HAL
archives-ouvertes.fr

# Résolution par la méthode de Monte Carlo de formulations intégrales du problème de diffusion électromagnétique par une suspension de particules à géométries complexes

Julien Charon

▶ **To cite this version:**

Julien Charon. Résolution par la méthode de Monte Carlo de formulations intégrales du problème de diffusion électromagnétique par une suspension de particules à géométries complexes. Autre. Université de Perpignan, 2017. Français. <NNT : 2017PERP0048>. <tel-01715325>

**HAL Id: tel-01715325**
**https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01715325**

Submitted on 22 Feb 2018

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

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

# THÈSE

Pour obtenir le grade de

Docteur

Délivré par

**UNIVERSITE DE PERPIGNAN VIA DOMITIA**

Préparée au sein de l'école doctorale :

**Energie Environnement ED 305**

Et des unités de recherche

**RAPSODEE - CNRS UMR 5302**

**Institut Pascal – CNRS UMR 6602**

**PROMES – CNRS UPR 8521**

Spécialité :

Sciences de l'Ingénieur

Présentée par **Julien CHARON**

# Résolution par la méthode de Monte Carlo de formulations intégrales du problème de diffusion électromagnétique par une suspension de particules à géométries complexes

Soutenue le 12 décembre 2017 devant le jury composé de

| | |
|---|---|
| Mme. Amélie LITMAN, Maître de conférences, Université d'Aix-Marseille | Rapporteur |
| M. Rodolphe VAILLON, Directeur de recherches CNRS, CETHIL | Rapporteur |
| M. Hamid KACHKACHI, Professeur, Université de Perpignan Via Domitia | Président du jury |
| M. François MENARD, Directeur de recherches, IPAG, Université Grenoble-Alpes | Examinateur |
| M. Cyril CALIOT, Chargé de recherches CNRS, PROMES | Directeur |
| M. Jean-François CORNET, Professeur, SIGMA Clermont | Co-Directeur |
| M. Jérémi DAUCHET, Maître de conférences, SIGMA Clermont | Encadrant |
| Mme. Mouna EL HAFI, Maître de conférences, IMT Mines Albi | Encadrante |
| M. Vincent EYMET, Méso-Star | Invité |

# *Remerciements des LabEx*

Cette thèse a été financée à 50% par le LabEx SOLSTICE (SOLaire : Science Technologie et Innovation pour la Conversion de l'Énergie) [1]

et à 50% par le LabEx IMOBS$^3$ (Innovative Mobility : Smart and Sustainable Solutions) [2]

« Ce travail a bénéficié d'une aide de l'État gérée par l'Agence Nationale de la Recherche au titre du programme Investissements d'avenir dans le cadre du projet LabEx IMobS3 (ANR-10-LABX-16-01), d'une aide de l'Union Européenne au titre du Programme Compétitivité Régionale et Emploi 2007-2013 (FEDER – Région Auvergne), et d'une aide de la Région Auvergne »

1. http://www.labex-solstice.fr/
2. http://www.imobs3.univ-bpclermont.fr/index.php/fr/

# *Remerciements*

Je tiens à remercier très sincèrement toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de cette thèse ainsi qu'à l'élaboration de ce manuscrit.

Je dédie ce manuscrit de thèse à mon épouse Mélanie pour son soutien permanent et ses sacrifices, ainsi qu'à ma fille Justine qui est venue illuminer mes deux derniers mois de rédaction.

# Nomenclature

**Acronymes**

| | |
|---|---|
| CAO | Conception Assistée par Ordinateur |
| CDF | Fonction de répartition |
| CFIE | Combined Field Integral Equation |
| DDA | Discrete Dipole Approximation |
| EBCM | Extended Boundary Condition Method |
| EFIE | Electric Field Integral Equation |
| FDTD | Finite Difference Time Domain |
| FEM | Finite Element Method |
| IEBCM | Iterative Extended Boundary Condition Method |
| IIM | Invariant Imbedding Method |
| MBIT | Many-Body Iterative T-Matrix |
| MCM | Méthode de Monte Carlo |
| MFIE | Magnetic Field Integral Equation |
| MMFE | Modal Method by Fourier Expansion |
| NFM | Null Field Method |
| NFM-DS | Null Field Method - Discrete Source |
| PDF | Fonction Densité de Probabilité |
| RAM | Random Access Memory |
| SVM | Méthode de Séparation des Variables |

**Symboles Grec**

| | | |
|---|---|---|
| $\delta$ | Rayon du volume d'exclusion | $m$ |
| $\kappa_p$ | Partie imaginaire de l'indice complexe de réfraction de la particule | - |
| $\kappa_r$ | Partie imaginaire de l'indice complexe de réfraction relatif | - |
| $\lambda_0$ | Longueur d'onde du rayonnement dans le vide | m |
| $\lambda_e$ | Longueur d'onde du rayonnement dans le milieu environnant | m |
| $\mu$ | Perméabilité magnétique de la particule | $N \cdot A^{-2}$ |
| $\mu_0$ | Perméabilité magnétique du vide | $N \cdot A^{-2}$ |
| $\mu_r$ | Perméabilité magnétique relative | - |
| $\partial\mathcal{V}_p$ | Frontière du domaine $\mathcal{V}_p$ délimitant le volume de la particule | $\mathrm{m}^3$ |
| $\sigma$ | Section efficace | $\mathrm{m}^2$ |
| $\varepsilon$ | Permittivité diélectrique de la particule | $F \cdot m^{-1}$ |

| | | |
|---|---|---|
| $\varepsilon_0$ | Permittivité diélectrique du vide | $F \cdot m^{-1}$ |
| $\varepsilon_e$ | Permittivité diélectrique du milieu environnant | $F \cdot m^{-1}$ |
| $\varepsilon_r$ | Permittivité diélectrique relative | - |
| $\vartheta_{sca}$ | Angle de diffusion (angle entre $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$) | m |
| $k_e$ | Nombre d'onde du milieu environnant | $m^{-1}$ |

**Symboles Romain**

| | | |
|---|---|---|
| $\bar{r}_{eq}$ | Rayon moyen de la sphère équivalente en volume | m |
| $\bar{x}$ | Paramètre de taille moyen d'une suspension de particule | - |
| $\mathcal{P}$ | Domaine délimitant la surface projetée de la particule | $m^2$ |
| $\mathcal{V}_p$ | Domaine délimitant le volume de la particule | $m^3$ |
| $J_0$ | Fonction de Bessel de première espèce d'ordre 0 | - |
| $J_1$ | Fonction de Bessel de première espèce d'ordre 1 | - |
| $m_p$ | Indice complexe de réfraction de la particule | - |
| $m_r$ | Indice complexe de réfraction relatif | - |
| $N$ | Nombre de réalisations de l'algorithme de Monte Carlo | - |
| $n_e$ | Indice de réfraction du milieu environnant | - |
| $n_p$ | Partie réelle de l'indice complexe de réfraction de la particule | - |
| $n_r$ | Partie réelle de l'indice complexe de réfraction relatif | - |
| $Q$ | Efficacité | $m^2$ |
| $R$ | Rapport d'élongation | - |
| $R_s$ | Rayon d'une particule sphérique | m |
| $r_{eq}$ | Rayon de la sphère équivalente en volume | m |
| $S_{pq}$ | Élément de la matrice amplitude de diffusion | $m^2$ |
| $V_p$ | Volume de la particule | $m^3$ |
| $w$ | Poids de Monte Carlo de la section efficace différentielle de diffusion | $m^2$ |
| $w_{abs}$ | Poids de Monte Carlo de la section efficace d'absorption | $m^2$ |
| $w_{ext}$ | Poids de Monte Carlo de la section efficace d'extinction | $m^2$ |
| $w_{pq}$ | Poids de Monte Carlo de l'élément $S_{pq}$ de la matrice amplitude de diffusion | $m^2$ |
| $W_{sca}$ | Section efficace différentielle de diffusion | $m^2/sr$ |
| $w_{sca}$ | Poids de Monte Carlo de la section efficace de diffusion | $m^2$ |
| $x$ | Paramètre de taille | - |

**Exposants**

| | |
|---|---|
| $*$ | Conjugaison d'un nombre complexe |
| $\star$ | Estimation d'une grandeur calculée par la méthode de Monte Carlo |

**Indices**

| | |
|---|---|
| $abs$ | absorption |
| $ext$ | extinction |
| $inc$ | incident |

| | | |
|---|---|---|
| $sca$ | diffusion ou diffusé | |

**Grandeurs Vectorielles**

| | | |
|---|---|---|
| $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ | Champ électrique incident | V/m |
| $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ | Champ électrique diffusé | V/m |
| $\vec{\mathscr{H}}_{inc}$ | Champ magnétique incident | V/m |
| $\vec{\mathscr{H}}_{sca}$ | Champ magnétique diffusé | V/m |
| $\vec{\Pi}$ | Vecteur de Poynting | V/m |
| $\vec{e}_i$ | Vecteur unitaire de la direction de propagation de l'onde incidente | - |
| $\vec{e}_s$ | Vecteur unitaire de la direction d'observation | - |
| $\vec{k}_i$ | Vecteur d'onde de la direction de propagation de l'onde incidente | $m^{-1}$ |
| $\vec{k}_s$ | Vecteur d'onde de la direction d'observation | $m^{-1}$ |

**Grandeurs Matricielles**

| | | |
|---|---|---|
| $\bar{\bar{G}}$ | Dyade de Green | $\mathrm{m}^{-1}$ |
| $\bar{\bar{G}}^{\mathrm{FF}}$ | Dyade de Green exprimée en champ lointain | $\mathrm{m}^{-1}$ |
| $\bar{\bar{I}}$ | Matrice identité | - |
| $\bar{\bar{S}}$ | Matrice amplitude de diffusion | $\mathrm{m}^2$ |
| $\bar{\bar{w}}$ | Matrice complexe poids de Monte Carlo de la matrice amplitude de diffusion | $\mathrm{m}^2$ |
| $P_{\mathcal{B}_c}^{\mathcal{B}_i}$ | Matrice de passage de la base $\mathcal{B}_c$ à la base $\mathcal{B}_i$ | - |
| $P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_c}$ | Matrice de passage de la base $\mathcal{B}_s$ à la base $\mathcal{B}_c$ | - |
| $P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}$ | Matrice de passage de la base $\mathcal{B}_s$ à la base $\mathcal{B}_i$ | - |

**Autres Symboles**

| | |
|---|---|
| div | Opérateur divergent |
| $\overrightarrow{\mathrm{grad}}$ | Opérateur gradient |
| $\mathfrak{Im}$ | Partie imaginaire |
| $\mathbb{C}$ | Espace des nombres complexes |
| $\mathbb{N}$ | Espace des entiers naturels |
| $\mathbb{R}$ | Espace des nombres réels |
| $\partial_\pi G$ | Sensibilité de la grandeur $G$ par rapport à un paramètre $\pi$ |
| $\mathfrak{Re}$ | Partie réelle |
| $\overrightarrow{\mathrm{rot}}$ | Opérateur rotationnel |

**Accents**

| | |
|---|---|
| $\hat{}$ | Grandeur calculée pour une particule isolée |
| $\tilde{}$ | Grandeur calculée pour une particule en tenant compte de la distribution d'orientation des particules |

# *Table des matières*


**I Introduction** **1**

I.1 Contexte et organisation du manuscrit . . . . . 1

I.2 Diffusion d'une onde par une particule . . . . . 11

I.2.1 Positionnement du problème physique . . . . . 11

I.2.2 Approximation du champ lointain . . . . . 12

I.2.3 Paramètres du problème . . . . . 13

I.2.4 Caractérisation de l'interaction onde-particule : notions de propriétés radiatives . . . . . 15

I.2.4.1 Matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ . . . . . 15

I.2.4.2 Paramètres et matrice de Stokes . . . . . 16

I.2.4.3 Propriétés radiatives . . . . . 19

I.2.5 Ensemble de particules : hypothèse de diffusion indépendante . . . 21

**II État de l'art** **23**

II.1 Calcul des propriétés radiatives . . . . . 23

II.1.1 Formulations du problème de diffusion onde-particule . . . . . 23

II.1.2 Méthodes numériques disponibles pour la résolution du problème de la diffusion onde-particule . . . . . 24

II.1.2.1 Méthode de séparation des variables et approche de Lorenz-Mie . . . . . 26

II.1.2.2 Méthode T-Matrix . . . . . 27

II.1.2.3 Méthode DDA (*Discrete Dipole Approximation*) . . . . . 32

II.1.2.4 Méthode FDTD (*Finite Difference Time Domain*) . . . . 34

II.1.2.5 Synthèse . . . . . 36

II.1.3 Approximations . . . . . 38

II.1.3.1 Approximation de Rayleigh-Gans-Debye . . . . . 38

II.1.3.2 Approximation de Born . . . . . 43

II.1.3.3 Approximation de la diffraction anomale . . . . . 43

II.1.3.4 Approximation de Schiff . . . . . 47

II.1.3.5 Synthèse . . . . . 47

II.2 Méthode de Monte Carlo . . . . . 49

II.2.1 Principe du calcul d'une intégrale . . . 49
II.2.2 Avantages au niveau informatique : gestion des géométries complexes et parallélisation . . . 51
II.2.3 Formulation intégrale, analyse de sensibilité, gestion des non-linéarités et principe de zéro-variance . . . 52
II.2.3.1 Intégrales multiples et domaine d'intégration à dimension élevée . . . 52
II.2.3.2 Analyse de sensibilité . . . 52
II.2.3.3 Monte Carlo et non linéarités . . . 53
II.2.3.4 Optimisation des algorithmes par application du principe de zéro variance . . . 54
II.3 Conclusion . . . 54

**III Établissement de formulations intégrales d'électromagnétisme étudiées dans ce manuscrit 57**
III.1 Équations de Maxwell . . . 57
III.1.1 Bref historique de la naissance de l'électromagnétisme . . . 57
III.1.2 Équations de Maxwell dans le domaine temporel . . . 59
III.1.3 Équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel . . . 61
III.2 Équation d'onde du problème de diffusion . . . 62
III.3 Formulation intégrale du champ diffusé . . . 65
III.3.1 Équation différentielle vérifiée par le champ diffusé . . . 65
III.3.2 Fonction de Green scalaire . . . 66
III.3.3 Formulation intégrale du champ électrique diffusé pour une position d'observation extérieure à la particule . . . 67
III.4 Établissement des formulations intégrales dans le cadre de l'approximation de Born . . . 72
III.4.1 Formulation intégrale du champ diffusé . . . 72
III.4.2 Formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion . . . 73
III.4.3 Formulations intégrales des propriétés radiatives d'une particule isolée 77
III.5 Établissement de l'équation intégrale de Fredholm à la base du développement en série de Born . . . 78
III.5.1 Formulations intégrales du champ électrique diffusé et gestion de la singularité . . . 80
III.5.2 Formulation intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r})$ négligeant un petit volume d'exclusion . . . 89
III.5.3 Formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ . . . 91
III.5.4 Formulations intégrales des propriétés radiatives d'une particule isolée 94

