans  $[\pi, 2\pi]$  dans le cas contraire. La figure 34 présente une réalisation pratique de la simulation de  $\beta$ .

### 6.6.10 Calculer le nouveau vecteur de Stokes

La matrice de Mueller  $M(\alpha)$  rend compte de l’effet du diffuseur sur les polarisations, c’est-à-dire qu’elle permet de faire passer du vecteur de Stokes avant diffusion à celui après diffusion, à la condition que les plans de références soient identiques. Avant de l’appliquer il faut recalculer le vecteur de Stokes incident  $S_i$  lorsque l’on fait subir une rotation d’angle  $\beta$  à son plan de référence de façon à l’amener sur le plan de diffusion actuel. La matrice  $R(\beta)$  permet de réaliser cette opération

$$R(\beta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\beta) & \sin(2\beta) & 0 \\ 0 & -\sin(2\beta) & \cos(2\beta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (111)$$

Par conséquent, la passage du vecteur de Stokes incident  $S_i$  à celui diffusé  $S_s$ , s’exprime ainsi

$$S_s = M(\alpha)R(\beta)S_i. \quad (112)$$

### 6.6.11 Suivre les évolutions de l’impulsion $\vec{p}$

Il n’est pas possible d’utiliser directement la formule des cosinus (3), car l’angle  $\beta$  n’y est pas défini de la même manière qu’ici. En effet, d’après la figure 2, page 3,  $\beta$  est un angle de « cap » alors qu’à présent il représente un angle de « changement de cap ». Dans ces circonstances, il est plus simple, et numériquement plus stable, de suivre les évolutions successives de l’impulsion  $\vec{p}$  sous l’effet d’un vecteur de rotation  $\vec{u}'$ . Pour réaliser cette opération, il est avantageux d’utiliser la formule d’Olinde Rodrigues car elle est intrinsèque, c’est-à-dire indépendante d’un système de coordonnées particulier. Elle s’exprime de la façon suivante

$$\vec{p}' = \vec{p} \cos \sigma + (\vec{u}' \wedge \vec{p}) \sin \sigma + \vec{u}' (\vec{u}' \cdot \vec{p})(1 - \cos \sigma). \quad (113)$$

Dans cette formule,  $\vec{p}$  est le vecteur avant la rotation d’angle  $\sigma$  autour de l’axe  $\vec{u}'$ , et  $\vec{p}'$  est le vecteur qui résulte de cette rotation. De plus, le vecteur  $\vec{u}'$  autour duquel tourne  $\vec{p}$  doit être unitaire.

La formule se simplifie car les rotations s’effectuent ici suivant des arcs de grands cercles et alors  $\vec{u}' \cdot \vec{p} = 0$ . L’angle de rotation  $\sigma$  sera égal à  $\alpha$  si auparavant l’axe de rotation  $\vec{u}$  a été mis à jour suivant une rotation d’angle  $\beta$  autour de  $\vec{p}$ .

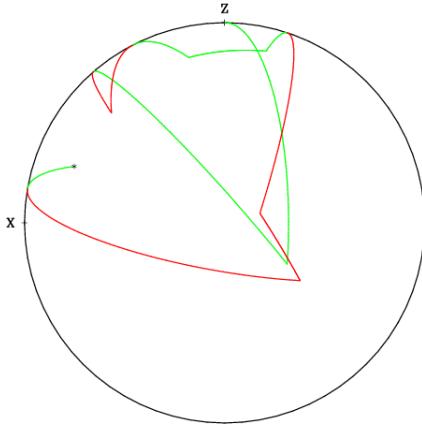


FIGURE 35 – Exemple de marche au hasard du vecteur d’onde suivant la diffusion de Rayleigh. La couleur permet de distinguer les faces avant et arrière de la sphère. Il y a eu sept diffusions au cours de cette expérience numérique avant la sortie du photon indiquée par une étoile.

Pour cette dernière opération il est aussi possible d’utiliser la formule de Rodrigues à la condition d’avoir au préalable normalisé  $\vec{p}$ . Il vient alors

$$\begin{aligned}\vec{u}' &= \vec{u} \cos \beta + (\vec{p} \wedge \vec{u}) \sin \beta, \\ \vec{p}' &= \vec{p} \cos \alpha + (\vec{u}' \wedge \vec{p}) \sin \alpha.\end{aligned}\quad (114)$$

La suite des rotations est alors entièrement définie par les conditions initiales  $\vec{p}_0$  et  $\vec{u}_0$ . À chaque étape  $i$ , il faut passer des vecteurs  $\vec{u}_i = \vec{u}$  et  $\vec{p}_i = \vec{p}$  aux vecteurs  $\vec{u}_{i+1} = \vec{u}'$  et  $\vec{p}_{i+1} = \vec{p}'$  grâce aux formules (114), prises dans cet ordre. Si les vecteurs  $\vec{u}_0$  et  $\vec{p}_0$  sont normalisés, par la suite les vecteurs  $\vec{u}'$  et  $\vec{p}'$  le restent également. Il est cependant prudent de les renormaliser régulièrement. La figure 35 illustre une marche au hasard calculée de cette façon.

On donne à présent la démonstration de la formule d’Olinde Rodrigues.

*Démonstration.* Nous voulons établir le formule (113) que nous écrirons, pour alléger l’écriture, avec  $\vec{u}$  au lieu de  $\vec{u}'$ . Décomposons le vecteur  $\vec{p}$  suivant deux vecteurs l’un  $\vec{p}_{\parallel}$  suivant  $\vec{u}$  et l’autre  $\vec{p}_{\perp}$ , tel que  $\vec{p}_{\parallel} \cdot \vec{p}_{\perp} = 0$ . On a, à la condition que  $\vec{u}$  soit effectivement unitaire  $\vec{u} \cdot \vec{u} = 1$

$$\begin{aligned}\vec{p} &= \vec{p}_{\parallel} + \vec{p}_{\perp}, \\ \vec{p}_{\parallel} &= \vec{u}(\vec{p} \cdot \vec{u}), \\ \vec{p}_{\perp} &= \vec{p} - \vec{u}(\vec{p} \cdot \vec{u}).\end{aligned}$$

Le vecteur de même norme que  $\vec{p}_{\perp}$  et orthogonal à  $\vec{u}$  et  $\vec{p}_{\perp}$  de façon à former un trièdre dans le sens direct est  $\vec{u} \wedge \vec{p}_{\perp}$  qui est égal à  $\vec{u} \wedge \vec{p}$ .

Une rotation étant une opération linéaire, la rotation d’une somme de vecteurs est égale à la somme de la rotation des vecteurs qui la composent. Au cours de la rotation d’angle  $\sigma$  autour de  $\vec{u}$ , le vecteur  $\vec{p}_{\parallel}$  reste invariant, alors que  $\vec{p}_{\perp}$  devient  $\vec{p}_{\perp} \cos \sigma + (\vec{u} \wedge \vec{p}) \sin \sigma$ . On en déduit la formule d’Olinde Rodrigues.  $\square$

*Remarque 4.* Il est possible de donner une interprétation de la formule d’Olinde Rodrigues à l’aide des quaternions de Hamilton (voir appendice A.8).

### 6.6.12 Faire progresser le photon

On fait progresser le photon en profondeur de la façon habituelle. Si le photon se trouve toujours dans la couche diffusante on retourne à l’étape de validation 6.6.3 afin de vérifier si le photon est toujours actif. Sinon le photon s’est échappé et on recalcule le vecteur de Stokes par rapport au plan de référence du détecteur.

### 6.6.13 Calcul des polarisations par rapport à un plan de référence

Le vecteur  $\vec{p}'$  indique la direction du photon qui émerge de la couche diffusante, et le vecteur  $\vec{u}'$  est normal au dernier plan de diffusion engendré par les vecteurs  $\vec{p}$  et  $\vec{p}'$ . Les coordonnées sphériques du vecteur unitaire  $\vec{p}'$  sont données par  $\theta = \arccos(p'_3)$  et  $\phi = \text{atan2}(p'_2, p'_1)$ . Le vecteur de Stokes des photons émergeant suivant l’azimut  $\phi$  sera rapporté au plan méridien faisant un angle  $\phi$  avec le plan de référence  $xOz$ . Pour amener le dernier plan de diffusion sur ce plan méridien, il est nécessaire de le faire tourner d’un angle  $-\beta_*$  autour du vecteur  $\vec{p}'$ .

Formons un trièdre direct  $(\vec{v}, \vec{u}', \vec{p}')$ , où  $\vec{v} = \vec{u}' \wedge \vec{p}'$ . Pour amener le référentiel du laboratoire  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  sur ce trièdre, il faut effectuer : 1) une rotation d’angle  $\phi$  autour du vecteur  $\vec{k}$ ; 2) une rotation d’angle  $\theta$  autour du nouveau vecteur  $\vec{j}$

et; 3) il faut amener le plan méridien sur le plan de diffusion au moyen d'une rotation d'angle  $+\beta_*$  autour du nouveau vecteur  $\vec{k}$  qui est le vecteur  $\vec{p}'$ . À ces rotations correspondent les trois matrices de changement de base

$$R_1(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$R_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$R_3(\beta_*) = \begin{pmatrix} \cos \beta_* & \sin \beta_* & 0 \\ -\sin \beta_* & \cos \beta_* & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ces matrices permettent de calculer les coordonnées d'un vecteur après rotation de la base en fonction de ses coordonnées avant la rotation. Le produit  $R_3(\beta_*)R_2(\theta)R_1(\phi)$  permet de calculer les coordonnées d'un vecteur dans le repère de diffusion, en fonction de celles dans le repère du laboratoire. L'opération opposée s'effectue en inversant l'ordre des rotations et en changeant le signe des angles concernés. Les coordonnées laboratoire des vecteurs  $\vec{u}'$  et  $\vec{v}$  sont alors données par les expressions

$$\begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ u'_3 \end{pmatrix} = R_1(-\phi)R_2(-\theta)R_3(-\beta_*) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = R_1(-\phi)R_2(-\theta)R_3(-\beta_*) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Et à titre de vérification

$$\begin{pmatrix} p'_1 \\ p'_2 \\ p'_3 \end{pmatrix} = R_1(-\phi)R_2(-\theta)R_3(-\beta_*) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

On trouve

$$\begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ u'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \beta_* \cos \theta \cos \phi - \cos \beta_* \sin \phi \\ -\sin \beta_* \cos \theta \sin \phi + \cos \beta_* \cos \phi \\ \sin \beta_* \sin \theta \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta_* \cos \theta \cos \phi - \sin \beta_* \sin \phi \\ \cos \beta_* \cos \theta \sin \phi + \sin \beta_* \cos \phi \\ -\cos \beta_* \sin \theta \end{pmatrix}.$$

Et comme il se doit

$$\begin{pmatrix} p'_1 \\ p'_2 \\ p'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Ces expressions permettent d'évaluer l'angle  $\beta_*$  lorsque  $\sin \theta$  n'est pas nul. On a, sachant que  $\sin \theta$  est toujours positif :  $\beta_* = \text{atan2}(u'_3, -v_3) = \text{atan2}(u'_3, u'_2 p'_1 - u'_1 p'_2)$ .

Connaissant  $\beta_*$  on construit la matrice  $R(-\beta_*)$  qui permet de calculer le vecteur de Stokes par rapport au plan méridien d'angle dièdre  $\phi$ . Il faut noter que l'angle de polarisation  $\chi = \frac{1}{2} \text{atan2}(U, Q)$  fait référence à ce plan mais que par rapport au plan  $xOz$  il vaut  $\chi + \phi$ .

Enfin, on fera la somme des vecteurs de Stokes des photons émergeant sous les angles  $\theta$  et  $\phi$  à  $\Delta\theta$  et  $\Delta\phi$  près (ou  $\Delta\mu$  et  $\Delta\phi$  près). Les composantes du vecteur de Stokes étant des quantités quadratiques, cette somme est justifiée lorsqu'elle est incohérente, ce qui est supposé être le cas.

#### 6.6.14 Sortie des résultats.

Les paramètres de Stokes de la lumière diffusée ou rétrodiffusée par la couche peuvent être présentés sous la forme d'images formant une matrice de Mueller globale du milieu diffusif. On réalisera à cet effet les projections stéréographiques des quatre composantes  $I, Q, U$  et  $V$  du vecteur de Stokes pour une lumière incidente non polarisée et polarisée à 100% suivant les trois polarisations possibles. De plus, on calculera et représentera les degrés de polarisations linéaire et circulaire ainsi que l'angle de polarisation.

## 6.7 Programme pour la diffusion de Mie en lumière polarisée.

### 6.7.1 Pseudo-code

**Algorithme Mie** *Diffusion de Mie en lumière polarisée monochromatique.*

**Mie00.** *Choix des paramètres physiques.*

Saisir( $\tau_{\max}$ ), l'épaisseur optique maximum du milieu.

Saisir( $x$ ), le paramètre de forme des particules sphériques diffusantes.

Saisir( $n_{\text{diff}}$ ), indice de réfraction complexe des diffuseurs.

Saisir( $n$ ), indice de réfraction réel du milieu.

Saisir( $I, Q, U, V$ ), les paramètres de Stokes de la lumière incidente.

$1 - e^{-\tau_{\max}} \rightarrow b$

$n_{\text{diff}}/n \rightarrow \text{refrel}$

$(I; Q; U; V) \rightarrow S_0$

**Mie01.** *Choix des paramètres de la simulation.*

Saisir( $N_{\text{eff}}$ ), le nombre de photons effectivement diffusés (ou bien lancés).

Saisir(seed), initialisation des simulations.

$0 \rightarrow N_{\text{diff}}$ , compteur de photons diffusés.

$0 \rightarrow N_{\text{retro}}$ , compteur de photons rétrodiffusés.

$0 \rightarrow N$ , compteur de photons lancés.

**Mie02.** *Choix de la résolution angulaire.*

Saisir(nang), par ex.  $901 = 90*10 + 1$  pour une résolution d'un dixième de degré. Il est cependant recommandé de choisir la valeur maximum autorisée par le programme, nang = 1000.

**Mie10.** *Initialisation des variables angulaires.*

$2nang - 1 \rightarrow \text{nan}$

Réserver  $\alpha(1:\text{nan})$ , réels.

$\pi/(\text{nan} - 1) \rightarrow \Delta\alpha$

$[0:\text{nan} - 1]\Delta\alpha \rightarrow \alpha$

Réserver  $S_1(1:\text{nan})$ ,  $S_2(1:\text{nan})$ , complexes.

Réserver  $S_{11}(1:\text{nan})$ ,  $S_{12}(1:\text{nan})$ ,  $S_{33}(1:\text{nan})$ ,  $S_{34}(1:\text{nan})$ , réels.

Réserver phase(1:nan), réels.

Réserver phaseEnv(1:nan), phaseNorm(1:nan), réels.

**Mie11.** *Calcul des coefficients de la matrice de Mueller.*

BHMie( $x, \text{refrel}, \text{nang}$ )  $\rightarrow S_1, S_2, Q_{\text{ext}}, Q_{\text{sca}}, Q_{\text{back}}, G_{\text{sca}}$

$\frac{1}{2}(|S_2|^2 + |S_1|^2) \rightarrow S_{11}$

$\frac{1}{2}(|S_2|^2 - |S_1|^2) \rightarrow S_{12}$

$\Re(S_2 \bar{S}_1) \rightarrow S_{33}$

$\Im(S_2 \bar{S}_1) \rightarrow S_{34}$

**Mie12.** *Calcul et normalisation de la phase marginale en  $\mu$ .*

$\frac{1}{2}x^2Q_{\text{sca}} \rightarrow C$

$S_{11}/C \rightarrow \text{phase}$

**Mie13.** *Calcul de l'albedo des particules.*

$Q_{\text{sca}}/Q_{\text{Ext}} \rightarrow \text{albedo}$

**Mie14.** *Détermination de la meilleure enveloppe pour un  $x$  donné et normalisation.*

RechercherEnv( $x$ )  $\rightarrow \text{GetPhaseEnv}()$ , SimuEnv()

GetPhaseEnv( $\alpha$ )  $\rightarrow \text{phaseEnv}$

phase/ $\text{phaseEnv}$   $\rightarrow \text{phaseNorm}$

$1/\text{Maxval}(\text{phaseNorm}) \rightarrow M_{\text{opt}}^{-1}$ , efficacité théorique

$\text{phaseNorm}/M_{\text{opt}} \rightarrow \text{phaseNorm}$

**Mie20.** *On lance un photon avec sa polarisation. (Boucle sur les photons).*

$N + 1 \rightarrow N$

$S_0 \rightarrow S_s$

**Mie21.** *Initialisation des vecteurs pour les rotations du vecteur d'onde.*

$(0; 1; 0) \rightarrow \vec{u}$ , rotation initiale.