III.6 Établissement des formulations intégrales dans le cadre de l'approximation de Schiff . . . 94
III.6.1 Formulation intégrale du champ électrique . . . 95
III.6.2 Formulation intégrale de l'amplitude de diffusion . . . 106
III.6.3 Formulations intégrales des propriétés radiatives d'une particule isolée 109
III.7 Conclusion . . . 111

**IV Approximation de Schiff 113**
IV.1 Conception des algorithmes par formulation intégrale . . . 114
IV.1.1 Sections efficaces . . . 114
IV.1.1.1 Section efficace d'extinction : construction détaillée d'un premier algorithme . . . 114
IV.1.1.2 Un algorithme évaluant simultanément les sections efficaces d'extinction, d'absorption et de diffusion . . . 122
IV.1.2 Amplitude de diffusion aux petits angles de diffusion : un premier algorithme évaluant une grandeur complexe . . . 124
IV.1.3 Section efficace différentielle de diffusion : traitement des non-linéarités 126
IV.1.4 Optimisation d'un algorithme par réduction du domaine d'intégration 131
IV.1.5 Fonction cumulée de la section efficace différentielle de diffusion . . . 135
IV.1.6 Calcul systématique de sensibilités . . . 136
IV.1.6.1 Calcul de sensibilités des sections efficaces . . . 137
IV.1.6.2 Calcul des sensibilités $n^{ème}$ des sections efficaces . . . 140
IV.1.6.3 Calcul des sensibilités de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ . . . 142
IV.1.6.4 Calcul des sensibilités de la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ dans le cas d'une particule de taille et d'orientation fixées . . . 146
IV.1.7 Construction d'un algorithme évaluant simultanément toutes les propriétés radiatives d'une suspension de particules et leurs sensibilités . . . 151
IV.2 Mise en œuvre pratique . . . 154
IV.2.1 Géométries simples définies par des équations paramétriques quadratiques à symétrie de révolution : application aux cylindres et sphéroïdes . . . 154
IV.2.1.1 Étude d'une suspension de particules sphéroïdales homogènes . . . 155
IV.2.1.2 Étude d'une suspension de particules cylindriques homogènes . . . 161

IV.2.2 Géométries complexes . . . 167
IV.3 Résultats . . . 177
IV.3.1 Validation numérique de nos codes de Monte Carlo . . . 177
IV.3.1.1 Validation de nos codes de Monte Carlo avec un code T-Matrix sur une suspension constituée de particules homothétiques, homogènes et de forme soit cylindrique soit sphéroïdale . . . 178
IV.3.1.2 Validation avec un code ADDA sur une particule sphéroïdale homogène . . . 185
IV.3.2 Vers une validation expérimentale de nos codes . . . 188
IV.3.3 Application du calcul de sensibilité pour la propagation de l'incertitude d'un paramètre sur une grandeur . . . 193
IV.4 Conclusion . . . 197

**V Approximations de Born, de Rayleigh-Gans-Debye et variantes 199**
V.1 Conception des algorithmes par formulation intégrale . . . 200
V.1.1 Champ électrique diffusé . . . 200
V.1.2 Matrice amplitude de diffusion . . . 202
V.1.3 Section efficace différentielle de diffusion . . . 203
V.1.4 Sections efficaces . . . 208
V.1.5 Calcul systématique de sensibilités . . . 211
V.1.6 Conclusion . . . 214
V.2 Mise en œuvre pratique . . . 215
V.2.1 Procédures d'échantillonnages . . . 215
V.2.2 Retour sur la formulation intégrale et algorithme détaillé . . . 221
V.2.3 Mise en œuvre des variantes de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye . . . 224
V.3 Résultats et validations . . . 225
V.3.1 Validation de nos algorithmes de Monte Carlo . . . 226
V.3.2 Validation du calcul de sensibilités par les différences finies . . . 229
V.4 Conclusion . . . 231

**VI Développement en série de Born 233**
VI.1 Introduction . . . 233
VI.2 Formulation statistique du champ électrique interne . . . 237
VI.2.1 Reformulation en espérance de l'opérateur intégral de volume . . . 238
VI.2.2 Espace de chemins . . . 239
VI.2.3 Traitement statistique de la somme infinie . . . 240

VI.2.4 Reformulation en somme de contributions le long d'un chemin . . . 241
VI.2.5 Redite en formulation intégrale . . . 243
VI.2.6 Illustration sur une équation algébrique du traitement de l'équation de Fredholm Eq. VI.1 proposé jusqu'ici . . . 246
VI.3 Algorithmes de Monte Carlo . . . 249
VI.3.1 Test de Bernoulli . . . 249
VI.3.2 Champ électrique interne . . . 249
VI.3.3 Champ électrique diffusé en champ lointain . . . 250
VI.3.4 Matrice amplitude de diffusion . . . 251
VI.3.5 Propriétés radiatives . . . 253
VI.3.6 Calcul systématique de sensibilités . . . 253
VI.3.7 Conclusion . . . 253
VI.4 Un premier choix pour les lois d'échantillonnages statistiques . . . 254
VI.4.1 Introduction . . . 254
VI.4.2 Densités de probabilité des variables aléatoires position . . . 254
VI.4.3 Jeu de probabilités pour les ordres du développement . . . 257
VI.4.4 Résultats . . . 257
VI.4.4.1 Influence de la taille du volume d'exclusion . . . 258
VI.4.4.2 Validations sur des particules sphériques et cylindriques . 261
VI.5 Conclusion . . . 263

**VII Optimisation des algorithmes par application du principe de zéro-variance 265**
VII.1 Introduction . . . 265
VII.2 Approximation de Born . . . 267
VII.2.1 Cas d'une particule sphérique homogène isolée . . . 267
VII.2.1.1 Matrice amplitude de diffusion . . . 267
VII.2.1.2 Optimisation par réduction du domaine d'intégration . . . 268
VII.2.1.3 Optimisation par application du principe de zéro-variance 271
VII.2.2 Application à une particule sphéroïdale homogène isolée . . . 276
VII.2.2.1 Matrice amplitude de diffusion . . . 276
VII.2.2.2 Optimisation par réduction du domaine d'intégration . . . 277
VII.2.2.3 Résolution de l'intégrale $S_{22}$ en utilisant la PDF optimale construite sur une particule sphérique . . . 279
VII.2.2.4 Application du principe de zéro-variance . . . 282
VII.3 Vers une optimisation du développement en série de Born . . . 286
VII.4 Conclusion . . . 289

**VIIIConclusion** **291**

**A Approche de Lorenz-Mie** **295**

**B Méthode EBCM - Extended Boundary Condition Method** **299**

B.1 Principe de l'approche T-Matrix . . . . . 299

B.2 Méthode EBCM - Extended Boundary Condition Method . . . . . 301

**C Méthode DDA** **307**

**D Compléments approximation de Rayleigh-Gans-Debye** **311**

D.1 Expressions des facteurs de forme pour quelques géométries . . . . . 311

D.1.1 Facteur de forme d'une particule sphérique . . . . . 311

D.1.2 Facteurs de forme : sphéroïde et cylindre . . . . . 313

D.1.3 Facteur de forme : cylindre avec extrémités sphériques . . . . . 314

D.2 Expression de l'efficacité de diffusion d'une particule sphérique . . . . . 314

D.3 Variantes de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye . . . . . 317

D.3.1 Modification proposée par Saxon . . . . . 317

D.3.2 Modification proposée par Shimizu . . . . . 318

D.3.3 Modification proposée par Gordon . . . . . 320

D.3.4 Modification proposée par Kómar . . . . . 322

D.3.5 Extensions des variantes de Saxon et Shimizu aux géométries cylindriques et sphéroïdales . . . . . 323

**E Compléments sur l'approximation de la diffraction anomale** **325**

**F Rappels de statistiques** **329**

F.1 Notions d'expérience aléatoire, d'événement et de variable aléatoire . . . 329

F.2 Loi de probabilité d'une variable aléatoire, fonction densité de probabilité et fonction de répartition . . . . . 330

F.3 Espérance, variance et écart-type d'une variable aléatoire . . . . . 332

F.4 Échantillonnage d'un nombre aléatoire . . . . . 334

F.4.1 Méthode de la cumulée inverse . . . . . 334

F.4.2 Méthode de rejet . . . . . 337

F.5 Lois des grands nombres et théorème central limite . . . . . 338

**G Compléments sur l'approximation de Schiff** **341**

G.1 Calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_{n+m}(Eq.\ III.171)$ . . . . . 341

G.2 Section efficace différentielle aux grands angles de diffusion . . . . . 348

G.3 Comparaison des résultats de l'approximation de Schiff avec ceux obtenus expérimentalement à l'Institut Fresnel, et ceux de référence obtenus avec T-Matrix . . . 351

**H Compléments sur l'approximation de Born 357**

H.1 Démonstration de Eq.III.92 . . . 357

H.2 Expression de la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ à partir du vecteur de Poynting . . . 358

H.2.1 Rappel vecteur de Poynting . . . 358

H.2.2 Puissance absorbée et section efficace d'absorption . . . 359

H.3 Calcul de sensibilités - Démonstration de Eq. H.28 . . . 361

**I Compléments sur le développement en série de Born 365**

I.1 Expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ dans le cas d'un volume d'exclusion sphérique non centré sur la singularité . . . 365

I.2 Matrice amplitude de diffusion : formulation intégrale et algorithme . . . 368

I.3 Propriétés radiatives . . . 372

I.3.1 Section efficace différentielle de diffusion . . . 372

I.3.2 Sections efficaces . . . 374

I.4 Calcul systématique de sensibilités . . . 377

I.4.1 Matrice amplitude de diffusion . . . 377

I.4.2 Propriétés radiatives . . . 380

**J Fonction de Green scalaire et dyade de Green en champ lointain 381**

J.1 Fonction de Green scalaire . . . 381

J.2 Expression de la dyade de Green $\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)$ en champ lointain . . . 383

**K Matrice de passage 387**

K.1 Rappels sur les matrices de changement de bases . . . 387

K.1.1 Matrices de changement de bases . . . 387

K.1.2 Changement de base : cas d'un vecteur . . . 387

K.1.3 Changement de base : cas d'une matrice . . . 387

K.2 Expression de la matrice de passage $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}$ . . . 388

K.3 Calcul de $\left\{\left[\bar{\bar{I}}-\vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}$ . . . 389

K.4 Calcul de $\left\{\left[\bar{\bar{I}}-\vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]M_1M_2\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}$ . . . 389

# CHAPITRE I

# Introduction

## I.1 Contexte et organisation du manuscrit

L'obtention des propriétés radiatives de particules non sphériques est une difficulté récurrente pour la modélisation et la compréhension de nombreuses applications relevant des domaines de l'ingénierie et de la recherche, tels que ceux de l'astrophysique, de la physique de l'atmosphère, du biomédical, de l'ingénierie de la photosynthèse, ... . Ainsi, les particules étudiées sont nombreuses et variées : globules rouges, micro-organismes, cristaux de glaces, aérosols, poussières interstellaires, ... . L'étude des propriétés radiatives de telles particules présente divers enjeux importants pour les différentes communautés précédemment citées. Par exemple, en physique de l'atmosphère, l'étude des propriétés radiatives des aérosols et des cristaux de glace est indispensable à l'amélioration des modèles de rayonnement. Il s'agit alors de mieux comprendre l'impact de ces particules sur le climat dans la mesure où elles perturbent non seulement l'équilibre radiatif de la Terre [Liou, 1986; Konoshonkin et al., 2016; Boucher, 2015], mais également la qualité de l'air [Kokhanovsky, 2008; Burton et al., 2017]. Dans le domaine de l'ingénierie biomédicale, l'enjeu est considérable puisque l'étude de l'interaction d'une onde avec des cellules humaines (globules rouges ou blancs, par exemple) permet d'identifier le stade d'évolution d'une maladie telle que le cancer du sang [Yurkin, 2007] dont la leucémie [Dannhauser et al., 2017]. Dans le domaine de l'ingénierie de la photosynthèse, sur lequel nous reviendrons plus en détails dans la suite de ce manuscrit, la connaissance précise des propriétés radiatives des particules est nécessaire à l'optimisation des procédés photo-réactifs en vue de produire, par exemple, des biocarburants ou carburants solaires (hydrogène, gaz de synthèse, méthanol,...) et ainsi contribuer au développement des énergies renouvelables [Dauchet et al., 2015, 2016b].

Tous ces problèmes nécessitent la modélisation des transferts radiatifs qui eux mêmes dépendent des propriétés radiatives des particules. Pour calculer ces propriétés radiatives, il faut traiter le problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule. Pour cela nous avons recours à la résolution des équations de Maxwell. Or, les méthodes

de résolution numérique actuelles d'un tel problème présentent certaines limites dès lors qu'il s'agit de traiter des particules de formes complexes, de grande taille devant la longueur d'onde (sans toutefois approcher le domaine d'application de l'optique géométrique) et/ou avec des grands contrastes d'indice (*i.e.* l'indice de réfraction de la particule est très différent de celui de son milieu environnant). Ces limites sont principalement dues à la précision en virgule flottante pour les méthodes basées sur une décomposition en base de fonction ou bien à la limitation des ressources informatiques (tailles et accès mémoires, nombres de processeurs, ...) pour les méthodes basées sur une discrétisation en surface ou en volume de la particule [Kahnert, 2003]. À ces difficultés pour l'étude d'une particule unique, s'ajoute aussi la nécessité de prendre en compte les distributions des tailles, des orientations et parfois des formes de particules au sein des suspensions d'intérêt. Compte tenu de ces difficultés clairement identifiées dans la littérature, d'autres alternatives peuvent être envisagées telles que l'utilisation de modèles approchés de l'interaction onde-particule [Van de Hulst, 1957; Bohren and Huffman, 1983; Sharma and Somerford, 2006], ou encore la mise en place de dispositifs expérimentaux de pointe [Muñoz and Hovenier, 2011; Vaillon et al., 2011]. Dans tous les cas, quelque soit la démarche adoptée pour obtenir les propriétés radiatives de particules, une forte activité de recherche est menée actuellement pour étendre les domaines d'application des méthodes numériques basées sur la résolution de modèles exacts ou approchés. D'autres chercheurs développent dans ce contexte des méthodes expérimentales.

Dans ce contexte général, l'objectif de cette thèse consiste à résoudre numériquement des modèles du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule, en vue d'obtenir les propriétés radiatives de suspensions de particules. Les modèles étudiés sont basés sur les équations de Maxwell et en particulier des solutions de l'équation de Helmholtz. Toutefois, l'originalité de cette thèse ne se fonde pas dans la création de nouveaux modèles (nous prendrons ceux qui existent déjà), mais plutôt dans l'approche suivie pour les formuler et les résoudre. Nous proposons un travail de reformulation statistique en intégrales de chemin permettant une résolution des modèles d'interaction onde-particule par la méthode de Monte Carlo. À notre connaissance, l'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour aborder un tel problème n'a jamais été traitée. Elle est déjà utilisée pour simuler des statistiques de paramètres d'entrée des équations de Maxwell (permittivité, géométrie...) par exemple pour mener des analyses de risques dans le domaine de la compatibilité électromagnétique, où un enjeu important est la prise en compte de la variabilité de l'environnement. Mais dans ces travaux, pour chaque configuration générée aléatoirement par Monte Carlo, les équations de Maxwell sont généralement résolues par des modèles déterministes. Ces calculs déterministes sont ainsi lancés autant de fois qu'il y a de configurations aléatoirement générés, conduisant à une augmentation signi-

ficative des temps de calcul par rapport à l'étude d'une seule configuration. Cette thèse est à notre connaissance la première tentative d'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour résoudre les équations de Maxwell elles-mêmes. Une motivation forte de ce travail est notamment de développer une approche statistique de résolution qui soit cohérente avec la description statistique des configurations électromagnétiques. Ainsi, on peut, par exemple, espérer que les temps de calculs seront les mêmes pour résoudre le problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule unique, ou pour une population de particules incluant les statistiques de taille, de forme et d'orientation.

Ce travail présente un intérêt majeur pour toutes les communautés citées au début de cette introduction, mais plus particulièrement, dans le cadre de la fédération de recherche CNRS FédEsol sur les photoprocédés solaires, il concerne directement les laboratoires d'excellence IMobS$^3$ (dont l'Institut Pascal à Clermont-Ferrand) via le défi "procédés de production d'énergie pour la mobilité" et SOLSTICE (PROMES à Perpignan et Odeillo - RAPSODEE à Albi - IES à Montpellier) qui ont conjointement financé ce travail. Ainsi, cette thèse a été co-dirigée par Cyril Caliot (PROMES, Odeillo) et Jean-François Cornet (Institut Pascal, Clermont-Ferrand) et encadrée par Jérémi Dauchet (Institut Pascal). L'équipe de Jean-François Cornet a une expérience indéniable depuis une vingtaine d'années dans l'établissement de modèles de connaissance des photobioréacteurs utilisant des micro-organismes photosynthétiques. Fort de cette expérience, les particules étudiées dans ce manuscrit seront souvent illustrées par des micro-organismes photosynthétiques. L'avantage est que nous bénéficions de bases de données issues de leurs travaux de recherches. Dans ce contexte, il faut bien comprendre également qu'un autre intérêt majeur de l'approche statistique par formulation intégrale employée dans cette thèse est qu'elle permet de rechercher la solution d'un modèle multi-échelle extrêmement complexe du procédé d'une façon unifiée à toutes les échelles (nous y reviendrons) et ainsi d'espérer un gain de temps calcul considérable lors de la résolution de ce modèle par la méthode de Monte Carlo (sans compter de nombreux autres avantages qui seront détaillés dans ce manuscrit). De plus, il convient de noter que les développements algorithmiques qui seront effectués sont tout à fait compatibles avec d'autres types de particules (sous réserve d'être dans le cadre de validité des modèles qui vont être considérés).

L'originalité de cette thèse repose donc sur une compétence scientifique forte autour de la méthode de Monte Carlo et de sa mise en œuvre. Cette thèse s'est donc déroulée au laboratoire RAPSODEE [1] à Albi sous le co-encadrement de Mouna El Hafi. Cette thèse s'est également déroulée en collaboration avec Richard Fournier et Stéphane Blanco

1. RAPSODEE : Recherche d'Albi en génie des Procédés des Solides Divisés, de l'Énergie et de l'Environnement

du laboratoire LAPLACE [2] à Toulouse ainsi qu'avec la collaboration de Méso-Star, une entreprise d'ingénierie informatique. Cette dernière est spécialiste de la mise en œuvre informatique de la méthode de Monte Carlo en géométrie complexe. Son savoir-faire et ses compétences sont indispensables pour envisager la mise à disposition de logiciels permettant de calculer les propriétés radiatives de particules de formes arbitraires à partir des algorithmes développés au cours de ce travail.

Dans un périmètre plus large autour de cette thèse, mais toujours dans le cadre de l'axe photoprocédés de la fédération FédEsol, une collaboration avec des chercheurs de l'Institut Fresnel de Marseille (équipe HIPE [3]) nous donne accès à des résultats expérimentaux obtenus par analogie micro-onde. Des mesures menées par Hassan Saleh dans le cadre de sa thèse à l'Institut Fresnel [Saleh, 2017], sur des cibles analogues de micro-organismes photosynthétiques ayant des géométries sphéroïdales simples, seront comparées à nos résultats (ce qui a d'ailleurs fait l'objet d'une publication [Saleh et al., 2017]). Cet échange s'inscrit dans une perspective collaborative à plus long terme, qui permettra de valider des approximations d'intérêt et les algorithmes pour les résoudre, sur des géométries plus complexes pour lesquelles nous ne disposons pas aujourd'hui de solutions numériques de référence.

Avant de fournir une justification plus précise du choix de la méthode de Monte Carlo pour résoudre le problème de diffusion électromagnétique dans cette thèse, nous présentons brièvement dans la suite ce qui a initialement motivé ce travail, à savoir les enjeux en ingénierie de la photosynthèse.

L'ingénierie de la photosynthèse est désormais reconnue comme une alternative possible à la raréfaction des ressources fossiles ainsi qu'à la limitation du réchauffement climatique. Ceci est tout à fait justifié puisque c'est justement la photosynthèse, sur de très longues périodes temporelles, qui est à l'origine de ces ressources fossiles. Basé sur ces considérations, le développement de procédés reproduisant la réaction de la photosynthèse en seulement quelques jours est un enjeu de taille pour trouver d'autres alternatives aux énergies non renouvelables et ainsi, à moyen terme, remplacer les filières du pétrole, du gaz et de la pétrochimie par celle des photo-procédés, des bioraffineries et de la chimie du végétal.

Parmi les dispositifs les plus matures, on trouve les photobioréacteurs pour lesquels la réaction de photosynthèse naturelle est mise en œuvre par des micro-organismes photosynthétiques (qui sont des micro-organismes vivants) plongés dans une solution aqueuse. Plus précisément, un photobioréacteur permet, à partir du rayonnement solaire et d'élé-

2. LAPLACE : LAboratoire PLAsma et Conversion d'Énergie
3. HIPE : Hyperfrequency, Instrumentation, Processing, Experimentation

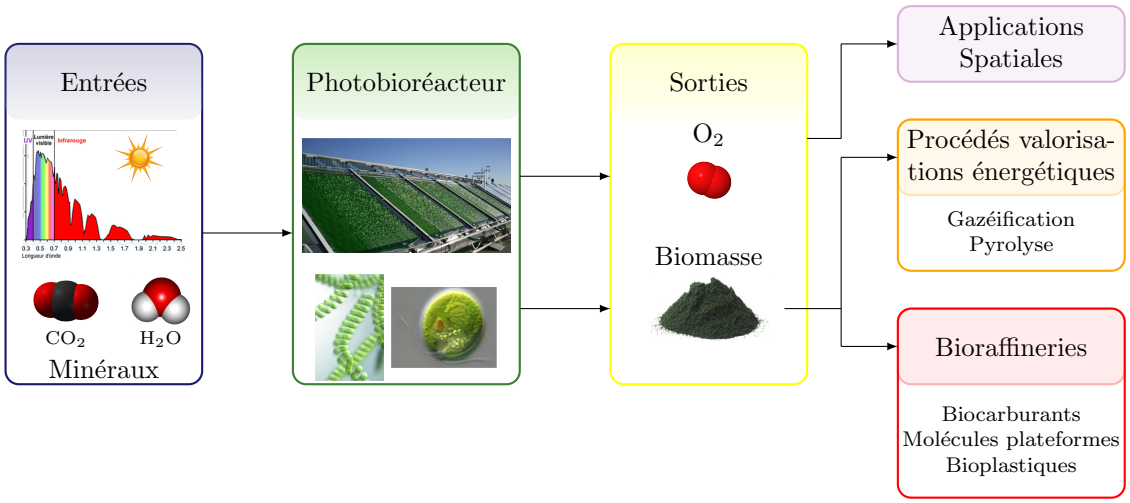



FIGURE I.1 – Illustration des entrées et sorties d'un photobioréacteur dédié à la culture de micro-organismes photosynthétiques ainsi que des applications possibles.

ments abondants sur Terre tels que le dioxyde de carbone $CO_2$, l'eau $H_2O$ ainsi que des nutriments minéraux aidant à la croissance des micro-algues, de produire des molécules d'intérêts telles que le dioxygène $O_2$ et la biomasse constituée d'un grand nombre de molécules complexes (lipides, sucres, protéines, biocarburants de troisième génération ....) (voir Fig. I.1). Le dioxygène produit trouve des applications dans le domaine du spatial pour la survie des astronautes (voir le projet MELiSSA [4] de l'Agence Spatiale Européenne [Farges et al., 2008]). La biomasse produite est également valorisée et peut servir d'alimentation. Elle peut également être utilisée dans des procédés de gazéification ou de pyrolyse en vue de produire de l'énergie sous forme de chaleur. Par ailleurs, elle permet de produire des molécules à haute valeur ajoutée pour l'industrie chimique ou la cosmétique. Elle peut notamment être valorisée sous forme de biocarburants.

Alors que les photobioréacteurs sont basés sur la photosynthèse naturelle, il existe d'autres procédés, appelés photoréacteurs, qui utilisent la photosynthèse artificielle. Dans ce cas, les catalyseurs ne sont plus des organismes vivants mais des particules solides de type semi-conducteurs telles que les particules de dioxyde de titane $TiO_2$ ou de sulfure de cadmium CdS. La mise en oeuvre de ce type de procédé permet notamment de produire du dihydrogène $H_2$ qui peut être valorisé en tant que vecteur énergétique stockable [Huang et al., 2011; Xing et al., 2013]. Les particules considérées ont d'autres caractéristiques optiques. Nous verrons plus tard que le travail de cette thèse pourra servir de base pour aborder ce type de particules.

4. MELiSSA : Micro-Ecological Life Support System Alternative - `http://www.melissafoundation.org/`

Quelque soit le type de photo-procédé utilisé (photobioréacteur ou photoréacteur), il est nécessaire d'optimiser sa performance afin d'obtenir des rendements thermodynamiques supérieurs à 10%. Il a été montré que ces procédés sont principalement limités par le transfert de rayonnement [Aiba, 1982; Cornet, 2010; Pruvost and Cornet, 2012]. Plus précisément, les performances du procédé sont déterminées par le champ de rayonnement au sein du volume réactionnel. Ce champ est hétérogène, ce qui signifie que la répartition de la lumière n'est pas la même en tout point du volume, et à chaque position, la photosynthèse dépend du rayonnement localement disponible. Par conséquent, le champ de rayonnement a un impact significatif sur le rendement énergétique et même sur la composition de la biomasse dans le cas d'un photobioréacteur. Pour connaître précisément ce dernier, il est nécessaire de résoudre l'équation de transfert de rayonnement donnée par :

$$\vec{\omega} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \mathcal{L}_\nu(\vec{r},\vec{\omega}) = -C\sigma_{ext}\mathcal{L}_\nu(\vec{r},\vec{\omega}) + C\sigma_{sca} \iint_{4\pi} \mathcal{L}_\nu(\vec{r},\vec{\omega}) p_{\vec{\omega},\nu}(\vec{\omega} \mid \vec{\omega}') d\vec{\omega}' \qquad \text{(I.1)}$$

Cette équation fait en particulier intervenir les propriétés radiatives, à savoir les sections efficaces d'extinction $\sigma_{ext}$ et de diffusion $\sigma_{sca}$, ainsi que la fonction de phase $p_{\vec{\omega},\nu}$. $\mathcal{L}$ désigne la luminance et $C$ est la concentration d'une suspension de particules (par exemple une suspension de micro-organismes). Le premier terme de Eq. I.1, $\vec{\omega} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \mathcal{L}_\nu(\vec{r},\vec{\omega})$, correspond à un terme de transport des photons. Le second terme est un terme puits traduisant la perte d'énergie du rayonnement incident provoquée par une absorption ou par une diffusion. Enfin, le terme intégral (troisième terme) correspond à un gain d'énergie : celui ci est dû aux photons se propageant dans la direction $\vec{\omega}'$ et diffusés dans la direction d'observation $\vec{\omega}$. Compte tenu de l'équation, la connaissance précise des propriétés radiatives spectrales des particules (les catalyseurs vivants ou synthétiques dans ce manuscrit) est indispensable pour déterminer le champ de luminance $\mathcal{L}_\nu$ qui permettra de calculer les transferts radiatifs pour le procédé considéré. La question qui se pose à ce niveau est de savoir quelle démarche faut-il adopter pour parvenir à calculer ces propriétés radiatives. Comme nous l'avons déjà mentionné, ce calcul nécessite de résoudre les équations de Maxwell. Or pour y parvenir, il est nécessaire de déterminer, au préalable, les propriétés physiques de la suspension de particules (formes, propriétés optiques, distribution de taille). L'expertise de l'Institut Pascal a permis d'obtenir ces données en mettant en place une chaîne de modélisation prédictive introduite par Jean-François Cornet et décrite dans la référence [Dauchet et al., 2015]. Elle a également fait l'objet de développements récents par Jérémi Dauchet dans le cadre des photobioréacteurs [Dauchet, 2012], puis elle a été adaptée aux photoréacteurs dans la thèse de Ghiles Dahi [Dahi, 2016] pour la photosynthèse artificielle. Plus précisément, cette approche (voir Fig. I.2) propose notamment une démarche pour déterminer les propriétés optiques des particules (indices de réfraction ou permittivités) à partir de leurs compositions et leurs structures internes (par exemple les

concentrations de pigments pour les micro-algues). Ces propriétés optiques, complétées par la caractérisation de la distribution de taille de la suspension ainsi que des formes et des orientations des particules, sont des entrées pour le modèle d'interaction onde-particule qu'il convient de résoudre afin d'obtenir les propriétés radiatives recherchées. C'est sur ce dernier point que se concentre la présente thèse. Dans ce contexte, un intérêt majeur de l'approche statistique envisagée ici est qu'elle permet aussi de résoudre l'équation de transfert radiatif au sein des photo(bio)réacteurs et de leurs systèmes de captation solaire, ainsi que de coupler ces phénomènes de transfert aux réactions de photosynthèse, pour finalement donner les performances énergétiques à l'échelle du procédé [Dauchet, 2012; Dauchet et al., 2013, 2016b]. Ainsi, la présente étude à l'échelle des particules catalytiques est une brique essentielle dans une démarche plus générale de modélisation statistique multi-échelle des photo-procédés (une thèse débute d'ailleurs actuellement sur ce sujet à l'Institut Pacsal, en collaboration avec les laboratoires LAPLACE et RAPSODEE). Les gains attendus à terme grâce à cette approche de modélisation unifiée et sa résolution par la méthode de Monte Carlo sont considérables, tant en terme de temps de calcul qu'en terme d'analyse pour l'optimisation des photo-procédés.