$(0; 0; 1) \rightarrow \vec{p}$ , vecteur d'onde initial.

**Mie22.** *Mise en place de la première diffusion.*

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

$-\ln(1 - bU) \rightarrow \tau$

**Mie30.** *Le photon est-il absorbé ? (Boucle sur  $\tau$ ).*

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

Si  $U >$  albedo, alors lancer un nouveau photon en **Mie20**

$S_s \rightarrow S_i$ , mise à jour du vecteur de Stokes.

$\vec{u} \rightarrow \vec{u}_0, \vec{p} \rightarrow \vec{p}_0$ , mise à jour du vecteur d'onde.

**Mie31.** *Choix de l'angle de diffusion  $\alpha$  suivant sa loi marginale.*

SimuEnv(seed)  $\rightarrow \mu$ , simulation de  $\mu = \cos \alpha$  suivant l'enveloppe.

$\arccos \mu \rightarrow \alpha$

Interpolle(phaseNorm,  $\alpha$ )  $\rightarrow P_\alpha$

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

Si  $U > P_\alpha$  alors choix d'un autre  $\alpha$  en **Mie31**

**Mie32.** *Choix de l'azimut  $\beta$  suivant sa loi conditionnelle sachant  $\alpha$ .*

Interpolle( $S_{11}, \alpha$ )  $\rightarrow S_{11\alpha}$

Interpolle( $S_{12}, \alpha$ )  $\rightarrow S_{12\alpha}$

$(Q_i^2 + U_i^2)^{\frac{1}{2}} \rightarrow P_{\text{lin}}$

Si  $P_{\text{lin}} \neq 0$ , alors  $\frac{1}{2} \text{atan}2(U_i, Q_i) \rightarrow \chi$ , sinon  $0 \rightarrow \chi$

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U$

$\frac{1}{2} \frac{S_{12\alpha}}{S_{11\alpha}} P_{\text{lin}} \rightarrow A, A \sin 2\chi - 2\pi U \rightarrow B$

Fzéro( $A, B, \chi$ )  $\rightarrow \beta$

**Mie33.** *Calcul des matrices  $M(\alpha)$  et  $R(\beta)$ , voir eqs. (85) et (86).*

Interpolle( $S_{33}, \alpha$ )  $\rightarrow S_{33\alpha}$

Interpolle( $S_{34}, \alpha$ )  $\rightarrow S_{34\alpha}$

Avec  $S_{11\alpha}, S_{12\alpha}, S_{33\alpha}$  et  $S_{34\alpha}$  construire  $M(\alpha)$

Avec  $\cos(2\beta)$  et  $\sin(2\beta)$  construire  $R(\beta)$

$M(\alpha)R(\beta)S_i \rightarrow S_s$ , nouveau vecteur de Stokes,

$S_s/S_s(1) \rightarrow S_s$ , normalisation.

**Mie34.** *Calcul du nouveau vecteur d'onde  $\vec{p}$  et normalisations.*

$\vec{u}_0 \cos \beta + (\vec{p}_0 \wedge \vec{u}_0) \sin \beta \rightarrow \vec{u}$

$\vec{u}/\|\vec{u}\|_2 \rightarrow \vec{u}$

$\vec{p}_0 \cos \alpha + (\vec{u} \wedge \vec{p}_0) \sin \alpha \rightarrow \vec{p}$

$\vec{p}/\|\vec{p}\|_2 \rightarrow \vec{p}$

**Mie35.** *Progression du photon.*

LoiUniforme(seed)  $\rightarrow U ; -\ln U \rightarrow s$

$\tau + sp_z \rightarrow \tau$

**Mie36.** Le photon est-il toujours dans le milieu diffusif ?

Si  $\tau > 0$  et  $\tau < \tau_{\max}$ , simuler une nouvelle diffusion en **Mie30**

$N_{\text{diff}} + 1 \rightarrow N_{\text{diff}}$

Si  $\tau \leq 0$  alors  $N_{\text{retro}} + 1 \rightarrow N_{\text{retro}}$

**Mie40.** *Sortie du photon, calcul des angles de diffusion.*

$\arccos p_z \rightarrow \theta$

$\text{atan}2(p_y, p_x) \rightarrow \phi$

**Mie41.** *Calcul du vecteur de Stokes par rapport à un polariseur tourné de  $\phi$ .*

$\beta_* = \text{atan}2(u_z, p_x u_y - p_y u_x)$

Avec  $\cos(2\beta_*)$  et  $\sin(2\beta_*)$  construire  $R(-\beta_*)$

$R(-\beta_*)S_s \rightarrow S_s$ , vecteur de Stokes en sortie.

Exploitation des données  $\theta, \phi$  et  $S_s$ .

**Mie50.** *Test de fin de simulations.*

Si  $N_{\text{diff}} < N_{\text{eff}}$  retourner en **Mie20**

(Ou bien faire le test sur  $N < N_{\text{eff}}$ .)

**Mie51.** *Calcul de la réflectance du milieu diffusif.*

$b \times N_{\text{retro}}/N \rightarrow R$

Fin du programme **Mie**.

### 6.7.2 Validation du code

Pour les tests, on se place dans le cas de la diffusion Rayleigh qui est le cas le mieux connu. Le paramètre de forme  $x$  doit être inférieur à 0.1 pour toutes les longueurs d'ondes envisagées. La lumière incidente n'est pas polarisée, son vecteur de Stokes est de composantes  $I = 1, Q = U = V = 0$ . Enfin l'absorption n'est pas prise en compte.

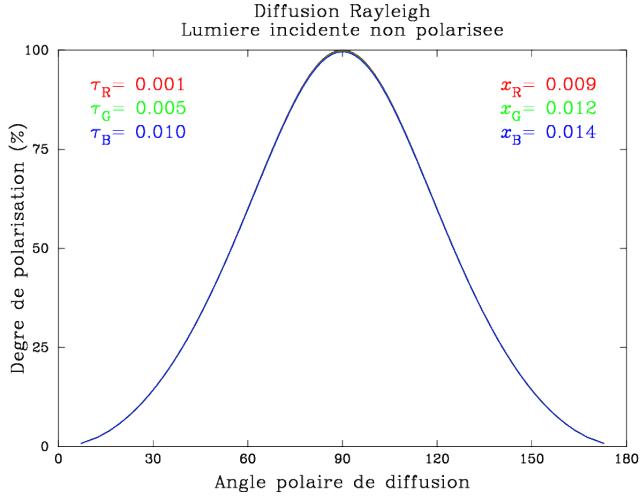


FIGURE 36 – Polarisation linéaire en fonction de l’angle  $\theta$  de diffusion dans le cas Rayleigh optiquement mince. Si  $0 \leq \theta < \frac{\pi}{2}$ , les photons ont traversé la couche, sinon ils sont rétrodiffusés. On ne distingue pas la courbe théorique des courbes expérimentales sur ce graphique. Pour obtenir cette courbe et les suivantes, il a été procédé à  $3 \times 10^8$  simulations Monte-Carlo.

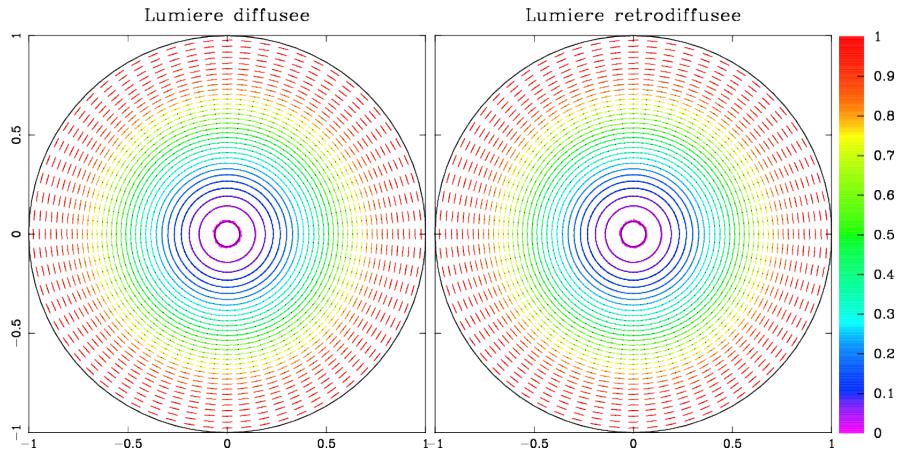


FIGURE 37 – Projection stéréographique de l’angle de polarisation dans le cas Rayleigh optiquement mince  $\tau_B = 0.01$ . Le code de couleur indique le degré de polarisation allant de 0 en magenta à 1 en rouge. Comme attendu la polarisation est maximale au voisinage de  $\theta = \frac{\pi}{2}$ .

**Cas  $\tau \ll 1$ .** On étudie en premier lieu le cas optiquement mince car les photons diffusés ne l’auront été qu’une seule fois au cours de leur interaction avec la couche diffusante. Dans ces conditions, le degré de polarisation linéaire et l’angle de polarisation seront ceux de la diffusion Rayleigh. Le degré de polarisation linéaire est donné par la formule

$$P = \frac{1 - \cos^2 \theta}{1 + \cos^2 \theta}, \quad (115)$$

où  $\theta$  est l’angle polaire de diffusion, qui est également l’angle polaire d’émergence du photon. Un programme a été écrit suivant l’algorithme **Mie** exposé ci-dessus et  $3 \times 10^7$  simulations de Monte-Carlo ont été effectuées pour chaque couleurs du système RGB. La polarisation linéaire obtenue est représentée figure 36 de la présente page, elle est conforme à ce qui est attendu.

L’angle de polarisation est, dans le cas Rayleigh, perpendiculaire au plan de diffusion, ce dernier est confondu avec le plan méridien d’azimut  $\phi$  dans le cas optiquement mince. Ces plans sont les rayons de la projection stéréographique, par conséquent la direction de polarisation doit être tangente aux cercles  $\theta = \text{constante}$  de la projection. C’est effectivement ce que l’on constate sur la figure 37, de la présente page.

**Cas  $\tau \gg 1$ .** Le cas optiquement épais est plus difficile à utiliser pour valider le code car on ne possède pas de résultats analytiques. Cependant, on peut s’attendre à un certain comportement conforme à l’intuition. Les photons ayant réussi à traverser la couche diffusante auront subi de nombreuses diffusions, ceux qui émergent sous les mêmes angles  $\theta$  et  $\phi$  le feront après une dernière diffusion suivant des angles de diffusion  $\alpha$  et  $\beta$  quelconques. Cette diversité des angles a un effet dépolarisant. Ce n’est pas le grand nombre de diffusions qui aurait un effet dépolarisant, à cet égard la polarisation

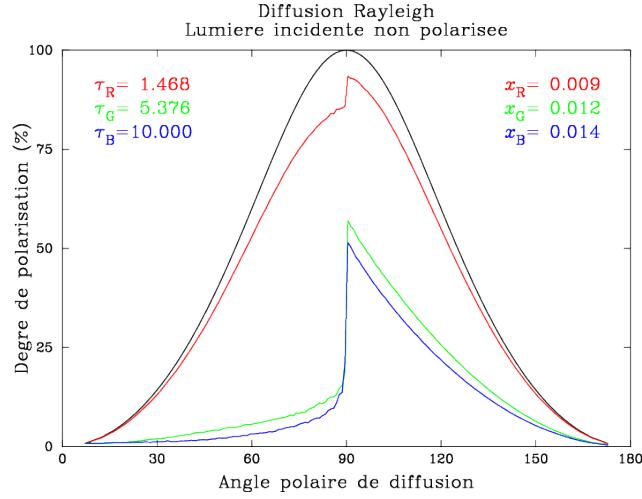


FIGURE 38 – Polarisation linéaire en fonction de l’angle  $\theta$  de diffusion dans le cas Rayleigh optiquement épais.

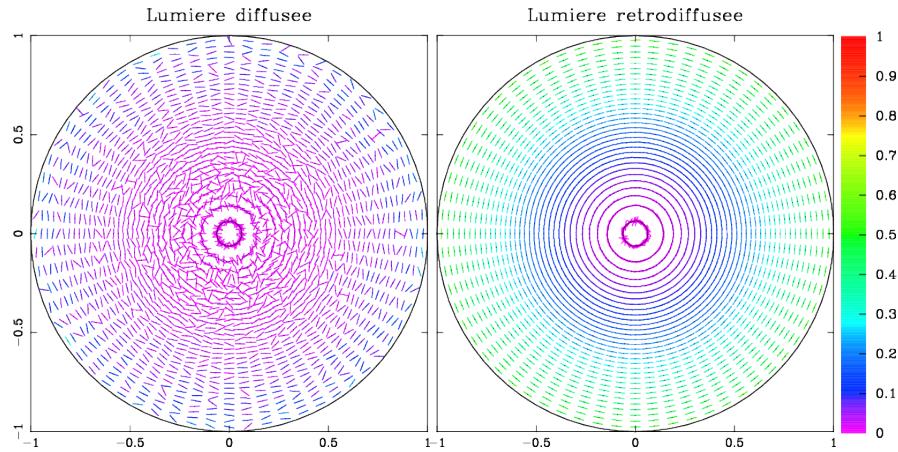


FIGURE 39 – Projection stéréographique de l’angle de polarisation dans le cas Rayleigh optiquement épais  $\tau_B = 10$ .

linéaire à 100% est un point fixe de la matrice de Mueller, et lorsque le nombre de diffusions augmente, les chances d’obtenir ce point fixe augmentent également. C’est la multiplicité des angles de dernière diffusion et les divers angles de polarisation qui en résultent qui, lors de la somme des vecteurs de Stokes en sortie, provoque la dépolarisation. En revanche, la situation est différente pour la lumière rétrodiffusée, environ 17% (voir équation (76), page 31) de la lumière incidente est rétrodiffusée après une seule diffusion. Cette lumière possède les caractéristiques de la diffusion Rayleigh. Lorsque  $\tau \gg 1$ , la quasi-totalité de la lumière est rétrodiffusée, c’est donc environ 17% de la lumière rétrodiffusée qui sera polarisée de cette manière. La signature de la polarisation Rayleigh doit progressivement disparaître avec le nombre de diffusions avant la sortie du photon.

Des simulations au nombre  $3 \times 10^8$  ont été menées à l’aide du programme **Mie** pour une profondeur optique dans le bleu  $\tau_B = 10$ . Les figures 38 et 39 de la présente page montrent les caractéristiques attendues. La discontinuité pour  $\theta = \frac{\pi}{2}$  s’explique par le fait que la sphère de diffusion est elle-même discontinue. En revanche, la persistance de l’angle de polarisation de type Rayleigh au voisinage de  $\theta = \frac{\pi}{2}$  reste à démontrer. Elle est cependant similaire aux observations de la polarisation d’un ciel couvert. La modélisation de cette situation fait l’objet du test qui suit.

### 6.7.3 La polarisation du ciel couvert

Des observations du degré et de l’angle de polarisation du ciel en présence d’une importante couverture nuageuse montrent que, malgré la diffusion multiple au sein du nuage, le degré de polarisation reste au niveau de 5 à 8% et que l’angle de polarisation demeure proche de celui du ciel clair (voir les articles [22] et [9]). La modélisation de ce milieu sera faite en superposant deux couches de différentes natures. La première pour  $0 < \tau \leq 0.3$  représente le ciel clair au dessus des nuages, elle est constituée de particules extrêmement petites  $r \approx 0.01\mu\text{m}$  et, afin de représenter les molécules N<sub>2</sub> et O<sub>2</sub>, l’absorption n’est pas prise en compte. La seconde pour  $0.3 < \tau \leq \tau_{\max}$  est constituée de gouttes d’eau de rayon  $r = 10\mu\text{m}$ . Enfin, le soleil est placé au zénith.