Il est à noter que dans ce manuscrit, l'ensemble des modèles considérés seront issus de la littérature pour lesquels nous ferons l'hypothèse de diffusion indépendante, c'est-à-dire que l'on négligera les interférences entre les ondes diffusées par les particules. Par conséquent, les propriétés radiatives d'une suspension constituée de particules de formes complexes correspondent à une prise de moyenne des propriétés radiatives des particules isolées sur leurs distributions de taille, d'orientation et de forme. Comme nous l'avons déjà évoqué, à l'heure actuelle, l'obtention de ces propriétés radiatives dans une telle configuration ajoute une réelle difficulté pour les méthodes numériques usuelles (que nous aborderons dans Sec. II.1.2). Par exemple, pour les méthodes basées sur une discrétisation d'une particule quelconque, la prise en compte des distributions de taille et d'orientation (sans même parler de celle sur les formes) requiert d'importantes ressources informatiques et de temps de calcul dans la mesure où le calcul doit être refait à chaque nouvelle taille et/ou orientation de la particule [Kahnert, 2003]. L'utilisation de la méthode de Monte Carlo permet de pallier cette difficulté. En effet, si la méthode de Monte Carlo peut-être utilisée pour résoudre le problème de diffusion d'une onde, alors on peut espérer que l'échantillonnage statistique nécessaire à une telle résolution suffise à couvrir également les statistiques de taille, d'orientation et de forme des particules. Ainsi, en tant que méthode statistique, la méthode de Monte Carlo serait en mesure de gérer les distributions de taille, d'orientation et de forme sans que cela n'engendre une augmentation significative du temps de calcul. La méthode de Monte Carlo permet aussi, grâce à l'utilisation des techniques de la synthèse d'images [Pharr et al., 2016], de traiter tout type de géométrie

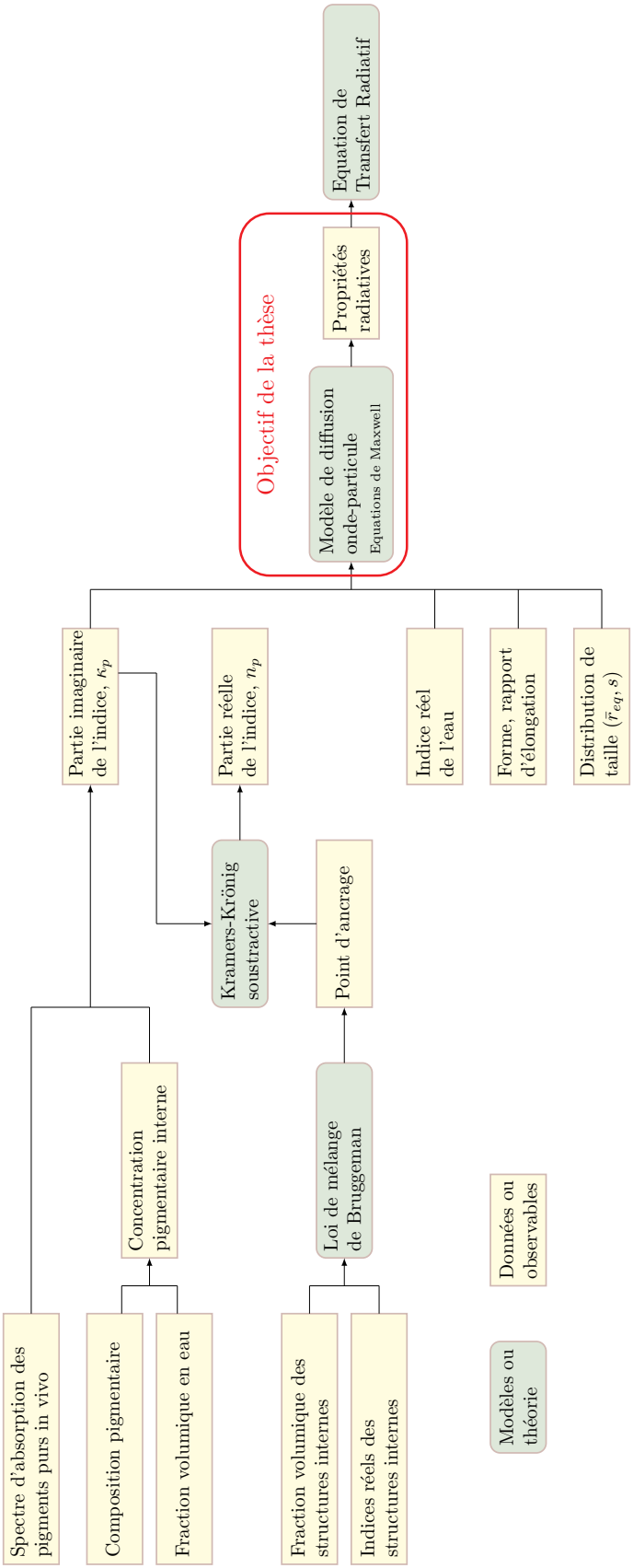



FIGURE I.2 – Chaîne méthodologique développée dans le cadre de l'étude des photobioréacteurs pour l'obtention des propriétés radiatives des micro-organismes photosynthétiques en vue de résoudre l'équation de transfert de rayonnement (adapté d'après [Dauchet et al., 2015]).

complexe. À partir d'un fichier CAO (*Conception Assistée par Ordinateur*), la géométrie peut-être traitée indépendamment de l'algorithme traduisant la physique. De plus, ici la géométrie ne nécessite pas d'être maillée, ce qui n'est pas le cas lorsque l'on utilise les méthodes déterministes[5]. En ce qui concerne ce dernier point, on parle d'orthogonalité données-algorithme (les données sont ici géométriques). D'autres caractéristiques de la méthode de Monte Carlo seront abordées au cours de ce manuscrit, notamment en terme d'analyse des résultats. En effet, outre le fait qu'à chaque estimation d'une grandeur est associée une incertitude, il est possible de réaliser une analyse de sensibilité de ladite grandeur par rapport à un paramètre sans augmentation significative du temps de calcul. Ceci permet ainsi d'étudier l'influence d'un paramètre sur la grandeur considérée, ce qui présente un intérêt dès lors que l'on souhaite augmenter le rendement des procédés, créer des bases de données pour éviter les étapes de calculs de la chaîne présentée en Fig. I.2, propager les incertitudes d'un paramètre sur une grandeur, ou encore traiter des problèmes d'inversions. Dans ce manuscrit, il sera question de construire des algorithmes mettant en œuvre ces techniques (géométrie complexe, statistiques de paramètres, sensibilités) afin de calculer les propriétés radiatives de suspensions, leurs sensibilités à divers paramètres et les incertitudes associées, en tenant compte des géométries complexes des particules ainsi que leurs distributions de taille et d'orientation. Cette démarche sera appliquée pour trois modèles de diffusion onde-particules envisagés ici : l'approximation de Schiff, l'approximation de Born et la solution exacte des équations de Maxwell donnée par le développement en série de Born.

Le premier modèle étudié repose sur l'approximation de Schiff [Schiff, 1956], valable pour des particules de grande taille devant la longueur d'onde et de faible contraste d'indice. Il fera l'objet du chapitre IV, avec comme point de départ les travaux préliminaires engagés lors de la thèse de Jérémi Dauchet sur la résolution de l'approximation de Schiff par la méthode de Monte Carlo dans le cas de particules de formes simples [Dauchet, 2012]. L'objectif de ce chapitre est de revisiter ce travail préliminaire et de mener cette fois au bout la démarche décrite dans le paragraphe précédent, en incluant les calculs de sensibilités, le traitement des géométries complexes et en allant jusqu'à la mise à disposition d'un logiciel libre en collaboration avec l'entreprise Méso-Star. Ce chapitre sera aussi l'occasion de mettre en place une démarche de travail ainsi que des techniques et des outils sur un premier modèle simple d'électromagnétisme, qui permet toutefois de se confronter à un ensemble de difficultés que nous retrouverons tout au long du manuscrit.

5. Par exemple, avec les méthodes déterministes il est généralement considéré qu'une maille doit être plus petite qu'un dixième de la longueur d'onde ; ce n'est pas le cas ici. Le maillage de surface utilisé dans le fichier CAO décrivant la géométrie influe uniquement sur la précision de la description de la forme de la particule et en aucun cas sur la précision numérique avec laquelle le modèle physique est résolu. Quelle que soit la géométrie spécifiée, le modèle est résolu de manière exact dans cette géométrie.

Pour l'étude des plus petites particules présentant des faibles contrastes d'indice, nous considérerons au chapitre V l'approximation de Born (connue aussi sous le nom d'approximation de Rayleigh-Gans-Debye). L'objectif de ce chapitre est double. D'une part, il évalue les capacités d'extensions de la démarche mise au point sur l'approximation de Schiff pour traiter d'autres modèles. D'autre part, il constitue une étude préliminaire en vue d'adresser au chapitre VI les termes d'ordre supérieurs du développement en série de Born (l'approximation de Born est l'ordre zéro dans ce développement).

Ces deux approximations (Schiff et Born), qui présentent d'ailleurs une petite plage de recouvrement, permettent de couvrir toute la gamme d'intérêt de taille des micro-organismes photosynthétiques. Les outils numériques qui seront développés au cours de ces deux chapitres seront directement utilisables par la communauté Photobioréacteurs. Le chapitre VI se concentre quant à lui sur la résolution exacte des équations de Maxwell, toujours dans le contexte des faibles contrastes d'indice, en utilisant le développement en série de Born. Il s'agit ici d'un objectif bien plus ambitieux, qui se confronte aux difficultés largement identifiées dans la littérature, toutes méthodes numériques confondues, lors de la résolution rigoureuse du problème de diffusion électromagnétique pour des particules de forme quelconque. Avec la méthode de Monte Carlo, nous montrons que ces difficultés se traduisent par un problème de convergence numérique pour lequel un cadre d'étude bien défini est disponible : les techniques de réduction de variance. Dans le chapitre VII, l'utilisation d'une de ces techniques - l'approche zéro-variance - est envisagée. L'approximation de Born sera prise comme exemple, permettant d'illustrer la mise en œuvre et les retombées potentielles d'une telle approche, ainsi que de dégager des pistes de travail pour aller, à terme, vers une résolution efficace du problème exact.

Avant cela, dans la suite de ce chapitre, nous allons introduire les concepts d'électromagnétisme qui seront utilisés au cours de ce manuscrit. Ensuite, le chapitre II dressera l'état de l'art des méthodes numériques permettant de résoudre de façon rigoureuse le problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule, en donnant leurs avantages et leurs limites. Certaines de ces méthodes fourniront dans la suite du manuscrit les solutions de références pour des géométries simples (sphère, sphéroïde, cylindre) que nous utiliserons pour la validation de nos algorithmes de Monte Carlo. Nous ferons également de même avec les approximations de l'interaction onde-particule qui ont un intérêt particulier pour notre étude. De plus, nous introduirons dans ce chapitre la méthode de Monte Carlo en exposant d'une part le principe du calcul intégral et d'autres part, les différentes caractéristiques de la méthode qui vont nous permettre, entre autres, de gérer la géométrie complexe, les distributions de taille et d'orientation des particules, de mener une analyse de sensibilité, ainsi que de réduire la variance des algorithmes. Enfin, le chapitre III reprendra des travaux disponibles dans la littérature sur la formalisation du

problème de diffusion électromagnétique en intégrale de volume, menant à l'établissement des expressions des trois modèles qui seront étudiés dans ce manuscrit (approximation de Born, approximation de Schiff et développement en série de Born).

## I.2 Diffusion d'une onde par une particule

### I.2.1 Positionnement du problème physique

La diffusion d'une onde électromagnétique est un phénomène très courant et observable quotidiennement. Par exemple, la plus grande partie de la lumière que nous recevons du Soleil a interagi avec les constituants de l'atmosphère tels que les cristaux de glaces, les aérosols ou les gouttelettes d'eau contenues dans les nuages. Ce phénomène d'interaction lumière-matière va dévier et rediriger la lumière partout dans l'atmosphère jusqu'à éventuellement atteindre nos yeux d'observateur. Autrement dit, la diffusion (*scattering* en anglais) correspond à une interaction entre la matière et une onde électromagnétique (la lumière) qui génère par la suite l'éparpillement directionnel de ladite onde. Toutefois, si on considère une onde électromagnétique se propageant dans le vide ou dans un milieu homogène, cette onde ne subit aucune diffusion. Elle peut éventuellement être atténuée si le milieu considéré est absorbant. Une manière d'observer un phénomène de diffusion est que le milieu possède des discontinuités (par exemple une discontinuité de permittivité).

Dans la suite, nous nous intéressons à l'étude de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule quelconque plongée dans un milieu dit environnant (par exemple un micro-organisme dans l'eau). Plus précisément, considérons un rayonnement incident généré par une source externe. Au vu de l'application envisagée comme fil rouge, à savoir les systèmes photoréactifs, il est d'usage d'utiliser comme source externe soit le Soleil (lumière naturelle) soit une source de lumière artificielle. Le rayonnement incident généré par de telles sources correspond à des ondes électromagnétiques incohérentes et non-polarisées. En tout point de l'espace et en l'absence de la particule, le champ électrique correspond seulement au champ électrique incident $\vec{\mathcal{E}}_{inc}$. En présence de la particule, le champ incident génère des courants induits au sein de la particule qui à leur tour vont rayonner. Ceci peut éventuellement entraîner une modification de la source du rayonnement incident. Dans la suite, nous considérons que ces effets sont négligeables dès lors que la source est située suffisamment loin du diffuseur [Van Bladel, 2007]. Sous cette hypothèse, le champ incident $\vec{\mathcal{E}}_{inc}$ est inchangé quelque soit la présence ou non de la particule, et peut être représenté sous la forme d'une onde plane. En résumé, le problème étudié ici est celui d'une onde électromagnétique plane incidente qui va interagir avec une particule pour donner naissance à une onde diffusée comme cela est schématisé Fig. I.3. Sous

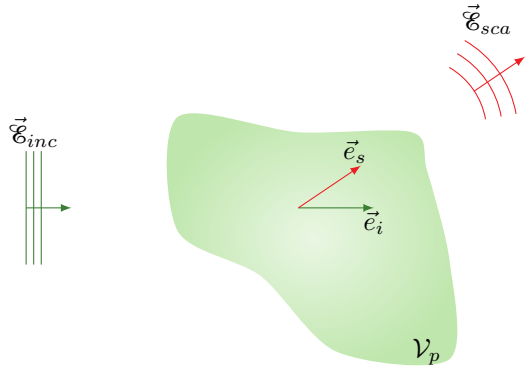



FIGURE I.3 – Schéma représentant le phénomène de diffusion d'une onde électromagnétique plane par une particule de volume $\mathcal{V}_p$. L'interaction entre le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ et la particule donne naissance à un champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$.

l'hypothèse que les sources du champ incident ne sont pas perturbées par la particule, le champ total $\vec{\mathscr{E}}$ en toute position $\vec{r}$ de l'espace est alors vu comme la superposition du champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ et du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ :

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) + \vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) \tag{I.2}$$

À noter que ce champ $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})$ est solution des équations de Maxwell qui seront introduites dans Sec. III.1.2. La notation calligraphié $\vec{\mathscr{E}}$ indique que le champ est exprimé dans le domaine de Fourier (voir Sec. III.1.3).

Avant d'attaquer la résolution d'un tel problème, il est indispensable de connaître plus précisément les caractéristiques des particules (taille, forme, indice de réfraction) ainsi que celui du milieu environnant (en particulier son indice de réfraction) qui seront introduites dans Sec. I.2.3. De plus, puisque l'on cherche à calculer des propriétés radiatives (voir Sec. I.2.4), ce qui nous intéresse c'est le champ électrique diffusé en une position $\vec{r}$ située loin de la particule. Dans ce cas, il est alors possible d'utiliser l'approximation du champ lointain qui fait l'objet de la section suivante.

### I.2.2 Approximation du champ lointain

Lorsque la position d'observation $\vec{r}$ est située suffisamment loin de la particule (voir Fig. I.4), il est possible d'appliquer l'approximation dit de champ lointain. Cette dernière est valide lorsque les trois conditions suivantes sont vérifiées [Mishchenko, 2006] :

- $\forall \vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p, \quad k_e \|\vec{r} - \vec{r}_0\| \gg 1$
- $\forall \vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p, \quad r \gg r_0 \Leftrightarrow k_e r \gg k_e r_0$
- $\forall \vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p, \quad k_e \frac{r_0^2}{2r} \ll 1$

où $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$ désigne le nombre d'onde. Ces trois critères sont purement géométriques et ne dépendent que de la taille de la particule et de la longueur d'onde $\lambda_e$. En particulier, ils ne

dépendent pas de l'indice de réfraction relatif $m_r$. Cette approximation du champ lointain conduit à certaines simplifications dans la formulation du champ électrique diffusé comme nous le verrons plus tard.

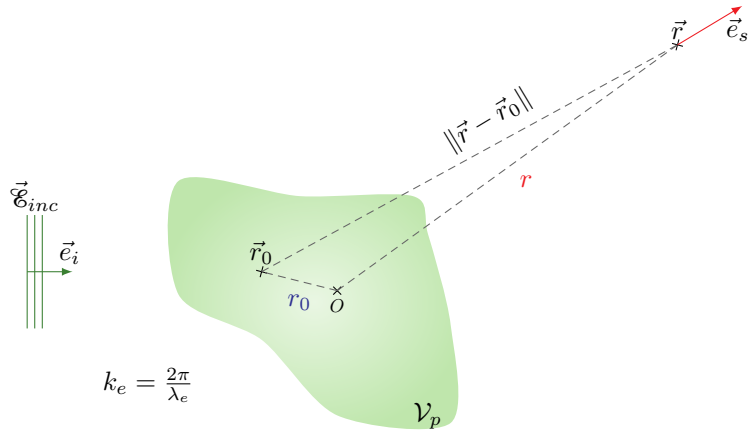



FIGURE I.4 – Approximation du champ lointain. $\vec{r}$ est la position d'observation située loin de la particule. $\vec{r}_0$ est une position appartenant au volume $\mathcal{V}_p$ de la particule. $r$ est la distance entre le centre de la particule $O$ et la position $\vec{r}$. $r_0$ est la distance entre le centre de la particule $O$ et la position $\vec{r}_0$. La particule de volume $\mathcal{V}_p$ est soumise à un rayonnement incident de longueur d'onde $\lambda_e$. $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$ sont respectivement les directions incidente et d'observation.

### I.2.3 Paramètres du problème

L'étude du problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule dépend de trois paramètres : l'indice de réfraction complexe relatif $m_r$, le paramètre de taille $x$ ainsi que la forme de la particule. La connaissance de ces trois paramètres, qui sont détaillés dans la suite, est indispensable avant toute résolution du problème de diffusion.

**Indice de réfraction complexe.** C'est une grandeur complexe, notée $m = n - i\kappa$, permettant de décrire les phénomènes d'atténuation et d'absorption d'une onde. Elle est reliée à la permittivité diélectrique relative complexe $\varepsilon_r$ et à la perméabilité magnétique relative complexe $\mu_r = 1$ (milieu considéré non magnétique) par la relation :

$$m = n - i\kappa = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r} = \sqrt{\varepsilon_r} \tag{I.3}$$

où $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_0}$ avec $\varepsilon_p$ la permittivité diélectrique de la particule, et $\varepsilon_0$ celle du vide. La définition de l'indice de réfraction $m$ donnée par Eq. I.3 implique de définir une permittivité diélectrique complexe que l'on notera $\varepsilon_r = \varepsilon_r' - i\varepsilon_r''$. En utilisant Eq. I.3, les parties réelle $n$ et imaginaire $\kappa$ de l'indice de réfraction $m$ sont reliées avec les parties réelle $\varepsilon_r'$ et

imaginaire $\varepsilon_r''$ de la permittivité électrique relative $\varepsilon_r$ par :

$$\begin{cases} n^2 - \kappa^2 & = \varepsilon_r' \\ 2n\kappa & = \varepsilon_r'' \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} n & = \sqrt{\dfrac{\sqrt{\varepsilon_r'^2 + \varepsilon_r''^2} + \varepsilon_r'}{2}} \\ \kappa & = \sqrt{\dfrac{\sqrt{\varepsilon_r'^2 + \varepsilon_r''^2} - \varepsilon_r'}{2}} \end{cases} \tag{I.4}$$

On peut donner une interprétation physique des quantités $n$ et $\kappa$. La partie réelle $n$ de l'indice de réfraction donne une information sur la vitesse de phase de l'onde. La partie imaginaire $\kappa$ de l'indice de réfraction traduit une atténuation exponentielle de l'onde lors de sa propagation dans le milieu considéré due aux phénomènes d'absorption.

À noter que, dans le cas d'un milieu diélectrique parfait, le rayonnement n'est pas absorbé ($\kappa = 0$). Par conséquent, l'indice de réfraction du milieu est purement réel :

$$m = n = \sqrt{\varepsilon_r} \tag{I.5}$$

**Indice de réfraction complexe relatif $m_r$.** Considérons une suspension de particules d'indice de réfraction complexe $m_p = n_p - i\kappa_p$ plongée dans un milieu diélectrique considéré comme parfait (l'eau aux longueurs d'ondes du visible) d'indice de réfraction réel $n_e$. L'indice de réfraction complexe relatif $m_r$ est défini par :

$$m_r = \frac{m_p}{n_e} = \frac{n_p}{n_e} - i\frac{\kappa_p}{n_e} = n_r - i\kappa_r \tag{I.6}$$

où l'on a posé $n_r = \frac{n_p}{n_e}$ et $\kappa_r = \frac{\kappa_p}{n_e}$.

**Paramètre de taille.** Le paramètre de taille, noté $x$, est une grandeur adimensionnée qui représente le rapport entre la taille caractéristique $r_{eq}$ d'une particule et la longueur d'onde $\lambda_e$ du milieu environnant :

$$x = \frac{2\pi r_{eq}}{\lambda_e} \tag{I.7}$$

avec $\lambda_e = \lambda_0/n_e$, où $\lambda_0$ est la longueur d'onde dans le vide. Dans le cas d'une particule sphérique, la taille caractéristique $r_{eq}$ est son rayon. Pour une particule non-sphérique, nous considérons que $r_{eq}$ est le rayon de la sphère équivalente en volume de la particule.

Comme nous serons amené à considérer une suspension de particules, on peut définir un paramètre de taille moyen $\bar{x}$ :

$$\bar{x} = \frac{2\pi \bar{r}_{eq}}{\lambda_e} \tag{I.8}$$

où $\bar{r}_{eq}$ représente la taille caractéristique moyenne de la distribution de taille définie comme le rayon moyen de la sphère équivalente en volume de la particule considérée.

**Morphologie d'une particule.** La forme d'une particule est également un paramètre à prendre en compte. Dans ce manuscrit, même si l'on est en mesure de traiter n'importe quelle géométrie, nous ferons souvent appel à des particules sphéroïdales et cylindriques (ce sont des géométries de référence pour faire des comparaisons). Ces deux géométries sont définies par leur rapport d'élongation $R$ :

$$R = \frac{a}{b} \tag{I.9}$$

Dans le cas d'un sphéroïde, $a$ correspond au demi-petit axe et $b$ au demi-grand axe. Dans le cas du cylindre, $a$ correspond au rayon et $b$ à la demi-hauteur du cylindre. Nous donnons également les expressions, qui nous seront utiles par la suite, des rayons $r_{eq}$ des sphères équivalentes en volume :

$$r_{eq} = a \left(\frac{1}{R}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{I.10}$$

pour le sphéroïde, et

$$r_{eq} = a \left(\frac{3}{2R}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{I.11}$$

pour le cylindre.

### I.2.4 Caractérisation de l'interaction onde-particule : notions de propriétés radiatives

Cette section définit les grandeurs qui sont couramment utilisées pour caractériser l'interaction onde-particule. Ce sont, généralement, les grandeurs recherchées lorsque l'on résout le problème de diffusion d'une onde par une particule. Elles sont déduites à partir de la connaissance du champ diffusé. Une fois connue, il est alors possible de calculer toutes les grandeurs qui sont introduites dans cette section (matrice amplitude de diffusion, paramètres et matrice de Stokes, et propriétés radiatives).

#### I.2.4.1 Matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$

En champ lointain, le résultat de l'interaction onde-particule est souvent caractérisé par la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$. Cette matrice relie les composantes du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ exprimées en une position $\vec{r}$ située loin de la particule à celles du champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$.

Le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ étant une onde plane, il est orthogonal à la direction de propagation $\vec{e}_i$. Il peut donc être décomposé suivant deux composantes dans la base incidente $\mathcal{B}_i = (\vec{e}_i, \vec{e}_{\theta_i}, \vec{e}_{\varphi_i})$ (voir Fig. I.5) sous la forme suivante :

$$\vec{\mathscr{E}}_{inc} = \mathscr{E}^{\theta}_{inc}\vec{e}_{\theta_i} + \mathscr{E}^{\varphi}_{inc}\vec{e}_{\varphi_i} \tag{I.12}$$

De la même façon, le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$, en champ lointain est localement orthogonal à la direction d'observation $\vec{e}_s$. Il peut donc être décomposé suivant deux composantes dans la base $\mathcal{B}_s = (\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s})$ liée à la position d'observation (voir Fig. I.5) :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca} = \mathscr{E}^{\theta}_{sca}\vec{e}_{\theta_s} + \mathscr{E}^{\varphi}_{sca}\vec{e}_{\varphi_s} \tag{I.13}$$

Pour une position d'observation $\vec{r}$ située suffisamment loin de la particule (champ lointain), la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ est une matrice $2 \times 2$ définie comme :

$$\begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{sca}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{sca}(\vec{r}) \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_s} = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir}\bar{\bar{S}}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) \begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc} \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc} \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_i} = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc} \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc} \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_i} \tag{I.14}$$

où les éléments $S_{pq}$ $((p,q) \in [\![1,2]\!]^2)$ de la matrice $\bar{\bar{S}}$ sont indépendants de la distance $r$ entre la position d'observation et la particule. Ils sont seulement fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$, c'est-à-dire de l'angle formé par les vecteurs $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$, et l'angle $\phi_{sca}$, c'est-à-dire l'angle formé par le plan de diffusion (contenant les vecteurs $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$) et le plan contenant les vecteurs $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_z$ (voir Fig. I.5). Ces éléments dépendent également des caractéristiques (paramètre de taille, indice de réfraction relatif, morphologie, orientation). Il est également à noter que cette matrice contient une matrice de changement de base du fait que le champ diffusé est exprimé dans la base $\mathcal{B}_s$ et le champ incident dans la base $\mathcal{B}_i$.

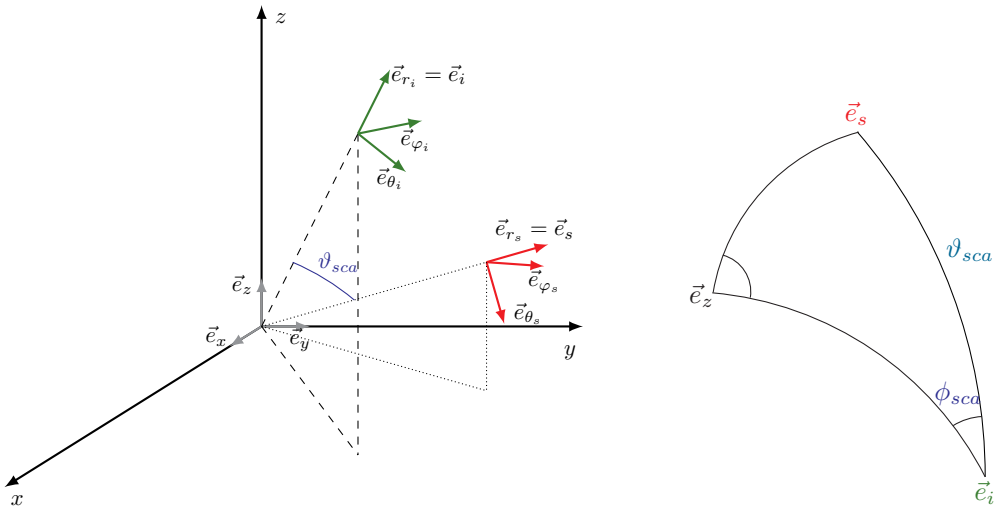



FIGURE I.5 – Définition des bases et des angles utilisés pour définir la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$.

### I.2.4.2 Paramètres et matrice de Stokes

**Paramètres de Stokes.** Les paramètres de Stokes[6], désignent un ensemble de quatre paramètres permettant de décrire l'état de polarisation d'un champ électromagnétique

6. George Gabriel Stokes (1819 - 1903) : mathématicien et physicien britannique.

transverse (*i.e.* orthogonal à sa direction de propagation) : $\vec{\mathscr{E}} = \mathscr{E}^{\theta}\vec{e}_{\theta} + \mathscr{E}^{\varphi}\vec{e}_{\varphi}$, comme dans la section précédente pour les champs incident et diffusé. Les quatre paramètres de Stokes, notés $I, Q, U$ et $V$, sont des grandeurs réelles issues de combinaisons des intensités de composantes $\mathscr{E}^{\theta}$ et $\mathscr{E}^{\varphi}$ du champ. Ils forment un vecteur $\vec{\mathcal{S}}$ nommé **vecteur de Stokes** :

$$\vec{\mathcal{S}} = \begin{bmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}\mathscr{E}^{\theta^*} + \mathscr{E}^{\varphi}\mathscr{E}^{\varphi^*} \\ \mathscr{E}^{\theta}\mathscr{E}^{\theta^*} - \mathscr{E}^{\varphi}\mathscr{E}^{\varphi^*} \\ -\left(\mathscr{E}^{\theta}\mathscr{E}^{\varphi^*} + \mathscr{E}^{\theta^*}\mathscr{E}^{\varphi}\right) \\ i(\mathscr{E}^{\theta}\mathscr{E}^{\varphi^*} - \mathscr{E}^{\theta^*}\mathscr{E}^{\varphi}) \end{bmatrix} \tag{I.15}$$

où l'exposant * désigne le conjugué d'un nombre complexe. La signification physique ainsi que l'intérêt des paramètres de Stokes sont décrits dans de nombreux ouvrages [Van de Hulst, 1957; Bohren and Huffman, 1983; Mishchenko et al., 2002; Borghese et al., 2007; Brehat et al., 2003]. En particulier, donnons la signification du paramètre $I$ qui représente l'intensité totale, exprimée en $Wm^{-2}$, c'est-à-dire la puissance par unité de surface transportée par l'onde considérée. Dans le cas où l'onde électromagnétique est non polarisée (lumière naturelle), les paramètres de Stokes $Q, U$ et $V$ sont égaux à zéro.