## 6.8 Quelques applications du code Mie

### 6.8.1 La couleur du ciel

Il est possible à présent d'envisager une simulation plus réaliste en tenant compte de la polarisation. Pour cette application on se place dans le cas de la diffusion Rayleigh en prenant des particules. Les paramètres de plus, on a rétabli la possibilité d'absorption du photon au cours de la diffusion.

## A Appendices

### A.1 Placer des points uniformément sur une sphère, méthode symétrique

La méthode qui consiste à tirer aléatoirement de façon uniforme l'azimut  $\phi$  et le cosinus de l'angle polaire  $\theta$  possède un petit inconvénient dû à la présence de 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 simulés 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). À l'équateur où  $\Delta z = \Delta\phi$  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 le long du 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.

Lorsque l'on doit faire face à un problème de pôles sur une variété l'idée générale est de plonger cette dernière dans un espace de plus grande dimension 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 deux 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 donné par l'expression :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}. \quad (116)$$

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 :

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

La répartition des points sur la sphère unité est effectivement uniforme et on montre en outre que les erreurs sont isotropes.

### A.2 Simuler 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 préférerons la

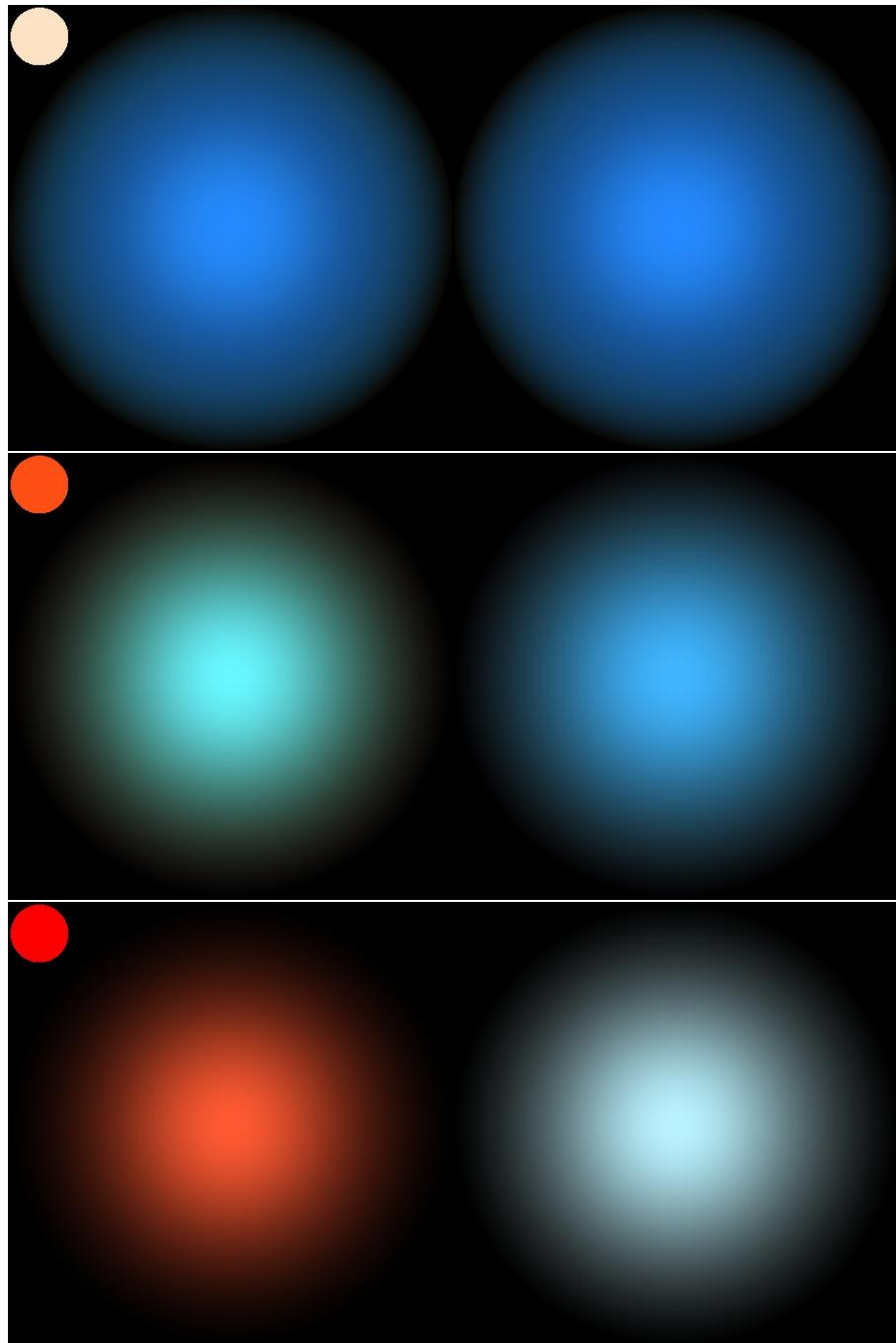


FIGURE 40 – Projection stéréographique de la diffusion Rayleigh dans une atmosphère plan-parallèle en tenant compte de la polarisation. Lumière diffusée (à gauche) et rétrodiffusée (à droite) pour, de bas en haut, des profondeurs optiques à  $\lambda = 440$  nm de  $\tau_B = 0.3, 3$  et  $30$ . Les images ont été normalisées séparément de façon à les rendre plus visibles.

méthode de Box et Miller basée sur le changement de variable d'un couple de variables aléatoires. Nous ne décrirons que le résultat sur lequel s'appuie cette méthode, on trouvera la théorie dans la référence [23] ou dans le cours de traitement des données (FC10).

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 :

$$X_1 = \sqrt{-2 \ln U_1} \cos(2\pi U_2), \quad X_2 = \sqrt{-2 \ln U_1} \sin(2\pi U_2), \quad (117)$$

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 [23]), les variables sont rangées dans le tableau  $X$ .

#### **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  
Reserver la place mémoire pour le tableau  $X(1:N_{\max})$   
 $0 \rightarrow N$ , mise à zéro du compteur des tirages  
.vrai. → tirage

##### **N1. Fini ?**

Si  $N \geq N_{\max}$ , arrêt  
 $N + 1 \rightarrow N$

##### **N2. Faut-il tirer deux valeurs successives ?**

Si (tirage) aller à **N4**.

##### **N3. On restitue le second tirage.**

$X_2 \rightarrow X(N)$   
.vrai. → tirage, il faudra refaire un double tirage  
aller à **N1**

##### **N4. Algorithme de Box et Miller.**

LoiUniforme(seed) →  $U_1$ ;  $\sqrt{-2 \ln U_1} \rightarrow \rho$   
LoiUniforme(seed) →  $U_2$ ;  $2\pi U_2 \rightarrow \arg$   
 $\rho \cos(\arg) \rightarrow X(N)$ ;  $\rho \sin(\arg) \rightarrow X_2$   
Note : la variable  $X_2$  doit être sauvegardée en mémoire.  
.faux. → 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 :

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

### A.3 Notes sur la FFT

La FFT ou *Fast Fourier Transform* est un algorithme qui s'exécute dans un temps de l'ordre de  $N \ln N$ , où  $N$  est la taille du tableau dont on fait la transformée de Fourier. Cette taille ne peut toutefois être quelconque, elle doit posséder une décomposition en facteur premiers particulière. En général on doit avoir  $N = 2^\alpha$ ,  $\alpha \geq 1$ , mais d'autres programmes acceptent  $N = 2^\alpha 3^\beta 5^\gamma$ ,  $\alpha \geq 1, \beta \geq 0, \gamma \geq 0$ , ou des décomposition encore moins restrictives. La transformée de Fourier s'applique à des fonctions à valeurs complexes, mais nous allons nous restreindre ici au cas réel. Enfin, nous allons écrire  $N = 2n$  puisque  $N$  doit toujours être pair.

En réalité la FFT n'exécute pas une transformée de Fourier, mais une décomposition en *série* de Fourier du signal dont on fait l'analyse ; de plus, le calcul n'est exact que si les harmoniques de cette série sont en nombre fini. Il faudra donc que la fonction  $f(t)$  sur laquelle opère la FFT soit de la forme

$$f(t) = \sum_{k=0}^n a_k \cos(k\omega t) + \sum_{k=1}^n b_k \sin(k\omega t), \quad (118)$$

ou, ce qui revient au même

$$f(t) = \sum_{k=-n}^n c_k e^{ik\omega t}. \quad (119)$$

La fonction  $f$  doit donc être périodique de période  $T \leq 2\pi/\omega$  (certains  $a_i$  ou  $b_i$  peuvent être nuls) et son spectre de fréquences doit être borné. On constate dans l'équation (118) qu'il y a  $n + 1$  coefficients pour les cosinus et  $n$  pour les sinus, ce qui fait  $2n+1$  au total. Si on évalue la fonction  $f$  en  $2n+1$  valeurs distinctes de  $t$ ,  $f_k = f(t_k)$ ,  $k = 1, \dots, 2n+1$ , on obtiendra grâce à l'équation (118) un système linéaire de  $2n + 1$  équations à  $2n + 1$  inconnues qu'il est, en principe, facile d'inverser. Cependant la résolution d'un système linéaire est sujette aux erreurs d'arrondis et s'exécute en un temps de l'ordre du cube du nombre de points. La FFT est numériquement plus stable et s'exécute bien plus rapidement.

**L'échantillonnage.** Pour atteindre cette efficacité, la FFT exige que les valeurs  $f_k$  soient en nombre  $N$  pair et résultent d'un échantillonnage à pas constant d'un nombre entier  $m$  de périodes. On doit avoir

$$f_k = f(t_0 + kh), \quad k = 0, \dots, N - 1 \text{ avec } Nh = mT.$$

En outre, le pas d'échantillonnage  $h$  doit être tel que la plus haute fréquence présente dans le signal doit être échantillonée à plus de deux points par période. Le pas d'échantillonnage égal à deux points dans la période la plus courte (fréquence la plus élevée) s'appelle le *pas de Shannon*. Nous le notons  $h_{\max}$ . Il existe un lien entre le pas d'échantillonnage, le pas de Shannon et la plus haute fréquence  $\nu_{\max}$  présente dans le signal, on doit avoir

$$h < h_{\max} = \frac{T_{\min}}{2} = \frac{1}{2\nu_{\max}}. \quad (120)$$

Il est important de noter que le pas d'échantillonnage doit être *plus petit* que le pas de Shannon. Si la fonction est échantillonnée au pas de Shannon, alors les coefficients de la composante de plus haute fréquence, s'ils ne sont pas nuls, seront erronés. Pour avoir accès aux coefficients  $a_n$  et  $b_n$  de l'équation (118), il faudra, par exemple, échantillonner plusieurs périodes ou, ce qui est une pratique commune, échantillonner une seule période à un pas égal à la moitié du pas de Shannon. Il faudra veiller à ce que le nombre de points qui résulte de l'échantillonnage soit compatible avec les contraintes imposées sur ce nombre par la FFT.

**Problèmes de normalisation.** Il n'y a pas accord sur la formulation exacte de la TF, les définitions diffèrent sur la valeur de la constante de normalisation et sur le signe de l'exponentielle complexe. Dans le domaine des probabilités, la TF est liée à la définition de la fonction caractéristique  $\phi$  de la variable aléatoire  $X$ . On a pour la TF directe

$$\phi(\omega) = E\{e^{i\omega X}\} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} f(x) dx,$$

où  $f$  est la densité de probabilité de  $X$ . La TF inverse est donnée par l'intégrale en valeur principale

$$\frac{1}{2}(f^+(x) + f^-(x)) = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L \phi(\omega) e^{-i\omega x} d\omega,$$

où  $\frac{1}{2}(f^+(x) + f^-(x))$  est la moyenne en  $x$  de la limite à droite et à gauche de la fonction. Si la fonction est continue en  $x$ , alors cette moyenne est égale à  $f(x)$ . Enfin, il faut savoir si le programme calcule la série de Fourier suivant l'équation (118) ou la transformée de Fourier suivant l'équation (119). Pour ces deux cas on a respectivement

$$\begin{aligned} a_0(f) &= \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) dt, \\ a_k(f) &= \frac{2}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) \cos(k\omega t) dt, \quad k \geq 1, \\ b_k(f) &= \frac{2}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) \sin(k\omega t) dt, \quad k \geq 1, \end{aligned} \quad (121)$$

et

$$c_k(f) = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(t) e^{ik\omega t} dt, \quad -n \leq k \leq n. \quad (122)$$

Avant d'effectuer des calculs scientifiques à l'aide d'un programme de FFT, il y a lieu de le tester afin de connaître les conventions qu'il adopte et la précision qu'il peut atteindre.

### A.3.1 Le programme TF9Q

Le programme TF9Q a été traduit en Fortran 95 à partir d'un programme Fortran IV datant des années 1980. Il admet cinq arguments dans l'appel : TF9Q(N,inv,Y,CC,CS).

**N** est le nombre de points avec lesquels la fonction  $f$  a été échantillonnée. On doit avoir  $N = 2^\alpha 3^\beta 5^\gamma$ , avec  $\alpha \geq 1, \beta \geq 0$  et  $\gamma \geq 0$ . Afin de satisfaire au critère de Shannon, on doit avoir  $N > 2mn$  où  $n$  est l'indice le plus élevé de la composante de Fourier non nulle et  $m$  est le nombre de périodes échantillonnées. Il est recommandé que  $N$  soit au moins deux fois plus grand que la limite donnée par le critère de Shannon. Soit  $N \geq 4mn$ .

**inv** est un paramètre qui vaut 0 ou 1. Il vaut 0 si on calcule les coefficients  $a_k$  et  $b_k$  suivant les équations (121) et il vaut 1 si, on effectue une synthèse suivant les formules (118).

**Y** est le tableau des données échantillonnées de la fonction  $f$ , sa dimension doit être au moins égale à  $N + 3$ .

**CC** est le tableau contenant les coefficients  $a_k$  des cosinus, sa dimension doit être au moins égale à  $N + 3$ .

**CS** est le tableau contenant les coefficients  $b_k$  des sinus, sa dimension doit être au moins égale à  $N/2 + 3$ .

### A.3.2 Le programme FFTW

Le programme FFTW (fastest Fourier transform in the west) est un programme écrit en C par Matteo Frigo et Steven G. Johnson, sa documentation se trouve à l'adresse <http://www.fftw.org/>.

## A.4 Marches au hasard

L'étude des marches au hasard constitue un chapitre de la théorie des probabilités qui entretient d'étroits rapports avec le mécanisme de la diffusion des particules. Bien des processus complexes de diffusion peuvent être mieux appréhendés grâce à l'étude des caractéristiques de modèles simples de marches au hasard. Parmi celles-ci, figure le déplacement aléatoire d'un mobile astreint à rester sur un axe en ne pouvant y occuper que les valeurs entières  $z \in \mathbb{Z}$ .

### A.4.1 La marche simple 1D sur $\mathbb{Z}$

Suivant ce modèle, un mobile commence une marche aléatoire en  $z_0 \in \mathbb{Z}$  et effectue un pas positif  $z_1 = z_0 + 1$  avec la probabilité  $p$  ou un pas négatif  $z_1 = z_0 - 1$  avec la probabilité  $q$ . Soit  $Z_i$  la variable aléatoire qui vaut  $+1$  si le pas numéro  $i$  est positif et  $-1$  s'il est négatif. Au bout de  $n$  pas le mobile se trouvera à l'abscisse  $S_n = z_0 + \sum_{i=1}^n Z_i$ . Les  $Z_i$  sont des variables aléatoires indépendantes, elles possèdent la moyenne  $\mu = p - q$  et la variance  $\sigma^2 = 1 - \mu^2 = 4pq$ . La variable  $S_n$  possède alors la moyenne  $\mu_n = z_0 + n\mu$  et la variance  $\sigma_n^2 = n(1 - \mu^2) = 4npq$ . D'après le théorème central limite, si la marche n'est pas bornée la variable réduite  $(S_n - \mu_n)/\sigma_n$  tend en loi, lorsque  $n \rightarrow \infty$ , vers une loi normale de moyenne 0 et de variance 1. On trouvera d'autres résultats classiques concernant les marches simples nD en consultant l'ouvrage introductif de J. Klafter et I.M. Sokolov [16]. Les marches simples peuvent rendre compte du phénomène de la diffusion dans un milieu infini.

### A.4.2 Marches bornées de type « ruine du joueur »

Le problème de la diffusion dans un milieu plan-parallèle fini s'apparente à une marche au hasard où le mobile est astreint à se déplacer sur les entiers compris entre deux bornes situées en  $z = 0$  et  $z = t > 0$ . Le comportement du mobile lorsqu'il atteint une borne est dicté par la nature de la borne. Nous ne considérerons ici que les bornes *absorbantes*, ce sont celles où le mobile s'arrête dès qu'il les atteint, c'est à ce type de bornes que correspond le problème de la ruine du joueur. Dans cette interprétation, l'abscisse  $z$  représente le capital du joueur; lorsque le mobile parvient en  $z = 0$  le joueur est ruiné, lorsqu'il atteint  $z = t$ , son adversaire est ruiné. Lorsque  $t \rightarrow \infty$ , le joueur s'affronte à un adversaire infinitement riche. Pour les problèmes de diffusion dans un milieu plan-parallèle, le premier cas correspond à la diffusion entre deux plans et le second à la diffusion dans un milieu semi-infini. Dans un cadre plus général, on peut envisager des bornes réfléchissantes ou élastiques.

On s'intéresse tout d'abord au problème du passage du mobile en  $z = 0$  à partir de  $z = k$ , dans la limite où  $t = \infty$ .

### A.4.3 Le premier passage à zéro

On cherche en premier lieu à calculer le nombre de trajets  $T$  conduisant en  $n$  pas depuis l'abscisse  $z = k$ ,  $k > 0$  jusqu'à  $z = 0$ . L'unique barrière est placée en  $z = 0$ , elle est absorbante. Le nombre  $T$  est donné par la formule (dont la démonstration se trouve à la fin de ce chapitre)

$$T(n, k) = \frac{2k}{n+k} \binom{n-1}{(n-k)/2} = \frac{k}{n} \binom{n}{(n-k)/2}, \quad (123)$$

où  $n$  et  $k$  doivent avoir la même parité. Afin d'éviter d'avoir à formuler cette restriction, on exprime  $T$  à l'aide du nombre de pas positifs  $p$  présents dans le chemin.<sup>8</sup> On obtient alors

$$T(k+2p, k) = \frac{k}{k+p} \binom{k+2p-1}{p} = \frac{k}{k+p} \frac{\Gamma(k+2p)}{\Gamma(p+1)\Gamma(k+p)}.$$

8. On notera la différence de fonte entre  $p$  la probabilité d'effectuer un pas positif et  $p$  le nombre de pas de ce type; de même pour  $q$  et  $q$ .

$k$	-9	-8	-7	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	$n$
	0	0	0	0	0	-1			1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1
	.	.	.	.	.	-1		-1	0	1	1	1	.	.	.	.	.	.	.	2
	.	.	.	.	.	-1	-2	0	2	1	1	.	.	.	.	.	.	.	.	3
	.	.	.	.	.	-1	-3	-2	0	2	3	1	.	.	.	.	.	.	.	4
	.	.	.	.	.	-1	-4	-5	0	5	4	1	.	.	.	.	.	.	.	5
	.	.	.	.	.	-1	-5	-9	-5	5	9	5	1	.	.	.	.	.	.	6
	.	.	.	.	.	-1	-6	-14	-14	0	14	14	6	1	.	.	.	.	.	7
	.	.	.	.	.	-1	-7	-20	-28	-14	14	28	20	7	1	.	.	.	.	8
	.	.	.	.	.	-1	-7	-20	-28	-14	14	28	20	7	1	.	.	.	.	9

TABLE 4 – Nombre de chemins partant de l'épaisseur  $k$  et atteignant la surface (l'origine) en  $n$  pas. En vert pour  $k > 0$  et en rouge pour  $k < 0$ . Par exemple, en partant de l'épaisseur  $k = 3$ , on rejoint la surface en suivant 28 chemins différents de longueur  $n = 9$ . Les valeurs de la ligne  $n = 1$  sont les conditions aux contours du schéma  $T(n,k)=T(n-1,k-1)+T(n-1,k+1)$ . Les données remplacées par des points sont des zéros.

Pour des raisons numériques, il est préférable d'évaluer  $T$  de la façon suivante

$$T(k + 2p, k) = \frac{k}{k + p} \exp(\ln \Gamma(k + 2p) - \ln \Gamma(p + 1) - \ln \Gamma(k + p)).$$

En introduisant le nombre de pas négatifs  $q = n - p$ , on obtient la formule équivalente

$$T(q + p, q - p) = \frac{q - p}{q + p} \binom{q + p}{p}.$$

On donne à présent deux démonstrations de la formule (123).

*Démonstration.* Soit  $T(n, k)$  le nombre de chemins de longueur  $n$  parcouru par le mobile partant de l'abscisse  $k$  et devant rejoindre l'origine. Une fois l'origine atteinte, le mobile s'arrête. On se limite, dans un premier temps, aux valeurs positives de  $k$ .

Soit  $p$  le nombre de pas positifs, c'est-à-dire s'éloignant de l'origine. Ils doivent être compensés par autant de pas négatifs on doit alors avoir  $n = k + 2p$ . Par conséquent  $k$  et  $n$  ont la même parité.

À partir de la position  $(n, k)$ , on peut rejoindre  $(n - 1, k - 1)$  ou  $(n - 1, k + 1)$ . Le nombre de chemins  $T(n, k)$  est alors la somme des nombres de chemins qui partent de ces deux points

$$T(n, k) = T(n - 1, k - 1) + T(n - 1, k + 1), \quad (124)$$

pourvu que  $n - 1 \geq 1$  et  $k - 1 \geq 0$ . Afin d'éviter cette indétermination, il est nécessaire d'établir le nombre de chemins issus de cette ligne  $n = 1$  et de cette colonne  $k = 0$ . Ces valeurs sont les conditions « au contour » imposées par le problème. On a pour  $n = 1$

$$T(1, 1) = 1, \text{ et pour } k = 2p + 1 > 1, T(1, 2p + 1) = 0, \quad (125)$$

et pour  $k = 0$

$$T(2p, 0) = 0. \quad (126)$$

Les équations (124) à (126) permettent de construire progressivement la table des  $T(n, k)$  à partir de la ligne  $n = 1$  comme indiqué sur la table 4.

On peut être tenté d'établir la formule récursive d'ordre  $n - 1$  construite à partir des valeurs de la ligne  $n = 1$  et des coefficients du binôme. Cela présenterait un avantage certain car la ligne  $n = 1$  n'a qu'une seule valeur non nulle  $T(1, 1)$  qui vaut 1. On obtiendrait, en notant que lorsque  $p$  varie d'une unité,  $k$  varie de deux

$$T(n, k) = \sum_{p=0}^{n-1} \binom{n-1}{p} T(1, k - (n-1) + 2p). \quad (127)$$

Mais en propageant ainsi, vers l'arrière, le triangle de Pascal, on arrive toujours, sauf si  $k = n$ , à aller chercher des valeurs de  $T$  non définies correspondant à des  $k$  négatifs. Il est cependant possible de donner un sens à ces valeurs.

Considérons le problème symétrique, c'est-à-dire celui qui consiste à compter le nombre de chemins de longueur  $n$  qui rejoignent l'origine à partir d'abscisses  $k$  négatives. Il obéit au même schéma récursif (124), auquel il faut ajouter des conditions initiales identiques à celle du problème original, à ceci près que nous les changeons de signe. Soit

$$T(1, -1) = -1, \text{ et pour } k = 2p + 1 < -1, T(1, 2p + 1) = 0.$$

On a choisi de compter négativement ces chemins, de manière à ce que, par antisymétrie, on ait  $T(n, -k) = -T(n, k)$  et  $T(n, 0) = 0$ . De cette façon la condition sur la colonne  $k = 0$  est préservée et par là même devient inutile. Le problème antisymétrisé n'admet plus que la seule condition au contour

$$T(1, -1) = -1, T(1, 1) = 1, \text{ et pour } |2p + 1| > 1, T(1, 2p + 1) = 0.$$

La formule (127) a maintenant un sens et on obtient pour un certain  $m$  et un certain  $p$

$$T(n, k) = \binom{m}{p} T(1, 1) + \binom{m}{p-1} T(1, -1) = \binom{m}{p} - \binom{m}{p-1}.$$

Le nombre  $m$  est le nombre d'étapes nécessaires pour atteindre la ligne 1, soit  $m = n - 1$  et  $p$  est l'indice dans (127) tel que  $k - (n - 1) + 2p = 1$ , soit  $p = (n - k)/2$ . La division par 2 ne pose pas de problème car  $n$  et  $k$  ont la même parité. En remarquant que  $\binom{m}{p-1} = \frac{p}{m-p+1} \binom{m}{p}$ , on en déduit la formule cherchée

$$T(n, k) = \frac{2k}{n+k} \binom{n-1}{(n-k)/2}.$$

□

Nous venons de démontrer que le nombre  $T$  pouvait aussi s'écrire  $\binom{n-1}{p} - \binom{n-1}{p-1}$  où  $p$  est le nombre de pas positifs. Nous allons donner une seconde démonstration aboutissant à cette formule en s'inspirant d'un théorème de Bertrand concernant les bulletins de votes (voir, par exemple, Feller [5] §III.2).

*Démonstration.* La particule se déplace sur l'axe  $z$  de  $z = k$  à  $z = 0$  en atteignant 0 pour la première fois (ceci constitue la contrainte). Pour cela elle effectue  $p$  pas positifs et  $q$  pas négatifs. On pose  $n = p + q$ . Nous allons considérer le problème inverse : la particule se déplace à partir de  $z = 0$  pour atteindre  $z = k$  en effectuant  $q$  pas positifs et  $p$  pas négatifs (en changeant de sens, les pas sont inversés).

Le nombre de chemins allant de  $z = 0$  à  $z = k$  avec contrainte est égal au nombre de chemins allant, toujours avec contrainte, de  $z = 1$  à  $z = k$  car il n'y a qu'une seule manière d'aller de 0 à 1 tout en respectant la contrainte.

Nous allons calculer  $T(p + q, k)$  comme différence entre tous les chemins allant de  $z = 1$  à  $z = k$  sans contrainte moins tous ceux qui retournent à  $z = 0$  au moins une fois avant d'atteindre  $z = k$ . Les premiers sont en nombre  $\binom{n-1}{p}$  car il s'agit de répartir  $p$  pas négatifs parmi les  $n - 1$  pas qui restent à accomplir.

Pour les seconds, on considère le nombre de pas  $t$  effectués par le mobile lorsqu'il retourne à  $z = 0$  pour la première fois. On change alors la direction de ces  $t$  premiers pas. Dans ces conditions, tout se passe comme si le mobile était parti de  $z = -1$ . Réciproquement, tous les mobiles qui partent de  $z = -1$  et qui vont à  $z = k$  passent par  $z = 0$  au moins une fois. Le nombre de chemins recherchés est alors égal au nombre de chemins qui vont de  $z = -1$  à  $z = k$ . Ils sont en nombre  $\binom{n-1}{p-1}$ , car il s'agit de répartir  $p - 1$  pas négatifs (un pas négatif a été effectué pour aller de  $z = 0$  à  $z = -1$ ) parmi les  $n - 1$  qui restent. La formule est démontrée. □

#### A.4.4 Calculs à l'aide de la fonction caractéristique

La fonction caractéristique  $\phi(\omega)$  associée à la variable aléatoire  $Z$  est l'espérance des complexes de module unité  $e^{i\omega Z}$ . Par définition

$$\phi(\omega) = E\{e^{i\omega Z}\}. \quad (128)$$

La fonction caractéristique est, comme d'autres outils du même genre, un moyen commode de manipuler, dans un seul objet, les probabilités affectées à un processus donné, tout en bénéficiant des propriétés de la transformation qui définit cette fonction. Parmi celles-ci, on dispose du résultat, fort utile, qui dit que la fonction caractéristique d'une somme des variables aléatoires indépendantes est le produit de leurs fonctions caractéristiques. Nous allons illustrer ce point en reconstruisant le problème du premier passage à zéro. Le mobile part de la position  $z = k$  et au bout de  $n$  pas se retrouve à la position  $Z = k + \sum_{j=1}^n Z_j$ . Les variables aléatoires  $Z_j$  prennent les valeurs  $+1$  et  $-1$  avec la probabilité  $\frac{1}{2}$ . Les fonctions caractéristiques  $\phi_j$  de  $Z_j$  sont

$$\phi_j(\omega) = \frac{1}{2} e^{i\omega(-1)} + \frac{1}{2} e^{i\omega(+1)} = \cos \omega.$$

La somme des  $Z_i$  possède alors la fonction caractéristique  $\cos^n \omega$ . La constante  $k$  ne possède qu'une valeur avec la probabilité un, sa fonction caractéristique est donc  $e^{i\omega k}$ . On en déduit la fonction caractéristique de  $Z$

$$\phi(Z) = (\cos \omega)^n e^{i\omega k}. \quad (129)$$

La fonction  $\phi$  est périodique, il lui correspond une série de Fourier dont le coefficient d'ordre  $q$  représente la probabilité pour que le mobile partant de  $z = k$  se retrouve à  $z = q$  au bout de  $n$  pas. Son expression est donnée par la formule d'inversion de Fourier

$$\Pr\{Z = q\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \phi(\omega) e^{-i\omega q} d\omega.$$

En posant  $q = 0$  et en remplaçant  $\phi(\omega)$  par sa valeur, on trouve

$$\Pr\{Z = 0\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^n \omega (\cos k\omega + i \sin k\omega) d\omega,$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^n \omega \cos k\omega d\omega.$$

Cette intégrale doit être égale à  $\frac{1}{2^n} \binom{n}{(n-k)/2}$ , où  $\binom{n}{(n-k)/2}$  est le nombre de chemins qui aboutissent à  $z = 0$ , sans la contrainte que ce soit pour la première fois. Le nombre de pas  $n$  est nécessairement de la forme  $n = 2p + k$ , où  $p = (n - k)/2$  est le nombre de pas positifs à répartir parmi  $n$  pas. (On note que l'on retrouve ainsi la formule 3.631.17 de l'ouvrage de Gradshteyn & Ryzhik [6] :  $\int_0^\pi \cos^n x \cos kx dx = \frac{\pi}{2^n} \binom{n}{(n-k)/2}$ , avec  $k \leq n$ ,  $(n - k) = 2p$ .)

On obtient la probabilité du premier retour à l'origine en multipliant cette intégrale par  $k/n$  comme démontré plus haut.

$$\Pr\{Z = 0 | 1^{\text{re}} \text{ fois}\} = \frac{k}{n} \Pr\{Z = 0\}.$$

Notons  $u_{k,n}$  cette probabilité conditionnelle. Il vient

$$\begin{aligned} u_{k,n} &= \frac{k}{n} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^n \omega \cos k\omega d\omega, \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^{n-1} \omega \sin \omega \sin k\omega d\omega. \end{aligned} \quad (130)$$

avec  $n \geq k$  et  $n$  et  $k$  de même parité. La dernière égalité s'obtient après une intégration par parties. Si  $b_{k,n}$  désigne le  $k^{\text{e}}$  coefficient de la série de Fourier de la fonction  $\cos^{n-1} \omega \sin \omega$ , on peut écrire

$$u_{k,n} = \frac{1}{2} b_{k,n}. \quad (131)$$

Il est plus rapide, et probablement plus stable, d'effectuer une transformée de Fourier plutôt que de calculer numériquement des coefficients du binôme.