**Matrice de Stokes.** Tout comme les composantes du champ diffusé sont reliées à celles du champ incident par la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$, les vecteurs de Stokes incident $\vec{\mathcal{S}}_{inc}$ et diffusé $\vec{\mathcal{S}}_{sca}$ sont reliés par la **matrice de Stokes** $\mathcal{Z}$ [Jones, 1999; Rother and Kahnert, 2014] :

$$\vec{\mathcal{S}}_{sca} = \frac{1}{r^2}\mathcal{Z}(\vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{e}_o)\vec{\mathcal{S}}_{inc} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} I_{sca} \\ Q_{sca} \\ U_{sca} \\ V_{sca} \end{bmatrix} = \frac{1}{r^2}\begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & Z_{13} & Z_{14} \\ Z_{21} & Z_{22} & Z_{23} & Z_{24} \\ Z_{31} & Z_{32} & Z_{33} & Z_{34} \\ Z_{41} & Z_{42} & Z_{43} & Z_{44} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I_{inc} \\ Q_{inc} \\ U_{inc} \\ V_{inc} \end{bmatrix} \tag{I.16}$$

Cette matrice est également appelée matrice de phase de Stokes (*Stokes phase matrix* en anglais) [Mishchenko et al., 2006] ou encore matrice de Mueller [Bohren and Huffman, 1983]. C'est une matrice $4 \times 4$ comprenant 16 termes qui s'expriment en fonction des

éléments de la matrice amplitude de diffusion [7] $\bar{\bar{S}}$ :

$$\begin{aligned}
Z_{11} &= \frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2\right] \\
Z_{12} &= \frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2 - |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 - |S_{22}|^2\right] \\
Z_{13} &= -\mathfrak{Re}\ (S_{11}^* S_{12} + S_{22}^* S_{21}) \\
Z_{14} &= -\mathfrak{Im}\ (S_{11}^* S_{12} - S_{22}^* S_{21}) \\
Z_{21} &= \frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 - |S_{21}|^2 - |S_{22}|^2\right] \\
Z_{22} &= \frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2 - |S_{12}|^2 - |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2\right]
\end{aligned} \tag{I.17}$$

$$\begin{aligned}
Z_{23} &= -\mathfrak{Re}\ (S_{11}^* S_{12} - S_{22}^* S_{21}) & Z_{24} &= -\mathfrak{Im}\ (S_{11}^* S_{12} + S_{22}^* S_{21}) \\
Z_{31} &= -\mathfrak{Re}\ (S_{11}^* S_{21} + S_{22}^* S_{12}) & Z_{32} &= -\mathfrak{Re}\ (S_{11}^* S_{21} - S_{22}^* S_{12}) \\
Z_{33} &= \mathfrak{Re}\ (S_{11}^* S_{22} + S_{12}^* S_{21}) & Z_{34} &= \mathfrak{Im}\ (S_{11}^* S_{22} + S_{21}^* S_{12}) \\
Z_{41} &= -\mathfrak{Im}\ (S_{21}^* S_{11} + S_{22}^* S_{12}) & Z_{42} &= -\mathfrak{Im}\ (S_{21}^* S_{11} - S_{22}^* S_{12}) \\
Z_{43} &= \mathfrak{Im}\ (S_{22}^* S_{11} - S_{12}^* S_{21}) & Z_{44} &= \mathfrak{Re}\ (S_{22}^* S_{11} - S_{12}^* S_{21})
\end{aligned}$$

Notons que dans le cas particulier d'un champ incident non polarisé (par exemple pour un rayonnement solaire incident), les paramètres de Stokes diffusés s'écrivent :

$$I_{sca} = \frac{1}{r^2} Z_{11} I_{inc} \tag{I.18}$$

$$Q_{sca} = \frac{1}{r^2} Z_{21} I_{inc} \tag{I.19}$$

$$U_{sca} = \frac{1}{r^2} Z_{31} I_{inc} \tag{I.20}$$

$$V_{sca} = \frac{1}{r^2} Z_{41} I_{inc} \tag{I.21}$$

Les éléments qui viennent d'être présentés vont nous servir pour donner les expressions des propriétés radiatives.

---

7. Les relations sont obtenues à partir de celle données par M.I. MISHCHENKO en utilisant la relation suivante :

$$S_{pq,\text{MISH}} = -iS_{pq}^* \Leftrightarrow S_{pq} = -iS_{pq,\text{MISH}}^*$$

Ceci est dû au fait que nous n'utilisons pas la même convention pour définir la matrice $\bar{\bar{S}}$. M.I. MISHCHENKO utilise la définition suivante :

$$\begin{bmatrix} \mathscr{E}_{sca}^{\theta}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}_{sca}^{\varphi}(\vec{r}) \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_s} = \frac{e^{ik_e r}}{r} \begin{bmatrix} S_{11,\text{MISH}} & S_{12,\text{MISH}} \\ S_{21,\text{MISH}} & S_{22,\text{MISH}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathscr{E}_{0,inc}^{\theta} \\ \mathscr{E}_{0,inc}^{\varphi} \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_i}$$

Ainsi, pour passer de la convention utilisée par M.I. MISHCHENKO à celle que nous utilisons, il faut remplacer $i$ par $-i$ (et donc notamment prendre le conjugué de l'élément $S_{pq,\text{MISH}}$) et multiplier par $-i$.

### I.2.4.3 Propriétés radiatives

Les propriétés radiatives sont les caractéristiques énergétiques de l'interaction onde-particule. Elles correspondent aux paramètres d'entrée de l'équation de transfert radiatif. La détermination de ces propriétés radiatives revient à calculer les matrices amplitude de diffusion et de Stokes introduites précédemment. En effet, il faut généralement être capable de calculer ces grandeurs pour être en mesure de calculer les propriétés radiatives. Ces dernières sont détaillées dans ce qui va suivre.

**Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$.** Elle s'exprime en $m^2 sr^{-1}$ et caractérise la répartition de la puissance électromagnétique diffusée par une particule en fonction de la direction d'observation $\vec{e}_s$. La quantité $I_{inc}\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s)d\vec{e}_s$ représente la puissance élémentaire diffusée dans l'angle solide élémentaire $d\vec{e}_s$ autour de la direction d'observation $\vec{e}_s$ par une particule soumise à un rayonnement incident d'intensité $I_{inc}$ se propageant suivant la direction $\vec{e}_i$ (voir Fig. I.6).

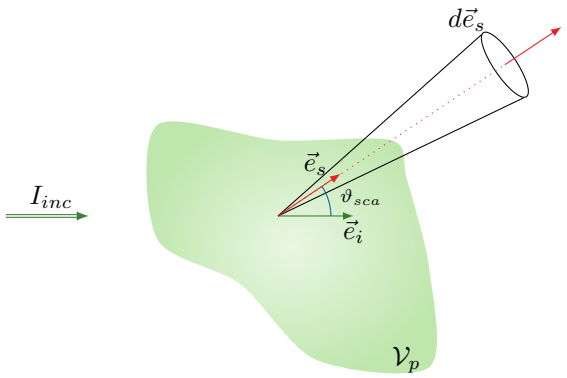



FIGURE I.6 – Illustration des notations utilisées pour la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ et la fonction de phase $p(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ d'une particule isolée. $\vartheta_{sca}$ est l'angle de diffusion.

La section efficace différentielle de diffusion d'une particule isolée $\hat{W}_{sca}$ peut s'exprimer à l'aide des éléments de la matrice de Stokes $\mathcal{Z}$ :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{I_{sca} r^2}{I_{inc}} = \frac{1}{I_{inc}} \left[ Z_{11} I_{inc} + Z_{12} Q_{inc} + Z_{13} U_{inc} + Z_{14} V_{inc} \right] \tag{I.22}$$

Pour une lumière incidente non polarisée ($Q_{inc} = U_{inc} = V_{inc} = 0$), la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ devient :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = Z_{11} = \frac{1}{2} \left[ |S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 \right] \tag{I.23}$$

**Section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$.** Elle s'exprime en $m^2$ et caractérise la capacité d'une particule à diffuser un rayonnement incident. Elle est définie comme le rapport

entre la puissance $\mathcal{P}_{sca}$ diffusée par la particule (dans toutes les directions) et l'intensité du champ incident $I_{inc}$ :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \frac{\mathcal{P}_{sca}}{I_{inc}} \tag{I.24}$$

La section efficace de diffusion est l'intégrale de la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ sur l'angle solide total :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \iint_{4\pi} \hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) d\vec{e}_s \tag{I.25}$$

**Fonction de phase $p(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$.** Elle s'exprime en $sr^{-1}$ et caractérise la distribution des directions de diffusion autour de la particule. Elle est définie comme la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ divisée par la section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ :

$$p(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{\hat{W}_{sca}}{\hat{\sigma}_{sca}} \tag{I.26}$$

Il s'agit bien d'une distribution normalisée puisque $\hat{\sigma}_{sca}$ est l'intégrale de $\hat{W}_{sca}$ sur l'angle solide total : $\int_{4\pi} p(\vec{e}_i, \vec{e}_s) d\vec{e}_s = 1$. Elle s'interprète comme la densité de probabilité des directions de diffusion $\vec{e}_s$ sachant la direction d'incidence $\vec{e}_i$. En d'autres termes, $p(\vec{e}_i, \vec{e}_s) d\vec{e}_s$ est la probabilité qu'un photon incident avec une direction $\vec{e}_i$ subissant une diffusion soit diffusé dans l'angle solide élémentaire $d\vec{e}_s$ autour de la direction d'observation $\vec{e}_s$.

**Section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$.** Elle s'exprime en $m^2$ et caractérise la capacité d'une particule à absorber un rayonnement incident. Elle est définie comme le rapport entre la puissance absorbée $\mathcal{P}_{abs}$ par la particule et l'intensité du champ incident $I_{inc}$ :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \frac{\mathcal{P}_{abs}}{I_{inc}} \tag{I.27}$$

La section efficace d'absorption peut-être calculée à partir du vecteur de Poynting, ou alors déduite de la connaissance des sections efficaces de diffusion et d'extinction (voir ci-dessous).

**Section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ et théorème optique.** Elle s'exprime en $m^2$ et caractérise la puissance prélevée à l'onde incidente par la particule, par absorption et par diffusion. Elle est égale à la somme des sections efficaces d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ et de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ :

$$\hat{\sigma}_{ext} = \hat{\sigma}_{abs} + \hat{\sigma}_{sca} \tag{I.28}$$

Cette relation traduit la conservation de l'énergie. Un des résultats remarquable de l'étude de la diffusion d'une onde par une particule est le **théorème optique**[8] [Born and Wolf,

8. À noter que la formulation du théorème optique donnée ici est adaptée à nos choix de conventions : d'une part celle $e^{i\omega t}$ et d'autre part la façon dont est définie la matrice amplitude de diffusion (voir Eq. I.14). Ainsi, il existe autant de formulations du théorème optique que de choix de conventions.

1999; Mishchenko et al., 2002; Van de Hulst, 1957; Tsang et al., 2000]. Il permet d'exprimer la section efficace d'extinction uniquement à l'aide des éléments de la matrice amplitude de diffusion pour une direction d'observation $\vec{e}_s$ correspondant à la direction incidente $\vec{e}_i$ (*i.e.* $\vec{e}_s = \vec{e}_i$). Sous l'hypothèse d'un rayonnement incident non polarisé, le théorème optique s'écrit :

$$\hat{\sigma}_{ext} = -\frac{2\pi}{k_e}\mathfrak{Re}\left(S_{11}(\vec{e}_i, \vec{e}_i) + S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_i)\right) \tag{I.29}$$

**Facteurs d'efficacités.** Ce sont des grandeurs sans dimension définies comme le rapport entre les sections efficaces (absorption, diffusion ou extinction) et l'aire $P$ de la surface projetée de la particule sur un plan perpendiculaire à la direction de propagation incidente :

$$\hat{Q}_{abs} = \frac{\hat{\sigma}_{abs}}{P} \tag{I.30}$$

$$\hat{Q}_{sca} = \frac{\hat{\sigma}_{sca}}{P} \tag{I.31}$$

$$\hat{Q}_{ext} = \frac{\hat{\sigma}_{ext}}{P} \tag{I.32}$$

Par exemple, dans le cas d'une particule sphérique de rayon $R_s$, la surface projetée est un disque de rayon $R_s$ dont l'aire vaut $P = \pi R_s^2$.

### I.2.5 Ensemble de particules : hypothèse de diffusion indépendante

Jusqu'ici, nous avons considéré une seule particule. Toutefois, dans de nombreuses applications, il est fréquent d'étudier un milieu constitué d'un ensemble de particules (suspensions de micro-organismes, de globules rouges, d'aérosols, d'agrégats de suies, ...). En particulier, dans ce manuscrit, nous serons amenés à estimer les propriétés radiatives d'une suspension constituée de micro-organismes photosynthétiques.

Dès que l'on considère un ensemble de particules, il faut se poser la question de savoir si les ondes diffusées par les particules interfèrent entre elles ou pas. Ceci dépend notamment de la densité de particules constituant la suspension [Tien and Drolen, 1987].

Si le milieu est une suspension dense de particules, alors la diffusion par une particule dépend des particules qui l'entoure : on parle de **diffusion dépendante** [Jones, 1999; Siegel, 2001; Boulet et al., 2014]. Dans ce cas, les propriétés radiatives d'une particule dépendent de la position des particules environnantes. Cela rend le problème de la diffusion dépendante un sujet très complexe. Nous ne développerons davantage ce cas car, dans nos configurations, on vérifie que nous sommes dans un cas de **diffusion indépendante** [Cornet, 2007]. Cela est justifié par le fait que nous travaillons avec des suspensions constituées

de particules suffisamment espacées, c'est-à-dire que la distance entre les particules est plus grande que leurs tailles. Sous l'hypothèse de diffusion indépendante (qui sera valable dans toute la suite du manuscrit), les propriétés radiatives d'une suspension de particules correspondent aux moyennes des propriétés radiatives d'une particule isolée prise sur les distributions de taille et d'orientation des particules constituant la suspension. D'un point de vue notation, les propriétés radiatives d'une particule isolée sont repérées avec un accent circonflexe (par exemple $\hat{\sigma}_{sca}$) tandis que les propriétés radiatives moyennées sur les tailles et les orientations sont non accentuées (par exemple $\sigma_{sca}$).

Il convient de noter qu'il n'y aurait pas de sens à calculer la moyenne de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ sur les tailles et les orientations des particules puisqu'elle est indépendante de la présence ou non des autres particules.

# CHAPITRE II

# État de l'art

Ce chapitre présente l'état de l'art nécessaire à cette thèse, d'une part dans le domaine du calcul des propriétés radiatives de particules, en incluant les formulations du problème, les méthodes de résolution numérique, ainsi que les approximations disponibles et d'autre part, dans le domaine de la méthode de Monte Carlo.