#### A.4.5 La fonction génératrice

La fonction génératrice associée à la suite de nombres  $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$  est la série entière  $\sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n$ . Cette disposition est une façon commode de manipuler globalement l'ensemble des éléments de la suite de nombres. La série ne joue qu'un rôle formel, et il n'est pas nécessaire que la série converge pour en faire usage. Il est, par exemple possible de définir l'addition de deux fonctions génératrices sans se préoccuper des problèmes de convergence. La somme est définie de la façon suivante :  $\sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n + \sum_{n=0}^{\infty} b_n s^n = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n + b_n) s^n$ . L'ouvrage de H. Wilf [31] *generatingfunctionology* est entièrement consacré aux multiples applications de cette fonction.

#### A.4.6 La fonction génératrice du retour à l'origine

Nous allons maintenant considérer une marche au hasard<sup>9</sup> où le mobile se déplace sur les entiers compris entre deux barrières absorbantes situées en  $z = 0$  et  $z = t$ . Au départ, le mobile est en  $z = k$ ,  $0 < k < t$ ,

**Marche RW2.** Dans cette marche, le mobile possède la probabilité  $p$  d'effectuer un pas  $\Delta z = +1$ , et la probabilité  $q$  d'effectuer un pas  $\Delta z = -1$ .

Soit  $u_{k,n}$  la probabilité que le mobile atteigne l'origine en  $z = 0$  pour la première fois au bout de  $n$  pas. (Par convention, on posera  $u_{k,n} = 0$  si  $n < 0$ .) Après un pas, il reste au mobile la possibilité de rejoindre 0 en  $n - 1$  pas depuis les abscisses  $z + 1$  ou  $z - 1$ . Il vient

$$u_{k,n} = p u_{k+1,n-1} + q u_{k-1,n-1}. \quad (132)$$

Équation à laquelle il faut ajouter la condition de succès : « le mobile a effectué  $n$  pas et il est arrivé en 0 », soit

$$u_{0,0} = 1, \quad (133)$$

et celles qui indiquent l'échec : « le mobile doit encore effectuer  $l$  pas,  $l > 0$ , et il est déjà arrivé en  $z = 0$  ou  $z = t$  », soit

$$u_{0,l} = u_{t,l} = 0, \quad l > 0, \quad (134)$$

ou : « le mobile a effectué  $n$  pas, il est en  $z$  mais  $z \neq 0$  », soit

$$u_{z,0} = 0, \quad z > 0. \quad (135)$$

On introduit  $U_k(s)$ , la fonction génératrice des  $u_{k,n}$ , dont la définition est

$$U_k(s) = \sum_{n=0}^{\infty} u_{k,n} s^n. \quad (136)$$

9. Ce chapitre s'inspire du chap. XIV.4 de l'ouvrage de Feller [5].

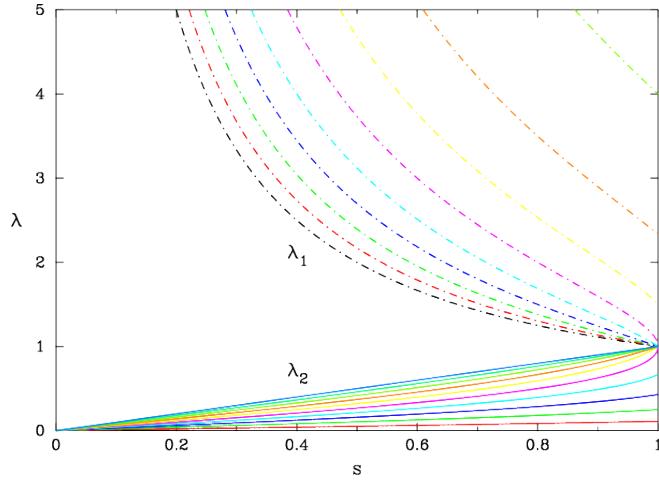


FIGURE 41 – Courbes des valeurs de  $\lambda_1$  (ligne brisée) et  $\lambda_2$  (trait plein) en fonction de  $s$ , pour différentes valeurs de  $p$ . En noir on a  $p = 1$ , puis en rouge  $p = 0.9$ , en vert  $p = 0.8$  etc.

Il vient à partir de (132) et pour  $0 < k < t$

$$\begin{aligned} U_k(s) &= \sum_{n=0}^{\infty} (pu_{k+1,n-1} + qu_{k-1,n-1})s^n, \\ &= p \sum_{n=1}^{\infty} u_{k+1,n-1}s^n + q \sum_{n=1}^{\infty} u_{k-1,n-1}s^n, \\ &= ps \sum_{n=1}^{\infty} u_{k+1,n-1}s^{n-1} + qs \sum_{n=1}^{\infty} u_{k-1,n-1}s^{n-1}, \\ &= ps \sum_{n=0}^{\infty} u_{k+1,n}s^n + qs \sum_{n=0}^{\infty} u_{k-1,n}s^n, \end{aligned}$$

d'où

$$U_k(s) = psU_{k+1}(s) + qsU_{k-1}(s), \quad (137)$$

et à partir des conditions aux contours (133), (134) et (135)

$$U_0(s) = \sum_{n=0}^{\infty} u_{0,n}s^n = 1, \quad (138)$$

$$U_t(s) = \sum_{n=0}^{\infty} u_{t,n}s^n = 0. \quad (139)$$

L'équation (137) est une équation de récurrence homogène. L'ensemble de ses solutions forme un espace vectoriel de dimension 2 dont il faut trouver deux vecteurs de base. Ces vecteurs de base sont des solutions particulières de (132). La méthode habituelle pour résoudre ce genre de problème consiste à « deviner » la forme des solutions, puis de les valider à l'aide de l'équation de récurrence et des conditions aux contours. Suivant ce principe, on cherchera ces solutions sous la forme  $U_k(s) = \lambda^k(s)$ . Lorsqu'on place  $\lambda^k(s)$  dans (137), on obtient

$$\lambda(s) = ps\lambda^2(s) + qs = 0.$$

qui est une équation du second degré en  $\lambda$

$$ps\lambda^2(s) - \lambda(s) + qs = 0. \quad (140)$$

Soient  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  les deux racines de cette équation. On a

$$\lambda_1(s) = \frac{1}{2ps} (1 + (1 - 4pq s^2)^{\frac{1}{2}}), \quad \lambda_2(s) = \frac{1}{2ps} (1 - (1 - 4pq s^2)^{\frac{1}{2}}). \quad (141)$$

Ce sont, pour  $0 < s < 1$ , deux solutions linéairement indépendantes réelles de l'équation de récurrence. Ces fonctions admettent les valeurs limites  $\lambda_1(0) = \infty$  et  $\lambda_2(0) = 0$ . Par ailleurs si  $p \leq 0.5$ , alors  $\lambda_1(1) = q/p$  et  $\lambda_2(1) = 1$ , et si  $p \geq 0.5$ , alors  $\lambda_1(1) = 1$  et  $\lambda_2(1) = p/q$ . Entre ces deux valeurs  $\lambda_1$  est monotone décroissante et  $\lambda_2$  monotone croissante (voir figure 41). En effet de (141) on tire  $p\lambda^2 + \lambda'(2p\lambda - 1) + q = 0$ , d'où  $\lambda'_1 = -(1 - 4pq s^2)^{\frac{1}{2}}/(p\lambda^2 + q) < 0$  et le signe opposé pour  $\lambda_2$ . Par conséquent, dans l'intervalle  $0 < s < 1$  où la série converge, on a  $\lambda_1 > 1$  et  $\lambda_2 < 1$ .

La fonction génératrice prend alors la forme

$$U_k(s) = A(s)\lambda_1^k(s) + B(s)\lambda_2^k(s), \quad (142)$$

où les constantes  $A$  et  $B$  sont déterminées par les conditions aux contours. La condition  $U_0(s) = 1$  donne  $A(s) + B(s) = 1$  et  $U_t(s) = 0$  donne  $A(s)\lambda_1^t(s) + B(s)\lambda_2^t(s) = 0$ . On en déduit

$$U_k(s) = \frac{\lambda_2^t(s)\lambda_1^k(s) - \lambda_1^t(s)\lambda_2^k(s)}{\lambda_2^t(s) - \lambda_1^t(s)}. \quad (143)$$

D'après l'équation (140) on a  $\lambda_1\lambda_2 = q/p$ , ce qui permet d'écrire les solutions sous la forme

$$U_k(s) = \left(\frac{q}{p}\right)^k \frac{\lambda_2^{t-k}(s) - \lambda_1^{t-k}(s)}{\lambda_2^t(s) - \lambda_1^t(s)}. \quad (144)$$

Dans le cas où la barrière  $z = t$  est rejetée à l'infini, étant donné que  $\lambda_1 > 1$  et  $\lambda_2 < 1$ , l'équation (142) diverge avec  $\lambda_1(s)$ , à moins que  $A(s)$  soit nul. Si  $A = 0$ , alors  $B = 1$ , ce qui détermine entièrement la fonction génératrice  $V_k(s)$  de ce problème particulier

$$V_k(s) = \lambda_2^k(s) = [\frac{1}{2ps}(1 - (1 - 4pq s^2)^{\frac{1}{2}})]^k. \quad (145)$$

On remarque que  $V_k(1)$  est la probabilité pour que le mobile atteigne  $z = 0$  en partant de  $z = k$  après avoir effectué un nombre de pas quelconque. On a  $V_k(1) = [\frac{1}{2p}(1 - (1 - 4pq)^{\frac{1}{2}})]^k$ , et pour une marche symétrique  $p = q = \frac{1}{2}$ , le mobile atteint  $z = 0$  avec la probabilité 1, la marche est dite *récurrente*. Cela revient à dire que, dans un jeu équitable, la ruine du joueur contre un adversaire infiniment riche est certaine ou, que dans un problème de diffusion isotrope dans un milieu semi-infini simulé par RW2, la particule parvient toujours à s'échapper.

**Calcul des  $u_{k,n}$  de RW2.** La forme explicite (141) des fonctions  $\lambda_{1,2}$  permet de donner une expression analytique aux probabilités  $u_{k,n}$  dans le cas où il existe deux barrières absorbantes en  $z = 0$  et  $z = t$ . Le calcul commence en écrivant

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{p}{q}\right)^{\frac{1}{2}} \lambda_{1,2}, \\ &= \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2(pq)^{\frac{1}{2}}s} (1 \pm (1 - 4pq s^2)^{\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

On procède alors au changement de variable

$$\frac{1}{\cos \theta} = 2(pq)^{\frac{1}{2}}s. \quad (146)$$

Le changement n'est valide que pour les valeurs de  $s$  où la série définissant  $U_k(s)$  ne converge pas. Ce fait est sans importance car  $s$  ne joue ici qu'un rôle formel d'intermédiaire de calcul. Au cours de la démonstration, il n'est jamais nécessaire de calculer  $U_k(s)$  explicitement. Après avoir écarté ce scrupule, il vient

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta (1 \pm (1 - 1/\cos^2 \theta)^{\frac{1}{2}}), \\ &= \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta (1 \pm (-\sin^2 \theta / \cos^2 \theta)^{\frac{1}{2}}), \\ &= \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} (\cos \theta \pm i \operatorname{sgn}(\tan \theta) \sin \theta) = \operatorname{sgn}(\tan \theta) \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\pm i\theta}. \end{aligned}$$

(On note que le signe à attribuer à  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  dépend du signe de  $\tan \theta$ , mais le résultat qui suit n'en dépendra pas.) Reportons ces valeurs de  $\lambda_{1,2}$  dans l'expression (144) de la fonction génératrice  $U_k$ . Il vient

$$U_k(s) = \left(\frac{q}{p}\right)^{k+\frac{t-k}{2}-\frac{t}{2}} \frac{e^{\mp i(t-k)\theta} - e^{\pm i(t-k)\theta}}{e^{\mp it\theta} - e^{\pm i\theta}},$$

d'où l'expression de la fonction génératrice

$$U_k(s) = \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{k}{2}} \frac{\sin(t - k)\theta}{\sin t\theta}. \quad (147)$$

La fonction  $U_k$  se trouve être une fraction rationnelle et, à partir de sa décomposition en éléments simples, on trouve pour  $n > 1$

$$u_{k,n} = 2^n p^{\frac{1}{2}(n-k)} q^{\frac{1}{2}(n+k)} \sum_{\nu=1}^{t-1} \frac{1}{t} \cos^{n-1} \left( \nu \frac{\pi}{t} \right) \sin \left( \nu \frac{\pi}{t} \right) \sin \left( k\nu \frac{\pi}{t} \right). \quad (148)$$

Lorsque la barrière  $t$  tend vers l'infini, la somme tend vers une intégrale. En posant  $\Delta\omega = \frac{\pi}{t}$ , on obtient

$$u_{k,n} = 2^n p^{\frac{1}{2}(n-k)} q^{\frac{1}{2}(n+k)} \lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \sum_{\nu=1}^{\frac{\pi}{\Delta\omega}-1} \frac{\Delta\nu}{\pi} \cos^{n-1}(\nu\Delta\omega) \sin(\nu\Delta\omega) \sin(k\nu\Delta\omega),$$

$$= 2^n p^{\frac{1}{2}(n-k)} q^{\frac{1}{2}(n+k)} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos^{n-1} \omega \sin \omega \sin k\omega d\omega. \quad (149)$$

On retrouve ainsi, dans un cadre plus général, la formule (130) calculée dans le cas particulier  $p = q = \frac{1}{2}$ . On donne à présent la démonstration de la formule (148).

*Démonstration.* On introduit les polynômes de Tchebychev de seconde espèce  $U_n$  :  $U_0(x) = 1$ ,  $U_1(x) = 2x$  et  $U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x)$ . Le polynôme  $U_n$  est de degré  $n$  et le terme de plus bas degré est  $(n+1)x$  pour  $n$  impair et 1 pour  $n$  pair. Parmi les propriétés de ces polynômes, on a

$$U_n(\cos \theta) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}.$$

Il vient alors

$$U_k(s) = \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{k}{2}} \frac{\sin(t-k)\theta}{\sin t\theta} = \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{k}{2}} \frac{U_{t-k-1}(\cos \theta)}{U_{t-1}(\cos \theta)}.$$

La fonction  $U_k$  est donc une fraction rationnelle en  $\cos \theta$  et donc, également en  $s^{-1}$ . En multipliant son numérateur et son dénominateur par  $s^{t-1}$ , on obtient une fraction rationnelle en  $s$ . Le degré du numérateur peut excéder celui du dénominateur d'une valeur au plus égale à un si  $t - k - 1$  est pair et  $t - 1$  est impair. Par ailleurs, les polynômes de Tchebychev ne possèdent pas de racines multiples. La décomposition de la fraction rationnelle  $U_k$  s'écrit alors de façon générale

$$U_k(s) = As + B + \sum_{\nu} \frac{\gamma_{\nu}}{s_{\nu} - s}, \quad (150)$$

où la somme s'étend à toutes les racines  $s_{\nu}$  du dénominateur. Les coefficients  $A$  et  $B$  peuvent être nuls. Les racines de  $U_n(x)$  sont  $x_{\nu} = \cos(\nu \frac{\pi}{n+1})$ ,  $\nu = 1, \dots, n$ , par conséquent celles du dénominateur sont  $\cos \theta_{\nu} = \cos(\nu \frac{\pi}{t})$ ,  $\nu = 1, \dots, t-1$ . Pour calculer les racines  $s_{\nu}$ , il faut exclure la valeur  $\theta_{\nu} = \pi/2$  qui rend  $s_{\nu}$  infini. Cette éventualité se présente lorsque  $t$  est pair et  $\nu = t/2$ . Il vient

$$s_{\nu} = [2(pq)^{\frac{1}{2}} \cos\left(\nu \frac{\pi}{t}\right)]^{-1}, \quad \nu = 1, \dots, \lfloor \frac{1}{2}t \rfloor - 1, \lfloor \frac{1}{2}t \rfloor + 1, \dots, t-1.$$

Afin d'obtenir les  $\gamma_{\nu}$  on multiplie l'équation (150) par  $s_{\nu} - s$  et on fait tendre  $s$  vers  $s_{\nu}$  (ou  $\theta$  vers  $\theta_{\nu}$ ). On obtient, à la limite, une forme  $\frac{0}{0}$

$$\gamma_{\nu} = \lim_{s \rightarrow s_{\nu}} \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} (s_{\nu} - s) \frac{\sin(t-k)\theta}{\sin t\theta}.$$

L'application de la règle de l'Hôpital conduit à

$$\begin{aligned} \gamma_{\nu} &= \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} \lim_{s \rightarrow s_{\nu}} \left[ \frac{-\sin(t-k)\theta}{t \cos t\theta \frac{d\theta}{ds}|_{s=s_{\nu}}} + (s_{\nu} - s) \frac{(t-k) \cos(t-k)\theta}{t \cos t\theta} \right], \\ &= \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} \frac{-\sin((t-k)\nu \frac{\pi}{t})}{t \cos \nu \pi} \frac{ds}{d\theta} \Big|_{s=s_{\nu}}, \\ &= \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} \frac{-(\sin \nu \pi \cos k\nu \frac{\pi}{t} - \cos \nu \pi \sin k\nu \frac{\pi}{t})}{t \cos \nu \pi} \frac{ds}{d\theta} \Big|_{s=s_{\nu}}, \\ &= \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} \frac{1}{t} \sin\left(k\nu \frac{\pi}{t}\right) \frac{ds}{d\theta} \Big|_{s=s_{\nu}}. \end{aligned}$$

Pour évaluer  $u_{k,n}$ , il convient de faire la somme de tous les termes d'ordre  $n$  dans le développement des

$$\frac{\gamma_{\nu}}{s_{\nu} - s} = \frac{\gamma_{\nu}}{s_{\nu}} \left( 1 + \frac{s}{s_{\nu}} + \frac{s^2}{s_{\nu}^2} + \dots \right).$$

Cette procédure est valide pour tous les  $n$  sauf pour  $n = 0$  et  $n = 1$  car dans (150) les constantes  $A$  et  $B$  n'ont pas été évaluées. Il vient

$$u_{k,n} = \sum_{\nu} \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} \frac{1}{t} \sin\left(k\nu \frac{\pi}{t}\right) \frac{ds}{d\theta} \Big|_{s=s_{\nu}} \frac{1}{s_{\nu}^{n+1}}. \quad (151)$$

D'après le changement de variable (146), on obtient

$$s_{\nu} = (2(pq)^{\frac{1}{2}} \cos \nu \frac{\pi}{t})^{-1} \quad \text{et} \quad \frac{ds}{d\theta} \Big|_{s=s_{\nu}} = \frac{1}{2(pq)^{\frac{1}{2}}} \frac{\sin \theta_{\nu}}{\cos^2 \theta_{\nu}}, \quad \theta_{\nu} = \nu \frac{\pi}{t},$$

d'où

$$\begin{aligned} u_{k,n} &= \left( \frac{q}{p} \right)^{\frac{k}{2}} \sum_{\nu} \frac{1}{t} \sin\left(k\nu \frac{\pi}{t}\right) \frac{\sin \nu \frac{\pi}{t}}{2(pq)^{\frac{1}{2}} \cos^2 \nu \frac{\pi}{t}} \left( 2(pq)^{\frac{1}{2}} \cos \nu \frac{\pi}{t} \right)^{n+1}, \\ &= 2^n p^{\frac{1}{2}(n-k)} q^{\frac{1}{2}(n+k)} \sum_{\nu} \frac{1}{t} \cos^{n-1} \left( \nu \frac{\pi}{t} \right) \sin \left( \nu \frac{\pi}{t} \right) \sin \left( k\nu \frac{\pi}{t} \right). \end{aligned}$$

Finalement on constate que lorsque  $t$  est pair et  $\nu = t/2$ , le terme correspondant dans la somme est nul. La somme peut donc s'étendre sans inconvénients à toutes les valeurs de  $\nu$  de 1 à  $t-1$ . D'où le résultat final

$$u_{k,n} = 2^n p^{\frac{1}{2}(n-k)} q^{\frac{1}{2}(n+k)} \sum_{\nu=1}^{t-1} \frac{1}{t} \cos^{n-1} \left( \nu \frac{\pi}{t} \right) \sin \left( \nu \frac{\pi}{t} \right) \sin \left( k\nu \frac{\pi}{t} \right), \quad n \geq 2.$$

□

**Marche RW3.** Il est possible d'enrichir le modèle en offrant au mobile la possibilité de rester sur place avec la probabilité  $r = 1 - p - q$ . La solution du problème du retour à l'origine s'obtiendra également à l'aide de la fonction génératrice  $U_k(s)$  définie par l'équation (136). On cherchera l'expression de cette fonction sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions  $\lambda_i^k$ , où les  $\lambda_i$  sont les racines d'une équation analogue à celle trouvée en (140)

$$ps\lambda^2 - (1 - rs)\lambda + qs = 0. \quad (152)$$

Ces racines sont

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2ps} [1 - rs \pm ((1 - rs)^2 - 4pq s^2)^{\frac{1}{2}}], \quad (153)$$

Si  $r = 0$ , on retrouve l'équation (145). Si, par exemple,  $p = q = \frac{1}{4}$  et  $r = \frac{1}{2}$ , on obtient

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{s} [2 - s \pm 2(1 - s)^{\frac{1}{2}}]. \quad (154)$$

L'évaluation de la fonction génératrice  $U_k$  de RW3 étant sujette aux mêmes conditions aux contours  $U_0(s) = 1$  et  $U_t(s) = 0$  que RW2, on trouve son expression en remplaçant dans (144) l'expression des  $\lambda_{1,2}$  trouvée en (153). Il en est de même pour l'évaluation de  $V_k(s)$ . Lorsque  $t \rightarrow \infty$ , la seule solution qui ne diverge pas est  $\lambda_2$ . Dans l'exemple précédent, ceci conduit à l'expression de la fonction génératrice  $V_k(s)$

$$V_k(s) = [\frac{1}{s}(2 - s - 2(1 - s)^{\frac{1}{2}})]^k. \quad (155)$$

**Calcul des  $u_{k,n}$  de RW3.** On peut écrire les valeurs de  $\lambda_{1,2}$  de la façon suivante

$$\lambda_{1,2} = \left(\frac{q}{p}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1 - rs}{2(pq)^{\frac{1}{2}}s} [1 \pm \text{sgn}(1 - rs) \left(1 - \left(\frac{4pq s}{1 - rs}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}], \quad (156)$$

ce qui suggère le changement de variable

$$\frac{1}{\cos \theta} = \frac{2(pq)^{\frac{1}{2}}s}{1 - rs}, \quad s = (2(pq)^{\frac{1}{2}} \cos \theta + r)^{-1}. \quad (157)$$

Le calcul des  $u_{k,n}$  se conduit alors comme dans le cas RW2, il suffit de remplacer dans (151)  $s_\nu$  et  $\frac{ds}{d\theta}|_{s=s_\nu}$  par leurs valeurs. On trouve

$$u_{k,n} = 2^n p^{\frac{1}{2}(n-k)} q^{\frac{1}{2}(n+k)} \sum_{\nu=1}^{t-1} \frac{1}{t} \left( \cos\left(\nu \frac{\pi}{t}\right) + \frac{r}{2(pq)^{\frac{1}{2}}} \right)^{n-1} \sin\left(\nu \frac{\pi}{t}\right) \sin\left(k\nu \frac{\pi}{t}\right). \quad (158)$$

Dans l'exemple  $p = q = \frac{1}{4}$  et  $r = \frac{1}{2}$ , on trouverait

$$u_{k,n} = \frac{1}{2^n} \sum_{\nu=1}^{t-1} \frac{1}{t} \left( \cos\left(\nu \frac{\pi}{t}\right) + 1 \right)^{n-1} \sin\left(\nu \frac{\pi}{t}\right) \sin\left(k\nu \frac{\pi}{t}\right),$$

soit

$$u_{k,n} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^{t-1} \frac{1}{t} \cos^{2(n-1)}\left(\nu \frac{\pi}{2t}\right) \sin\left(\nu \frac{\pi}{t}\right) \sin\left(k\nu \frac{\pi}{t}\right). \quad (159)$$

#### A.4.7 Marches composites 1D sur $\mathbb{Z}$

On dira que la marche est composite (par opposition à une marche simple) lorsque le pas  $\Delta z$  effectué par le mobile n'est pas limité au seul choix  $\Delta z = +1, \Delta z = -1$  ou éventuellement  $\Delta z = 0$ . On dira que la marche est symétrique si le mobile possède, à chaque itération, le choix entre rester sur place avec la probabilité  $p_0$  ou d'effectuer un pas de longueur  $\Delta z = k$ , où  $k = 1, \dots, m$  soit vers la droite, soit vers la gauche avec, pour chacune des ces possibilités, la probabilité  $p_k$ . Il résulte de cette définition que  $p_0 + 2 \sum_{k=1}^m p_k = 1$ . Afin de simplifier l'écriture on ne considérera ci-après que les marches symétriques, mais la méthode s'applique au cas général. Enfin, nous ne considérons que le cas semi-infini,  $t \rightarrow \infty$ . Le cas général où le mobile se déplace entre 0 et  $t$  ne présente pas plus de difficultés.

**Approche par les fonctions génératrices.** Soit  $u_{k,n}$  la probabilité pour que le mobile atteigne pour la première fois l'une quelconque des  $m$  valeurs  $z = 0, \dots, -m + 1$ , en  $n$  pas alors qu'il part de  $z = k$ . Si le mobile parvient à l'une de ces abscisses, cela signifie qu'il a franchi ou a atteint la barrière absorbante et la marche s'arrête. On a l'équation de récurrence

$$u_{k,n} = p_0 u_{k,n-1} + \sum_{r=1}^m p_r (u_{k+r,n-1} + u_{k-r,n-1}),$$

à laquelle il faut adjoindre les conditions aux contours

$$\begin{aligned} u_{z,0} &= 1, \text{ pour } z = 0, -1, \dots, -m + 1, \\ u_{z,0} &= 0, \text{ pour } z = 1, \dots, \infty. \end{aligned}$$

On introduit la fonction génératrice

$$V_k(s) = \sum_{n=0}^{\infty} u_{k,n} s^n,$$

et les  $m$  conditions aux contours correspondantes

$$V_z(s) = 1, \text{ pour } z = 0, -1, \dots, -m + 1.$$

Pour les fonctions génératrices, l'équation de récurrence se traduit par

$$V_k = sp_0 V_k + s \sum_{r=1}^m p_r (V_{k+r} + V_{k-r}).$$

C'est une équation homogène d'ordre  $m$  (une équation,  $m + 1$  inconnues). Nous allons chercher les solutions de cette équation sous la forme

$$V_k(s) = \sum_{l=1}^m c_l \lambda_l^k. \quad (160)$$

Il vient

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^m c_l \lambda_l^k &= sp_0 \sum_{l=1}^m c_l \lambda_l^k + s \sum_{r=1}^m p_r \sum_{l=1}^m c_l (\lambda_l^{k+r} + \lambda_l^{k-r}), \\ \sum_{l=1}^m c_l \lambda_l^k &= \sum_{l=1}^m c_l (sp_0 \lambda_l^k + s \sum_{r=1}^m p_r (\lambda_l^{k+r} + \lambda_l^{k-r})), \end{aligned}$$

soit

$$\sum_{l=1}^m c_l ((sp_0 - 1) \lambda_l^k + s \sum_{r=1}^m p_r (\lambda_l^{k+r} + \lambda_l^{k-r})) = 0.$$

Pour que cette équation soit nulle quelles que soient les valeurs des  $c_l$  on doit avoir pour tous les  $l = 1, \dots, m$

$$(sp_0 - 1) \lambda_l^k + s \sum_{r=1}^m p_r (\lambda_l^{k+r} + \lambda_l^{k-r}) = 0,$$

les  $\lambda_l$  doivent correspondre aux  $m$  racines complexes de module inférieur à un de l'équation caractéristique,

$$(sp_0 - 1) + \sum_{r=1}^m s p_r (\lambda^r + \lambda^{-r}) = 0. \quad (161)$$

Les fonctions  $\lambda_l(s)$  doivent de plus satisfaire, pour chaque  $s$ , les  $m$  conditions aux contours  $V_k(s) = 1$  pour  $k = 0, \dots, -m + 1$ , ce qui conduit au système linéaire

$$\mathbf{V} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (162)$$

où  $\mathbf{V}$  est une matrice de Vandermonde d'éléments  $v_{ij} = \lambda_j^{-i+1}$ . On introduit la matrice  $\mathbf{V}_i$ , qui est égale à  $\mathbf{V}$  sauf pour la colonne  $i$  qui est remplacée par une colonne de 1. Les coefficients  $c_i$  sont alors donnés par la formule  $c_i = \Delta_i / \Delta$ , où  $\Delta = \det \mathbf{V}$  et  $\Delta_i = \det \mathbf{V}_i$ .

Soit  $q$  le nombre de racines possédant une partie imaginaire non nulle. Si  $q = 0$ ,  $R(a)$  est une fonction réelle. Si  $q > 0$ , à chaque racine complexe  $\lambda_i$  correspond une racine conjuguée  $\lambda_j = \bar{\lambda}_i$ ,  $q$  est alors nécessairement pair. On veut montrer que  $c_j = \bar{c}_i$ . Pour cela, on observe que prendre le conjugué de  $\Delta$  ou de  $\Delta_i$  revient à intervertir les  $q$  colonnes correspondant aux racines complexes. Il vient  $\Delta = (-1)^q \bar{\Delta}$  et  $\Delta_i = (-1)^q \bar{\Delta}_i$ , et

$$c_j = \frac{\Delta_j}{\Delta} = \frac{(-1)^q \bar{\Delta}_i}{(-1)^q \bar{\Delta}} = \frac{\bar{\Delta}_i}{\bar{\Delta}} = \bar{c}_i.$$

La fonction  $V_k(s)$  est donc toujours réelle.

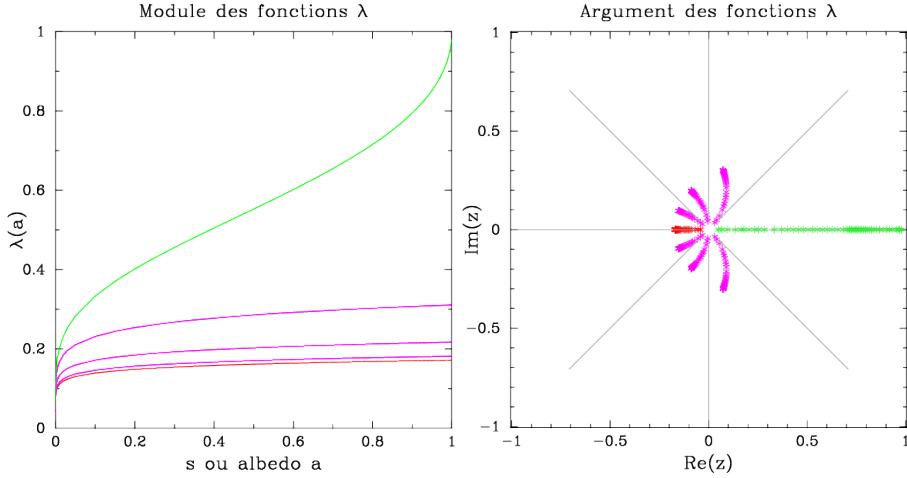


FIGURE 42 – Module et argument des fonctions  $\lambda(s)$  d'une marche binomiale pour des valeurs de  $s$  allant de  $10^{-6}$  à 0.999. Le nombre de pas possible est de  $2m + 1$ , avec ici  $m = 8$ . Il n'a été retenu que les huit fonctions de module inférieur à un.