## II.1 Calcul des propriétés radiatives

### II.1.1 Formulations du problème de diffusion onde-particule

La résolution du problème de diffusion d'une onde par une particule est une difficulté dans de nombreuses situations. En effet, ce problème ne possède pas de solutions analytiques simples, excepté peut-être pour une particule sphérique (voir Sec. II.1.2.1), et il est difficile à résoudre numériquement. Pour pallier cette difficulté, il y a une forte activité de recherche pour développer des méthodes numériques qui ont chacune leurs avantages et inconvénients [Kahnert, 2003]. À chacune de ces méthodes est associée la résolution d'une formulation mathématique du problème de diffusion. Dans la littérature, il existe des formulations basées sur des équations aux dérivées partielles qui résolvent directement les équations de Maxwell (voir Fig. II.1). Elles sont notamment utilisées pour les méthodes FEM [Volakis et al., 1998; Zhu and Cangellaris, 2006; Jin, 2014], FDTD (voir Sec. II.1.2.4) [Yee, 1966; Taflove and Hagness, 2005], la méthode MMFE [Kaissar Aboud, 2016] ou encore la méthode de séparation des variables (voir Sec. II.1.2.1). D'autres formulations sont basées sur des intégrales de volume ou de surface [Kahnert et al., 2003; Peterson, 2006; Costabel et al., 2010; Ylä-Oijala et al., 2014; Markkanen and Ylä-Oijala, 2016; Chen et al., 2016]. En particulier, les méthodes DDA [Yurkin and Hoekstra, 2007] et MOM [Harrington, 1993] utilisent des formulations intégrales en volume, tandis que les méthodes T-Matrix [Mishchenko et al., 2000, 2002] ou NFM [Doicu et al., 2006; Eremin et al., 2011] exploitent plutôt des formulations intégrales en surface. Il existe même des formulations qui combinent à la fois des formulations en intégrales de volume et de surface [Gomez et al., 2015].

Dans ce manuscrit, parmi les formulations existantes, nous avons choisi d'étudier la formulation intégrale en volume du champ électrique $\vec{\mathscr{E}}$ :

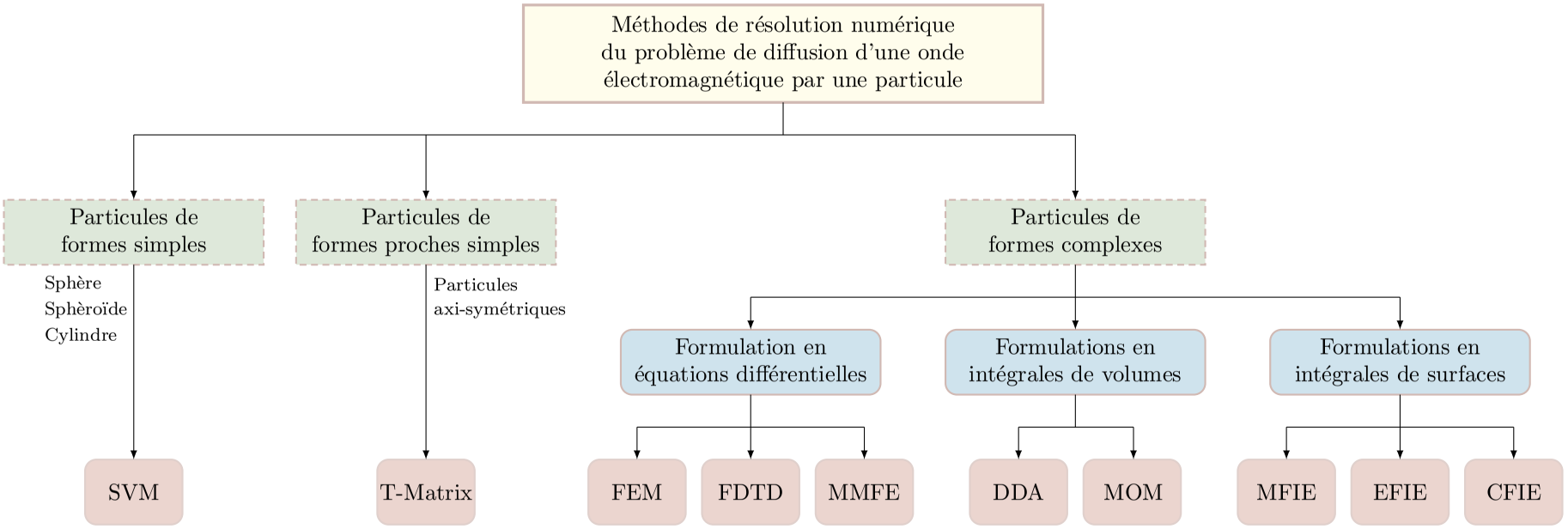
$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) + \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{II.1}$$

Cette formulation est une équation intégrale de Fredholm de seconde espèce et a été identifiée comme étant appropriée à une résolution par la méthode de Monte Carlo que nous introduirons dans Sec. II.2.

### II.1.2 Méthodes numériques disponibles pour la résolution du problème de la diffusion onde-particule

Le calcul des propriétés radiatives nécessite de résoudre les équations de Maxwell et plus particulièrement le problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule présenté dans Sec. I.2. Pour y parvenir, de nombreuses méthodes numériques sont disponibles comme le montre Fig. II.1. Ces méthodes permettent de résoudre de façon *rigoureuse*, c'est-à-dire sans introduire d'approximations (hormis pour certaines méthodes l'approximation de discrétisation de la particule), les équations de Maxwell. Le choix d'une méthode est très liée au problème que l'on considère. Par exemple, Fig. II.1 propose une classification selon la complexité de la forme de la particule à étudier. Plus précisément, si l'on considère des formes géométriques simples telles que la sphère, le cylindre ou le sphéroïde, la méthode de séparation des variables peut éventuellement convenir. Pour des particules axi-symétriques, la méthode T-Matrix peut-être envisagée. Cependant, ces deux méthodes peuvent être écartées dès lors qu'il s'agit de traiter des particules avec des géométries quelconques. Il est alors nécessaire de s'orienter vers d'autres types de méthodes numériques que nous avons choisi de classifier en trois branches (voir Fig. II.1). D'une part, des méthodes basées sur une formulation en équations différentielles et d'autre part, des méthodes basées sur une formulation intégrale volumique ou surfacique.

L'objet de cette section est de présenter quelques unes de ces méthodes numériques qui sont couramment utilisées. En particulier nous aborderons la méthode de séparation des variables (voir Sec. II.1.2.1), la méthode T-Matrix (voir Sec. II.1.2.2), la méthode DDA (*Discrete Dipole Approximation*) (voir Sec. II.1.2.3) et la méthode FDTD (*Finite Difference Time Domain*) (voir Sec. II.1.2.4). Nous présenterons brièvement le principe de chacune de ces méthodes, leurs avantages et limites, ainsi que leurs domaines d'applications.




SVM : *Separation of Variable Method*
DDA : *Discrete Dipole Approximation*
MOM : *Method Of Moment*

FEM : *Finite Element Method*
FDTD : *Finite Difference Time Domain*
MMFE : *Modal Method by Fourier Expansion*

MFIE : *Magnetic Field Integral Equation*
EFIE : *Electric Field Integral Equation*
CFIE : *Combined Field Integral Equation*

FIGURE II.1 – Méthodes de résolution numérique du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule. Proposition de classement par types de particules et par types de formulations. Figure inspirée et adaptée d'un document présenté par A. LITMAN lors d'un atelier des journées photo-procédés FédEsol en juin 2014 à Clermont-Ferrand.

#### II.1.2.1 Méthode de séparation des variables et approche de Lorenz-Mie

**Principe.** Une façon de résoudre de manière exacte le problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule est d'utiliser la méthode de séparation des variables (SVM). Cette dernière consiste à chercher la solution $\psi$ de l'équation d'Helmholtz scalaire $\triangle\psi + k_p^2\psi = 0$ sous la forme d'un produit de fonctions chacune dépendante que d'une seule variable ($k_p$ est le nombre d'onde dans la particule). Ceci permet alors d'écrire un ensemble d'équations différentielles pour chacune des variables considérées (qui correspondent aux variables du système de coordonnées choisi) dont la résolution permet d'obtenir une expression de la solution $\psi$. À partir de cette solution, il est alors possible de résoudre l'équation d'Helmholtz vectorielle en construisant deux vecteurs harmoniques $\vec{M}$ et $\vec{N}$ dépendant de $\psi$. Par la suite, les champs électrique et magnétique incidents, internes ainsi que diffusés sont développés suivant ces deux fonctions harmoniques vectorielles.

**Particules sphériques - Approche de Lorenz-Mie.** En Annexe A, nous proposons de donner, dans les grandes lignes, l'application de cette méthode à une particule sphérique, plus connue sous le nom d'approche de Lorenz-Mie ou de théorie de Mie [Mie, 1908]. Cette approche permet de résoudre de manière exacte les équations de Maxwell pour une particule sphérique. Elle est très bien documentée et détaillée dans de nombreux ouvrages [Stratton, 1941; Van de Hulst, 1957; Kerker, 1969; Bohren and Huffman, 1983; Tsang et al., 2000].

**Particules non-sphériques.** Outre la géométrie sphérique, nous verrons également que la méthode SVM peut être utilisée pour des particules cylindriques et sphéroïdales. Elle a été utilisée pour résoudre les équations de Maxwell pour un cylindre long avec une incidence normale [Rayleigh, 1918] et pour une incidence oblique [Wait, 1955], pour un cylindre elliptique suite aux travaux de Sieger et Aichi (1908) [Van de Hulst, 1957], pour un cylindre parabolique par Epstein (1914). Oguchi [Oguchi, 1973] et Asano [Asano and Yamamoto, 1975; Asano, 1979; Asano and Sato, 1980] ont utilisé la méthode SVM pour une particule sphéroïdale en utilisant une décomposition en harmoniques sphéroïdales vectorielles. L'application de SVM à des particules sphéroïdales est également passée en revue dans la référence [Ciric and Cooray, 2000].

**Avantages et limites de la méthode de séparation des variables** Le principal avantage de la méthode de séparation des variables SVM est qu'elle fournit une solution exacte du problème de diffusion d'une onde par une particule, et ceci sans utiliser de maillage pour représenter la particule. Cependant elle est restreinte à un petit nombre de particules possédant des formes simples notamment sphère, sphéroïde et cylindre. En

pratique, SVM ne permet pas de prendre en compte la moyenne sur les orientations. Ceci devient possible dès lors que SVM est reformulée de sorte à pouvoir calculer une matrice $\bar{\bar{T}}$ [Schulz et al., 1998].

**Codes disponibles.** Des codes implémentant les précédentes expressions sont disponibles librement en ligne. Dans ce manuscrit, nous utiliserons le code développé par Bohren et Huffman [Bohren and Huffman, 1983] [1].

#### II.1.2.2 Méthode T-Matrix

La méthode T-Matrix est également désignée (entre autres) par les termes EBCM (*Extended Boundary Condition Method*) ou NFM (*Null Field Method*). Initialement introduite par Waterman [2] dans le domaine de la diffusion acoustique [Waterman, 1965], puis celui de la diffusion électromagnétique [Waterman, 1971], la méthode T-Matrix a ouvert de nombreuses perspectives dans la communauté traitant de la diffusion de la lumière par une particule ou un ensemble de particules et est aujourd'hui très largement utilisée.

**Principe.** La méthode T-Matrix est basée sur la décomposition des champs incident $\vec{\mathcal{E}}_{inc}$ et diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}$ en harmoniques sphériques vectorielles. La linéarité des équations de Maxwell, ainsi que la linéarité des conditions aux limites, impliquent que les coefficients du développement pour $\vec{\mathcal{E}}_{sca}$ sont reliés linéairement aux coefficients du développement pour $\vec{\mathcal{E}}_{inc}$. La matrice $\bar{\bar{T}}$ formalise cette relation linéaire : le vecteur contenant les coefficients de la décomposition du champ diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}$ est obtenu en multipliant la matrice $\bar{\bar{T}}$ par le vecteur contenant les coefficients du champ incident $\vec{\mathcal{E}}_{inc}$. Si la matrice $\bar{\bar{T}}$ est connue, alors le champ diffusé ainsi que les propriétés radiatives peuvent être calculés. Tout l'enjeu est donc de déterminer cette matrice. Pour ce faire, il existe différentes méthodes dont l'originale, introduite par Waterman, est *Extended Boundary Condition Method* (EBCM) ou *Null Field Method* (NFM) [Waterman, 1965; Barber and Hill, 1990; Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002]. Plus tard, d'autres méthodes ont fait leur apparition telles que la méthode IIM (*Invariant Imbedding Method*) [Johnson, 1988], la méthode de séparation des variables en utilisant une décomposition en base de fonctions sphéroïdales [Schulz et al., 1998], la méthode des moments des dipôles discrets (*Discrete Dipole Moment Method*) [Mackowski, 2002] ou encore la méthode PMM (*Point-Matching*

1. Des pages sont spécifiquement dédiées aux codes résolvant le problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule sphérique aux adresses suivantes : `https://scattport.org/index.php/light-scattering-software/mie-type-codes` et `http://scatterlib.wikidot.com/mie`

2. Mishchenko et Martin ont retracé la vie scientifique de Peter C. Waterman dans un article intitulé "Peter Waterman and T-Matrix methods" [Mishchenko and Martin, 2013]. Ces travaux ont eu un impact majeur dans le domaine de la diffusion par des particules.

*Method*) [Nieminen et al., 2003]. En Annexe B, nous présenterons brièvement la méthode EBCM qui est largement reprise dans la littérature [Barber and Hill, 1990; Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002; Rother and Kahnert, 2014] et qui, en plus d'être la méthode historique, est toujours très utilisée. Cette méthode se base sur une formulation intégrale en surface du champ diffusé. Elle nécessite d'évaluer numériquement des intégrales sur la surface de la particule, dont les intégrandes font intervenir les produits vectoriels des fonctions harmoniques sphériques [Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002].

**Avantages et limites.** Dès que les particules deviennent non-sphériques où que le modèle de la sphère équivalente ne suffit pas, la méthode T-Matrix est considérée comme l'une des méthodes les plus rapides et précises pour résoudre de manière exacte le problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par une particule ou un ensemble de particules [Mishchenko et al., 2002; Kahnert, 2003, 2016]. La matrice $\bar{\bar{T}}$ à l'avantage d'être indépendante de la direction de propagation et de l'état de polarisation du champ incident ainsi que du champ diffusé. Une fois la matrice calculée, elle peut-être utilisée pour évaluer les propriétés de diffusion et d'absorption de la particule pour n'importe quel état de polarisation et n'importe quelle orientation de la particule par rapport au champ incident. Ceci présente un avantage significatif par rapport à d'autres méthodes numériques qui nécessitent de refaire le calcul à chaque nouveau champ incident. La méthode T-Matrix est donc particulièrement avantageuse pour la prise en compte des moyennes sur la distribution des orientations des particules au sein d'une suspension [Mishchenko, 1991].

Bien que la méthode T-Matrix n'est pas théoriquement limitée à une forme particulière de particule (contrairement à l'approche de Lorenz-Mie), des difficultés numériques sont rencontrées en pratique pour des particules très éloignées de la sphère. Toutefois, elle est particulièrement efficace pour calculer les propriétés radiatives de particules axisymétriques grâce à la gestion des symétries des dites particules. Ceci permet de réduire les temps de calcul [Kahnert et al., 2001].