**Marche binomiale.** À titre d'exemple de marche composite, nous allons considérer la marche binomiale où la probabilité d'effectuer un pas  $\Delta z = r$  ou  $\Delta z = -r$  est donnée par les coefficients du binôme. Cette marche est une bonne approximation d'un processus de diffusion 1D suivant la loi de Gauss. On pose par définition

$$p_r = \frac{1}{2^{2m}} \binom{2m}{m+r}, \quad r = 0, \dots, m.$$

En reportant ces valeurs dans l'équation caractéristique (161), il est possible d'écrire celle-ci sous la forme

$$s\left(\frac{1}{4}(\lambda + 1)^2\right)^m = \lambda^m.$$

Ce polynôme possède  $2m$  racines. En posant  $z_r = s^{-\frac{1}{m}} e^{ir\frac{2\pi}{m}}$  on obtient pour les  $m$  valeurs  $r = 0, \dots, m - 1$

$$\begin{aligned} \lambda_{1,r}(s) &= 2z_r - 1 + 2(z_r^2 - z_r)^{\frac{1}{2}}, \\ \lambda_{2,r}(s) &= 2z_r - 1 - 2(z_r^2 - z_r)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

On note que  $\lambda_{1,r}\lambda_{2,r} = 1$ ; l'une des deux valeurs est de module inférieur à un et l'autre lui est supérieur. Les fonctions  $\lambda(s)$  de module inférieur à un sont illustrées par la figure 42.

**Approche par l'algèbre linéaire.** À titre d'exemple, nous allons traiter le cas où le mobile peut effectuer l'un des trois pas  $\Delta z = +1$  avec la probabilité  $p$ ,  $-1$  avec la probabilité  $q$  ou rester sur place avec la probabilité  $r = 1 - p - q$ . Si  $u_{k,n}$  désigne, comme au chapitre précédent, la probabilité d'atteindre  $z = 0$ , pour la première fois, en  $n$  pas depuis  $k$ , alors

$$u_{k,n} = pu_{k+1,n-1} + ru_{k,n-1} + qu_{k-1,n-1}. \quad (163)$$

En écrivant toutes les équations de ce type pour  $k = 1, \dots, t$ ,  $n \geq 1$  et avec les conditions aux contours, on obtient un système linéaire permettant de calculer les  $u_{k,n}$  en fonction des  $u_{k,n-1}$

$$\begin{pmatrix} u_{1,n} \\ u_{2,n} \\ \vdots \\ u_{t-1,n} \\ u_{t,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & p & & & \\ q & r & p & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & q & r & p \\ & & & q & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,n-1} \\ u_{2,n-1} \\ \vdots \\ u_{t-1,n-1} \\ u_{t,n-1} \end{pmatrix}.$$

Il est commode d'écrire ce système sous la forme  $\mathbf{u}_n = \mathbf{T}\mathbf{u}_{n-1}$ , où  $\mathbf{T}$  est une matrice de Toeplitz tridiagonale. Pour  $n = 1$  on a

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} q \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{ d'où } \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} rq \\ q^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{u}_3 = \begin{pmatrix} r^2q + pq^2 \\ 2rq^2 \\ q^3 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \dots$$

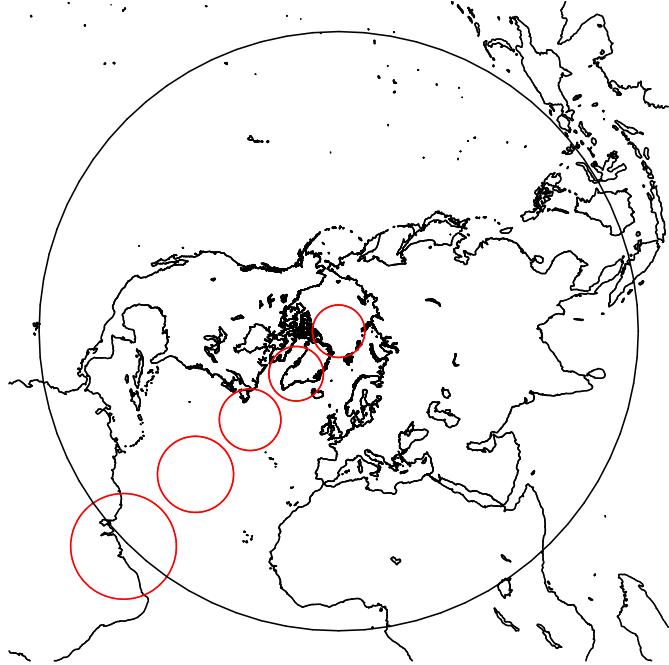


FIGURE 43 – Projection stéréographique de la Terre. Le point de projection est le pôle sud (données NOAA coastline extractor). Sous l'effet de la projection, le cercle rouge voit sa surface augmenter d'un facteur quatre lorsqu'il passe du pôle nord à l'équateur.

et d'une manière générale  $\mathbf{u}_n = \mathbf{T}^{n-1}\mathbf{u}_1$ . Le vecteur  $\mathbf{u}_n$  est pour  $n > 1$  identique, au facteur  $q$  près, à la première colonne de  $\mathbf{T}^{n-1}$ . Le calcul des  $\mathbf{u}_n$  est simplifié si  $\mathbf{T}$  est diagonalisable (elle l'est certainement si elle est symétrique). Cependant, il n'existe pas de formule simple donnant les valeurs et vecteurs propres d'une matrice de Toeplitz dans le cas général. En revanche, pour des matrices de Toeplitz *circulantes*, ces quantités s'expriment facilement à l'aide de la transformée de Fourier discrète. Cette remarque permet d'accélérer le produit de la matrice  $\mathbf{T}$  par le vecteur  $\mathbf{u}_{n-1}$ , suivant un algorithme proposé par Golub et Van Loan.

## A.5 La projection stéréographique

Cette projection est une planisphère, c'est-à-dire qu'elle réalise une carte de la surface d'une sphère sur un plan. Soient  $\theta$  et  $\phi$  les coordonnées sphériques d'un point  $P$  situé sur la sphère,  $\theta$  est l'angle polaire mesuré à partir d'un point  $N$  et  $\phi$  est l'azimut de  $P$ . Si le plan de la carte est le plan équatorial par rapport à  $N$  et si le point dit *de projection* est le point  $Z$  opposé à  $N$ , la projection stéréographique associe au point  $(\theta, \phi)$  le point de coordonnées polaires  $(t, \phi)$  sur le plan. Le rayon est  $t = r \tan(\theta/2)$  où  $r$  est le rayon de la sphère, voir figure. Nous ne considérerons que la sphère de rayon  $r = 1$  de façon à ce que les surfaces mesurées sur celle-ci correspondent à des angles solides.

L'image de la demi-sphère opposée au point de projection est un cercle de rayon 1, l'image de l'autre demi sphère est le reste du plan. Le point de projection n'a pas d'image. Afin d'éviter d'obtenir des projections très différentes pour les deux hémisphères, on réalise plutôt deux projections stéréographiques dont les points de projections sont diamétralement opposés. La « mappemonde » ainsi construite est définie par

$$t = \begin{cases} \tan \frac{\theta}{2} & \text{si } \theta \leq \frac{\pi}{2}, \\ \cot \frac{\theta}{2} & \text{si } \theta \geq \frac{\pi}{2}. \end{cases}$$

Il y a continuité de la mappemonde, comme le montre la figure 44 page suivante (où en réalité les deux disques doivent être superposés), ce qui induit un changement d'orientation est-ouest pour l'hémisphère sud.

La projection stéréographique est conforme, c'est-à-dire qu'elle préserve les angles, en revanche elle n'est pas équivalente, c'est-à-dire qu'elle ne préserve pas les surfaces. Introduisons les coordonnées cartésiennes  $x$  et  $y$  d'un point sur la projection. Un élément de surface sur la sphère céleste est un angle solide  $d\Omega$ , et au même élément de surface  $dS = dx dy$  sur la projection, ne correspond pas le même angle solide sur la sphère céleste. La relation entre  $dS$  et  $d\Omega$  est donnée par la formule

$$d\Omega = \frac{4}{(1 + x^2 + y^2)^2} dS. \quad (164)$$

Ceci veut dire qu'au zénith de la sphère céleste ( $\theta = 0$ ) l'angle solide sous-tendu par  $dS$  est quatre fois plus grand que celui sous-tendu à l'équateur par le même  $dS$ . Réciproquement, le même angle solide sera représenté sur la carte par un

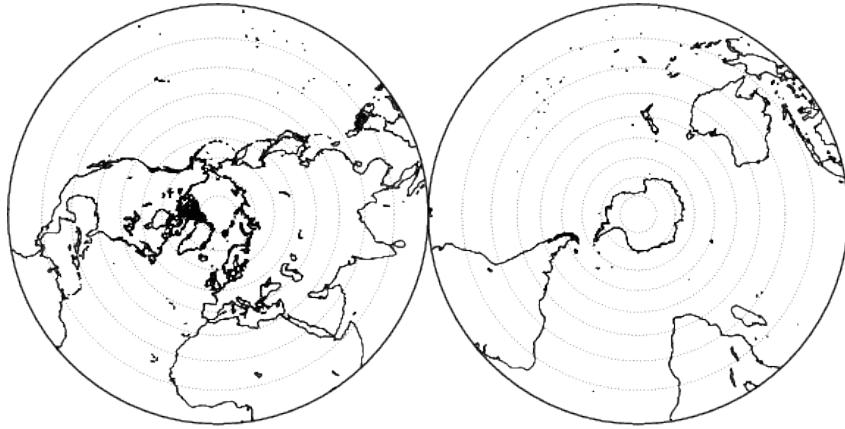


FIGURE 44 – Mappemonde obtenue par double projection stéréographique. Les parallèles sont tracés en pointillés de  $10^\circ$  en  $10^\circ$ . Remarquer le changement d’orientation de l’hémisphère sud.

cercle quatre fois plus grand à l’horizon qu’au zénith (voir figure 43). Notons enfin que l’on a les formules suivantes

$$\mu = \cos \theta = \frac{1 - t^2}{1 + t^2}, \quad \sin \theta = \frac{2t}{1 + t^2}, \quad t^2 = x^2 + y^2. \quad (165)$$

#### A.5.1 Calcul du jacobien de la projection stéréographique

*Démonstration.* On démontre ici la relation (164) qui lie l’angle solide  $d\Omega$  correspondant à la surface  $dS = dx dy$  centrée autour de point  $(x, y)$  de la projection stéréographique définie par

$$x = t \cos \phi \quad y = t \sin \phi, \quad \text{avec } t = \tan \frac{\theta}{2}. \quad (166)$$

On calcule les dérivées partielles entrant dans la composition du jacobien

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \theta} &= \frac{\partial t}{\partial \theta} \cos \phi, & \frac{\partial y}{\partial \theta} &= \frac{\partial t}{\partial \theta} \sin \phi, & \frac{\partial t}{\partial \theta} &= \frac{1}{2}(1 + t^2), \\ &= \frac{1}{2}(1 + t^2) \cos \phi, & &= \frac{1}{2}(1 + t^2) \sin \phi, \\ \frac{\partial x}{\partial \phi} &= -t \sin \phi, & \frac{\partial y}{\partial \phi} &= t \cos \phi. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J &= \left| \begin{vmatrix} \frac{1}{2}(1 + t^2) \cos \phi & -t \sin \phi \\ \frac{1}{2}(1 + t^2) \sin \phi & t \cos \phi \end{vmatrix} \right| = \frac{1}{2}t(1 + t^2). \\ dx dy &= \frac{1}{2}t(1 + t^2)d\theta d\phi, \\ d\Omega &= \sin \theta d\theta d\phi, \quad \sin \theta = \frac{2t}{1 + t^2}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} dx dy &= \frac{1}{2}t(1 + t^2) \frac{d\Omega}{\sin \theta}, \\ &= \frac{1}{2}t(1 + t^2) \frac{1 + t^2}{2t} d\Omega, \\ &= \frac{1}{4}(1 + t^2)^2 d\Omega = \frac{1}{4}(1 + x^2 + y^2)^2 d\Omega, \\ d\Omega &= \frac{4}{(1 + x^2 + y^2)^2} dx dy. \end{aligned}$$

□

#### A.6 Réaliser des images ou des films en couleurs

Le plus simple est de générer des fichiers au format “portable pixmap” \*.ppm puis de les traduire dans un format plus standard grâce à la commande `convert` de Linux. Le programme Fortran 90 `test` qui suit réalise cette opération dans l’environnement Linux. Il créé dans le répertoire préexistant `ima` une série d’images RGB au format \*.gif (de `image000.gif` à `image254.gif`), le dernier appel système (ligne 35) transforme ces images en un film de nom `movie.gif`.

```

Program test
  Implicit None
  Integer, Parameter :: NP=128
  Integer :: n, nx, ny, maxi
  Character(len=16) :: nom_fichier
  Integer, Dimension(3,NP,NP) :: tableauRGB

  nx = Size(tableauRGB,dim=2)
  ny = Size(tableauRGB,dim=3)
  ! Valeur maximum des pixels RGB
  maxi = 254
  Do n=0,254
    ! Ecriture du fichier .ppm
    Open(unit=12,file="ima/test.ppm",position="Rewind")
    Write(12,'(a)') "P3"           ! Nombre magique obligatoire
    Write(12,'(a)') "#_test.ppm" ! Commentaire
    Write(12,*nx,ny              ! Taille de l'image en pixels
    Write(12,*maxi               ! Valeur maximum d'un pixel
      ! Rouge
    tableauRGB(1,:,:)=n
    tableauRGB(1,32:96,32:96)=254-n
      ! Vert
    tableauRGB(2,:,:)=254-n
    tableauRGB(2,32:96,32:96)=n
      ! Bleu
    tableauRGB(3,:,:)=127
    Write(12,* tableauRGB      ! Ecriture des valeurs RGB
    Close(12)
    ! Conversion en .gif
    Write(nom_fichier,'("ima/image",i3.3,".gif")')n
    Print*,nom_fichier
    Call system("convert ima/test.ppm //nom_fichier")
  End Do
  ! Fabrication du film
  Call system("convert ima/image*.gif ima/movie.gif")
End Program test

```

Il est également possible de réaliser des images \*.pgm en niveaux de gris, le nombre magique est alors P2.

## A.7 Compléments sur l'arc-en-ciel

Un arc-en-ciel s'observe lorsque la lumière solaire est rétrodiffusée par un fin rideau de pluie formé de gouttes d'eau sphériques. Pour que l'arc soit bien coloré, il faut que le rayon des gouttes soit supérieur ou égal à  $200\mu\text{m}$  environ. Les gouttes de tailles inférieures à cette limite ne doivent pas être trop nombreuses, au risque de diminuer fortement le contraste de l'arc. De même, la pluie doit avoir une faible épaisseur optique, sinon la diffusion multiple ferait progressivement disparaître le phénomène. Les arcs primaires à  $42.1^\circ$  et secondaires à  $50.9^\circ$  s'interprètent très bien dans le cadre de l'optique géométrique (voir, par exemple, l'article de Walker [29] ou le chapitre 13.2 de l'ouvrage de van de Hulst [12]), mais suivant cette théorie, le phénomène ne dépend pas du rayon des gouttes d'eau, seule la théorie de Mie permet d'en rendre compte ainsi que des plus fins détails de sa structure. La figure 45 est une image calculée à l'aide du programme BHMié pour des gouttes de  $250\mu\text{m}$  de rayon, elle représente un quart du cercle complet. On y distingue très bien les deux arcs principaux entourant la bande sombre d'Alexandre ainsi que les nombreux arcs surnuméraires.

Le phénomène plus rare de l'« arc blanc » se produit lorsque les gouttelettes d'eau sont plus fines que celles de l'arc-en-ciel. Elles ne doivent pas trop s'écartez d'un rayon de l'ordre de  $20\mu\text{m}$  à  $50\mu\text{m}$  comme celles que l'on trouve au sein d'un brouillard. La dispersion des couleurs existe toujours, car l'indice de l'eau varie avec la longueur d'onde, mais les lobes sont plus larges et leur superposition produit une couleur blanche. Le rayon de l'arc blanc est d'environ  $40^\circ$  soit un peu plus petit que celui de l'arc-en-ciel. Pour une illustration du passage de l'arc blanc à l'arc-en-ciel en fonction du rayon des gouttes d'eau on pourra consulter les figures de l'article de Lee [19].

## A.8 Rotations 3D et quaternions

Un quaternion est un élément de l'enveloppe linéaire de quatre nombres : 1 (l'unité des réels), et  $i, j, k$  trois racines de  $-1$  linéairement indépendantes. Il s'écrit  $q = q_0 + q_1i + q_2j + q_3k$ , où  $q_0, q_1, q_2$  et  $q_3$  sont des réels. On note  $\mathbb{H} = \text{span}(1, i, j, k)$ . Par analogie avec les complexes, on définit la partie réelle  $\Re(q) = q_0$  et la partie imaginaire

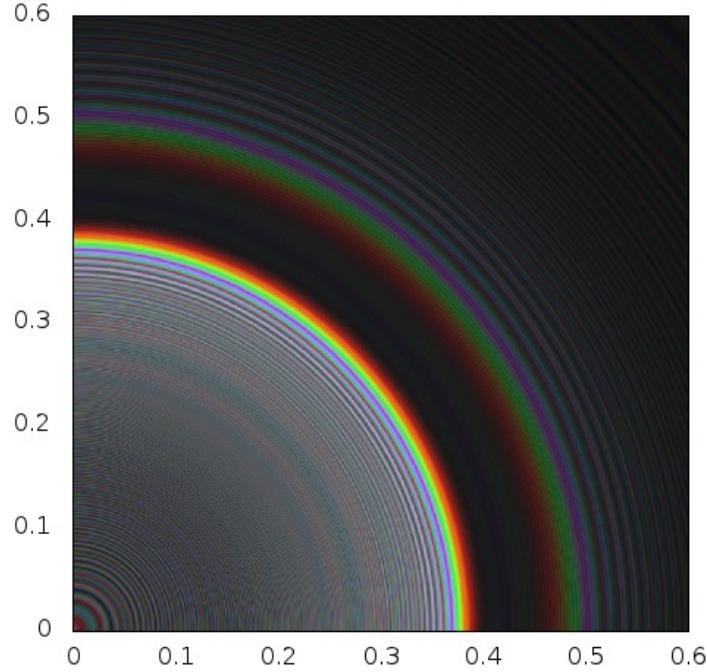


FIGURE 45 – Projection stéréographique de l’arc-en-ciel suivant le système RGB. Les coordonnées sont  $x = \tan \frac{\gamma}{2} \cos \phi$  et  $y = \tan \frac{\gamma}{2} \sin \phi$  où  $\gamma = \pi - \theta$  est l’angle de rétrodiffusion et  $\phi$  l’azimut de diffusion. Le contraste a été augmenté de façon à faire apparaître les arcs surnuméraires.

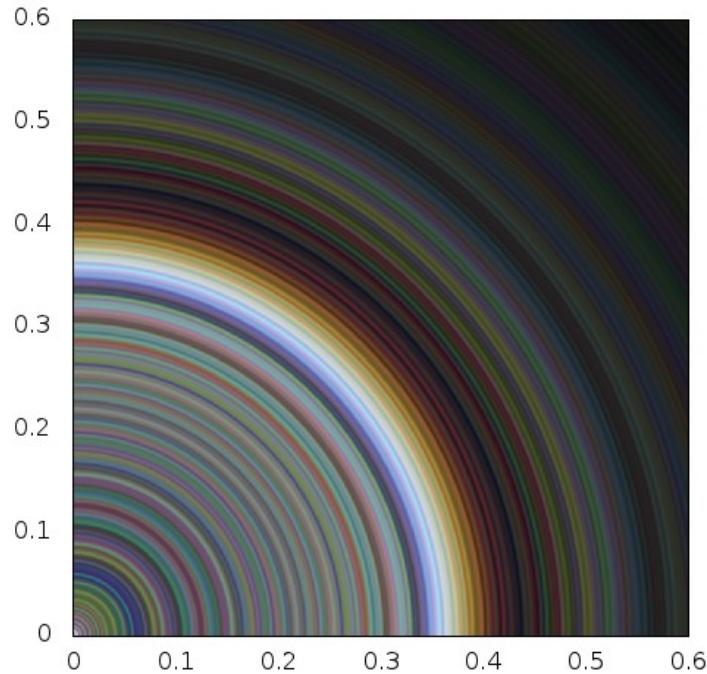


FIGURE 46 – Projection stéréographique de l’arc blanc produit par des gouttelettes d’eau de rayon  $30\mu\text{m}$ . Le contraste a également été augmenté.

$\Im(q) = q_1i + q_2j + q_3k$ . Le conjugué de  $q$  est  $\bar{q} = \Re(q) - \Im(q)$ . On obtiendra plus de détails sur les propriétés des quaternions en consultant, par exemple, la référence [4].

La définition d’une addition dans  $\mathbb{H}$  est immédiate. En revanche, la définition d’une multiplication cohérente s’est révélée être une entreprise laborieuse. À la suite d’une véritable illumination le 16 octobre 1843, Hamilton a défini la multiplication entre quaternions telle qu’elle est résumée par la table 5. La seule partie véritablement nouvelle est la restriction de cette table à la partie imaginaire des quaternions. La multiplication n’est pas commutative, mais elle est associative et tout élément non nul possède un inverse. On obtient en particulier la célèbre formule  $i^2 = j^2 = k^2 =$

	1	$i$	$j$	$k$		$i$	$j$	$k$
1	1	$i$	$j$	$k$	$i$	-1	$k$	$-j$
$i$	$i$	-1	$k$	$-j$	$j$	$-k$	-1	$i$
$j$	$j$	$-k$	-1	$i$	$k$	$j$	$-i$	-1
$k$	$k$	$j$	$-i$	-1				

TABLE 5 – Table de multiplication des quaternions et restriction de cette table à la partie imaginaire.

$ijk = -1$  qu'Hamilton a gravée sur le pont Brougham à Dublin le jour de sa découverte.

On peut identifier la partie imaginaire de  $q$  avec un vecteur  $Q$  de  $\mathbb{R}^3$ , et une inspection attentive de la multiplication des parties imaginaires révèle qu'il existe un équivalent strict dans  $\mathbb{R}^3$ . On a

$$q, r \in \mathbb{H}, \quad Q = \mathfrak{Im}(q), \quad R = \mathfrak{Im}(r), \\ QR = Q \wedge R - Q \cdot R,$$

où  $\wedge$  désigne le produit vectoriel et  $\cdot$  le produit scalaire. On a confondu (un peu abusivement) dans la même notation les parties imaginaires de  $Q$  et  $R$  avec les vecteurs de  $\mathbb{R}^3$  qui leur correspondent. Cela ne devrait pas poser de problèmes.

Cette observation permet de dégager les liens profonds qui existent entre les quaternions et les rotations dans  $\mathbb{R}^3$ . En particulier nous allons montrer que la formule d'Olinde Rodrigues possède un équivalent simple dans le monde des quaternions. Pour nous conformer à la notation que nous venons d'introduire, nous allons noter  $U$  le vecteur unitaire autour duquel tourne  $V$  et, pour les besoins de la démonstration, nous noterons  $2\sigma$  l'angle de rotation. La formule s'écrit alors

$$V' = V \cos 2\sigma + (U \wedge V) \sin 2\sigma + U(U \cdot V)(1 - \cos 2\sigma). \quad (167)$$

Le quaternion  $V'$  ne comporte pas de partie réelle :  $V' \in \mathfrak{Im}(\mathbb{H})$ . Introduisons à présent le quaternion

$$q_\sigma = \cos \sigma + \sin \sigma U = e^{U\sigma}, \quad U \in \mathfrak{Im}(\mathbb{H}), \quad U\bar{U} = 1.$$

Nous allons montrer que

$$V' = q_\sigma V \bar{q}_\sigma.$$

Il n'intervient dans cette expression que des quaternions et  $V$  doit être interprété comme un quaternion de partie réelle nulle,  $V \in \mathfrak{Im}(\mathbb{H})$ .

*Démonstration.* Les calculs sont immédiats. Il vient

$$\begin{aligned} q_\sigma V \bar{q}_\sigma &= q_\sigma (\cos \sigma V - \sin \sigma (V \wedge U - V \cdot U)), \\ &= (\cos \sigma + \sin \sigma U)(\cos \sigma V - \sin \sigma (V \wedge U - V \cdot U)), \\ &= (\cos^2 \sigma V - \cos \sigma \sin \sigma (V \wedge U - V \cdot U)) + \\ &\quad + \sin \sigma \cos \sigma (U \wedge V - U \cdot V) + \\ &\quad - \sin^2 \sigma (U \wedge (V \wedge U) - U \cdot (V \wedge U)) + \\ &\quad + \sin^2 \sigma U (V \cdot U). \end{aligned}$$

Après quelques simplifications évidentes (comme  $U \cdot (V \wedge U) = 0$  par exemple), il reste

$$q_\sigma V \bar{q}_\sigma = \cos^2 \sigma V + \sin 2\sigma (U \wedge V) - \sin^2 \sigma (U \wedge (V \wedge U)) + \sin^2 \sigma U (V \cdot U).$$

On a  $U \wedge (V \wedge U) = V - (V \cdot U)U$ , qui est un cas particulier relativement trivial de l'identité de Grassman :  $U \wedge (V \wedge W) = (U \cdot W)V - (U \cdot V)W$ . Il vient

$$\begin{aligned} q_\sigma V \bar{q}_\sigma &= V(\cos^2 \sigma - \sin^2 \sigma) + (U \wedge V) \sin 2\sigma + U(V \cdot U)2 \sin^2 \sigma, \\ &= V \cos 2\sigma + (U \wedge V) \sin 2\sigma + U(V \cdot U)(1 - \cos 2\sigma). \end{aligned}$$

Cette formule est identique à l'équation (167). □

On retrouve ainsi la formule d'Olinde Rodrigues. On en déduit que  $V'$ , en tant que somme d'imaginaires purs, est lui aussi un quaternion purement imaginaire, auquel on peut associer un vecteur de  $\mathbb{R}^3$ . Les moteurs de jeux vidéo (par exemple ceux de Tomb Raider I, II, & III) tirent parti de ce résultat afin de gérer les objets 3D. Dans un registre plus sinistre, les quaternions auraient été introduits par les ingénieurs allemands chargés de développer la centrale à inertie des V2. Quoi qu'il en soit, ils sont toujours utilisés de nos jours pour assurer le contrôle des fusées et des satellites (voir par exemple les références [27] et [32]).

## Références

- [1] Bohren, C. F., Huffman, D., 1983, *Absorption and scattering of light by small particles*, John Wiley, New York
- [2] Ciddor, P. E., 1996, *Refractive index of air : new equations for the visible and near infrared*, Applied Optics, **35** No.9, pp.1566-1573
- [3] Cossali, G. E., 2003, J. of Integer Sequences, **6**, Article 03.1.8
- [4] Ebbinghaus, H.-D., Hermes, H., Hirzebruch, F., Koecher, M., Mainzer, K., Neukirch, J., Prestel, A., Remmert, R., 1991, *Numbers*, Springer, New-York. ISBN 978-0-387-97497-2
- [5] Feller, W., 1957, *An Introduction to Probability Theory and Its applications*, Vol.1, 2nd edition, John Wiley & Sons, New-York
- [6] Gradshteyn, I. S., Ryzhik, I. M., 1980, *Table of Integrals, Series, and Products*, 4th edition, Academic Press Inc., ISBN 0-12-294760-6
- [7] Gray, R. M., XXXX, *Toepplitz and Circulant Matrices : A review*, NOW the essence of knowledge
- [8] Guy, R. K., 2000, J. of Integer Sequences, **3**, Article 00.1.6
- [9] Hegedüs, R., Åkesson, S., Horváth, G., 2007, *Polarization patterns of thick clouds : overcast skies have distribution of the angle of polarization similar to that of clear skies*, J. Opt. Soc. Am. A, **24** No. 8, pp. 2347-2356
- [10] Hansen, J. E., 1969, *Astrophys. J., Absorption-line formation in a scattering planetary atmosphere : a test of Van de Hulst's similarity relations*, **158**, pp. 337-349.
- [11] Henyey, L. G., and Greenstein, J. L., 1941, *Diffuse radiation in the galaxy*, Astrophys. J., **93**, pp. 70-83.
- [12] Hulst, H. C. van de, 1981, *Light Scattering by Small Particles*, Dover, Mineola. ISBN 0-486-64228-3
- [13] Hulst, H. C. van de, 1968, B.A.N., *Radiative transfer in thick atmospheres with an arbitrary scattering function*, **3**, pp. 77-86.
- [14] Hulst, H. C. van de, 1968, J. Comp. Phys., *Asymptotic Fitting, a Method for Solving Anisotropic Transfer Problems in Thick Layers*, **3**, pp. 291-306
- [15] Hulst, H. C. van de, and Grossman, K., 1968, *The Atmospheres of Venus and Mars*, ed. J. C. Brandt and M. B. McElroy (New-York : Gordon & Breach), pp. 35-55.
- [16] Klafter, J., and Sokolov, I. M., 2011, *First Steps in Random Walks*, Oxford, Oxford, New-York, ISBN 978-0-19-923486-8
- [17] Knuth, D. E., 1997, *The Art of Computer Programming*, Vol.1, 3rd edition, Addison Wesley, Reading, ISBN 0-20189683-4
- [18] Krügel, E., 2003, *The Physics of Interstellar Dust*, Institute of Physics Publishing, Bristol & Philadelphia. ISBN 0-7503-0861-3
- [19] Lee, R. L., Jr., 1998, *Mie theory, Airy theory, and the natural rainbow*, Applied Optics, **37**, No.9, pp. 1506-1519.
- [20] Metropolis, N., 1987, Los Alamos Science, Special issue
- [21] Menu, J., Chaulagain, U., 2011, Internship report, Master Astronomie & Astrophysique d'Île-de-France
- [22] Pomozi, I., Horváth, G. and Vehner, R., 2001, *How the clear-sky angle of polarization pattern continues underneath clouds : full-sky measurements and implications for animal orientation*, The Journal of Experimental Biology, **204**, 2933-2942
- [23] Press W., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B., 1992, *Numerical Recipes*, Second edition, Cambridge University Press, Cambridge
- [24] Ramella-Roman, J. C., Prahl, S. A., Jacques, S. L., 2005, *Three Monte Carlo programs of polarized light transport into scattering media : part I*, Optics Express, **13**, pp. 4420-4438.
- [25] Ramella-Roman, J. C., Prahl, S. A., Jacques, S. L., 2005, *Three Monte Carlo programs of polarized light transport into scattering media : part II*, Optics Express, **13**, pp. 10392-10405.
- [26] Sharma S. K., 2015, *A review of approximate analytic light-scattering phase functions*, A. Kokhanovsky (ed.), Light Scattering Reviews 9, Springer Praxis Books
- [27] Song Y. D. and Cai W. C., 2012, *New Intermediate Quaternion Based Control of Spacecraft : Part I - Almost Global Attitude Tracking*, Internat. J. of Innovative Computing, Information and Control, **8**, Nr.10(B), pp. 7307-7319
- [28] Wallace J. M., and Hobbs P. V., 2006, *Atmospheric Science*, 2nd edition, Elsevier, Amsterdam

- [29] Walker, J. D., 1976, *Multiple rainbows from single drops of water and other liquids*, Am. J. Phys., **44** No.5, pp. 421-433.
- [30] Weiss, G. H., 1994, *Aspects and Applications of the Random Walk*, North-Holland, Amsterdam. ISBN 0-444-81606-2
- [31] Wilf, H. S., 2006, *generatingfunctionology*, 3rd edition, A K Peters, Ltd., Wellesley, Massachusetts, ISBN 1-56881-279-5
- [32] Yang Y., 2012, *Spacecraft attitude determination and control : Quaternion based method*, Annual Review in control, **36(2)**, pp. 198-219
- [33] Yoon, G., Prahl, S. A., Welch, A. J., 1989, *Accuracies of the diffusion approximation and its similarity relations for laser irradiated biological media*, Applied Optics, **28** No.12, pp. 2250-2255.
- [34] Yudovsky, D., Pilon, L., 2009, *Simple and accurate expressions for diffuse reflectance of semi-infinite and two-layer absorbing and scattering media*, Applied Optics, **48**, pp. 6670-6683.