Des problèmes de convergence numérique, entraînant des pertes de précisions, interviennent lorsque la forme de la particule devient complexe (*i.e.* sans symétries ou avec des particules très allongées), le paramètre de taille et/ou l'indice de réfraction relatif devient grand [Mishchenko et al., 1996, 2002]. Dans la méthode EBCM, le calcul de la matrice $\bar{\bar{T}}$ nécessite d'évaluer l'inverse de la matrice $\bar{\bar{Q}}$ ($\bar{\bar{T}} = -(\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}})\bar{\bar{Q}}^{-1}$, voir Eq. B.26 pour les détails) pouvant entraîner des pertes de précisions. Ce n'est toutefois pas la seule cause. En effet, la méthode EBCM souffre de sévère pertes de précision dues à l'évaluation des intégrales de surfaces dont les intégrandes peuvent être rapidement oscillantes [Somerville et al., 2012; Kahnert, 2016], c'est-à-dire prenant des grandes valeurs positives ou négatives

devant la valeur de l'intégrale. C'est la sommation de ces grandes contributions positives et négatives (qui s'annule presque) qui entraîne des problèmes de précisions numériques.

Mathématiquement parlant, la méthode T-Matrix est basée sur la décomposition des champs sous forme de séries infinies. D'un point de vue numérique, il est nécessaire de tronquer ces séries à un certain ordre $N_{cut}$. Ce paramètre influence directement la précision du résultat. Il dépend du paramètre de taille $x$, de la forme de la particule et de l'indice de réfraction relatif $m_r$. Par exemple, plus le paramètre de taille est élevé, plus l'ordre de troncature $N_{cut}$ doit être élevé entraînant une augmentation du nombre d'éléments de la matrice $\bar{\bar{T}}$ à calculer. Pour l'utilisateur, ceci se traduit par une augmentation du temps de calcul. Kahnert mentionne que le temps CPU (*Central Process Unit time*) est de l'ordre de $x^l$, avec $x$ le paramètre de taille et $l$ qui varie typiquement entre 3 et 5.5 suivant la présence ou non de symétries de la particule [Kahnert, 2016].

**Développements et améliorations du calcul de la matrice $\bar{\bar{T}}$.** De nombreuses améliorations ont été développées pour étendre les domaines de validité (pour des plus grandes particules) de la méthode EBCM en utilisant une précision numérique plus élevée [Mishchenko and Travis, 1994], et en optimisant l'algorithme d'inversion de la matrice $\bar{\bar{Q}}$ [Petrov et al., 2007]. D'autres méthodes ont également été développées pour calculer la matrice $\bar{\bar{T}}$.

La méthode IEBCM (*Iterative Extended Boundary Condition Method*), initialement introduite par Iskander [Iskander and Lakhtakia, 1984], est une méthode itérative basée sur la division de la particule en sous-régions pouvant se recouvrir (voir Fig. II.2a). IEBCM permet de traiter des particules très allongées avec des paramètres de taille quatre fois plus élevés que ceux utilisés avec la méthode EBCM [Mishchenko et al., 2002; Yan et al., 2008]. Cependant, en plus d'être couteux en temps de calcul, IEBCM n'offre pas les avantages d'EBCM lorsque l'on tient compte des moyennes sur les orientations (car la matrice $\bar{\bar{T}}$ n'est plus indépendante de l'orientation) [Mishchenko et al., 2002].

La méthode MBIT (*Many-Body Iterative T-Matrix*) [Yan et al., 2008; Sun et al., 2013] permet de traiter des particules avec de fortes élongations. L'idée principale est de découper une particule axi-symétrique en sous-particules en conservant l'axe de symétrie initial (voir Fig. II.2b), puis d'appliquer à chacune des sous-particules une méthode, proche d'EBCM, qui tient compte des différentes interfaces entre les sous-particules. MBIT a été utilisée sur une particule cylindrique d'élongation $R = \frac{h}{d} = 18$ (diamètre $d = 10$ et hauteur $h = 180$) [Sun et al., 2013]. Combinée avec l'optique géométrique, elle a été appliquée à des longues chaînes prismatiques triangulaires [Sun et al., 2016].

La méthode IIM (*Invariant Imbedding Method*), introduite par Johnson [Johnson, 1988], propose de voir une particule arbitraire comme un empilement de sphères concen-

triques inhomogènes dont la plus grande est circonscrite à la particule (voir Fig. II.2c). Chaque sphère est alors constituée d'une portion de la particule et éventuellement d'une portion de milieu extérieur. Le principe d'IIM est alors de calculer la matrice $\bar{\bar{T}}$ de manière itérative à partir d'une intégrale de volume : la matrice $\bar{\bar{T}}$ de la $p^{ème}$ couche sphérique est obtenue à partir celle de la $(p-1)^{ème}$ couche sphérique. IIM permet de traiter des particules possédant des grands paramètres de taille et/ou de fortes élongations. Toutefois, elle est couteuse en temps de calcul. Cela peut-être réduit en couplant IIM avec la méthode EBCM [Bi et al., 2013a], l'optique géométrique [Liu et al., 2015] ou encore la méthode de séparation des variables (SVM) [Bi et al., 2013b].

La méthode NFM-DS (*Null Field Method - Discrete Source*) [Doicu and Wriedt, 1997, 1999; Doicu et al., 2006; Wriedt and Doicu, 1998; Wriedt, 2007] est basée sur l'utilisation d'une distribution de sources discrètes. À titre d'illustration, pour des particules axisymétriques, ces sources sont disposées le long de l'axe de symétrie (voir Fig. II.2d). Le champ interne est alors une combinaison linéaire des champs créés par chacune des sources élémentaires et qui sont elles-mêmes développées en vecteurs harmoniques sphériques. NFM-DS a l'avantage de pouvoir traiter des particules avec des géométries fortement non-sphériques et possédant de grandes élongations [Doicu et al., 2006, 2015]. Par exemple, elle a été appliquée à un spheroide de ratio 25 : 1 [Hellmers et al., 2011], et peut, à priori, traiter des élongations aussi grande que 100 : 1 [Wriedt, 2009].

**Codes numériques disponibles.** Parmi les codes implémentant la méthode T-Matrix, ceux développés par Mishchenko [Mishchenko and Travis, 1998; Mishchenko, 2000; Mishchenko et al., 2002] sont certainement ceux les plus utilisés actuellement. Néanmoins, il existe d'autres codes plus ou moins accessibles selon le niveau d'expérience avec la méthode. Par exemple, le code Tsym [Kahnert, 2013; Rother and Kahnert, 2014], développé par Kahnert permettant de traiter des particules non-axisymétriques, est un code dédié à la recherche et pour des utilisateurs expérimentés. Le code SMARTIES (*Spheroids Modelled Accurately with a Robust T-matrix Implementation for Electromagnetic Scattering*) [Somerville et al., 2016], développé par Somerville et *al*, est quant à lui conçu pour être, à priori, facile d'utilisation. Ce code, disponible en ligne [3], implémente un algorithme amélioré de la méthode T-Matrix codé sous MATLAB pour résoudre le problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par des particules sphéroïdales. D'autres codes sont également mentionnées dans l'ouvrage intitulé *Scattering, absorption and emission of light by small particles* [Mishchenko et al., 2002].

3. `http://www.victoria.ac.nz/scps/research/research-groups/raman-lab/numerical-tools/smarties`

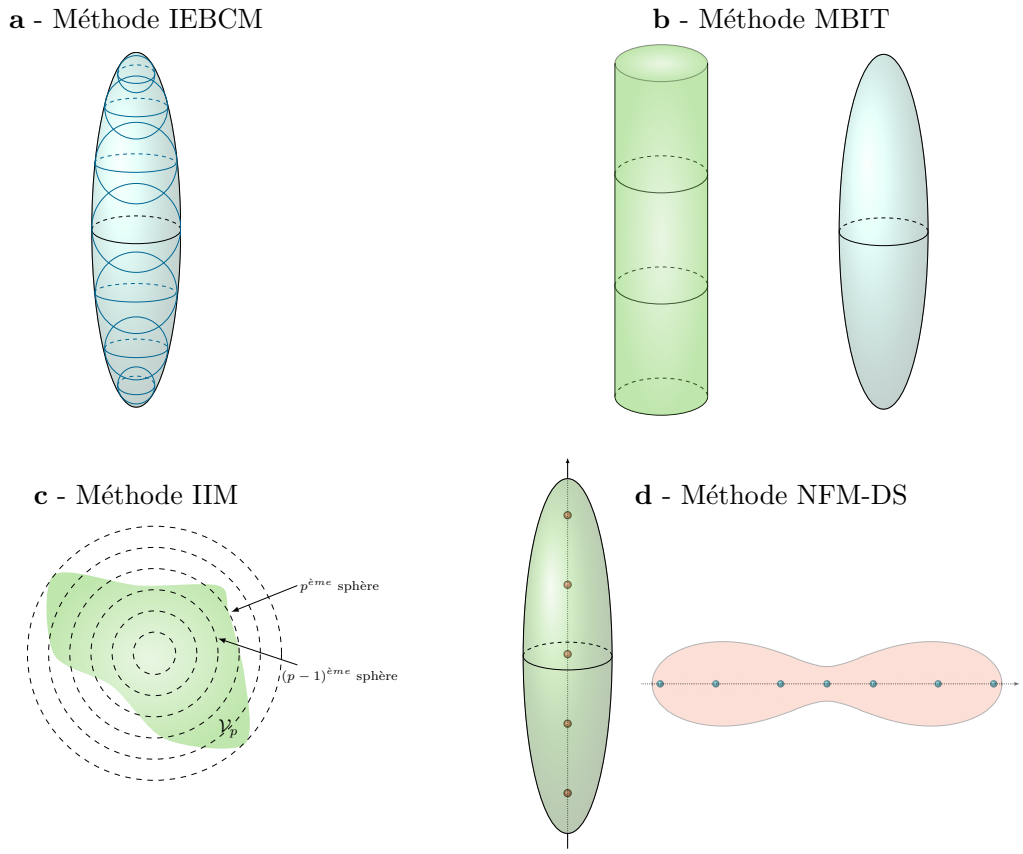



FIGURE II.2 – Illustration des différentes améliorations de la méthodes T-Matrix. **a** - Méthode IEBCM (*Iterative Extended Boundary Condition Method*). **b** - Méthode MBIT (*Many-Body Iterative T-Matrix*). **c** - Méthode IIM (*Invariant Imbedding Method*). **d** - Méthode NFM-DS (*Null Field Method - Discrete Source*).

**Applications.** Les applications de la méthode T-Matrix sont nombreuses et couvrent de nombreux domaines allant de l'astrophysique au biomédical en passant par les sciences de l'atmosphère. T-Matrix a notamment été employée pour des particules non-sphériques en suspension dans l'eau [Bi and Yang, 2015; Liu et al., 2016; Charon et al., 2016; Sun et al., 2016; Xu et al., 2017], des particules types aérosols [Liu et al., 2015], des particules interstellaires [Ivanova et al., 2017], D'autres références triées par types ou formes de particules sont recensées dans les articles servant de bases de données mises régulièrement à jour par MISHCHENKO [Mishchenko et al., 2017].

**Conclusion.** Dans ce manuscrit, afin de valider nos algorithmes, nous utiliserons les codes (écrits en FORTRAN) développés par MISHCHENKO et qui sont disponibles en ligne. Même si ces codes sont restreints à des géométries axi-symétriques, ils ont le mérite d'être rapidement pris en mains. Ils ont également l'avantage de tenir compte des distributions d'orientation et de taille des particules. C'est, en particulier, pour ces raisons que ces codes ont été choisis dans ce manuscrit. Toutefois, comme nous le verrons dans Sec. IV.3.1.1,

le code T-Matrix que nous utilisons ne permet pas d'étudier toute la gamme d'intérêt de paramètres de taille pour l'étude des micro-organismes photosynthétiques ($x \in [5, 200]$). Il sera également envisagé d'utiliser un code implémentant la méthode DDA qui fait l'objet de la section suivante.

#### II.1.2.3 Méthode DDA (*Discrete Dipole Approximation*)

Dans la communauté de la diffusion de lumière par une particule, la méthode DDA prend désormais une place importante comme on peut le constater via les références [Draine and Flatau, 1994; Yurkin and Hoekstra, 2007] qui passe respectivement en revue les développements de la méthode jusqu'en 1994 puis de la période entre 1994 et 2007. Elle fait également l'objet de nombreuses comparaisons avec d'autres méthodes existantes [Wriedt and Comberg, 1998; Wriedt et al., 2006; Gilev et al., 2010; Kahnert, 2003; Liu et al., 2012; Yurkin and Kahnert, 2013; Yang et al., 2015; Kahnert, 2016].

**Principe.** L'approximation des dipôles discrets (DDA) (*Discrete Dipole Approximation* en anglais) est également dénommée *Coupled Dipole Method*. L'idée principale de cette méthode, initialement introduite par De Voe [DeVoe, 1964, 1965] puis en 1973 par Purcell et Pennypacker [Purcell and Pennypacker, 1973], est de remplacer (autrement dit d'approximer) le diffuseur par un ensemble fini de dipôles qui interagissent entre eux ainsi qu'avec l'onde électromagnétique incidente. À chaque dipôle est associée une position sur un maillage en volume (voir Fig. II.3) ainsi qu'une polarisabilité. À partir de ces éléments, il est possible de déterminer les grandeurs caractéristiques du problème de diffusion : sections efficaces, fonctions de phase, .... Quelques éléments mathématiques montrant le principe de la méthode sont fournis en Annexe C.

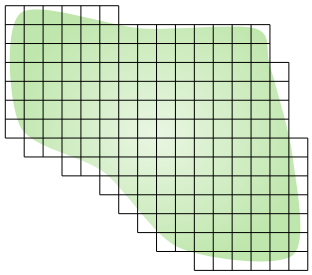


Figure II.3 – Discrétisation du volume de la particule dans le cadre de la méthode DDA : exemple d'une discrétisation cubique.

**Avantages et limites.** La méthode DDA présente de nombreux avantages. D'une part, elle est applicable à des particules avec des géométries complexes (*i.e.* non sphériques) pouvant être hétérogènes et/ou anisotropes ainsi qu'à des particules optiquement-actives

[Kahnert, 2003]. D'autre part, la discrétisation en sous-volumes est restreinte au domaine de la particule, ce qui permet de réduire le nombre d'inconnues (comparé à d'autres méthodes telles que la méthode FDTD (voir Sec. II.1.2.4)). De plus, la condition de rayonnement à l'infini est automatiquement satisfaite dans la mesure où la dyade de Green satisfait cette condition [Jones, 1979; Lakhtakia, 1990]. L'une des faiblesses de la méthode DDA est que lorsque le nombre de sous-volumes augmente, la précision numérique augmente plutôt lentement [Kahnert, 2003]. Contrairement à la méthode T-Matrix, les propriétés de symétries des particules (lorsqu'il y en a) n'est pas exploitée. De plus, la prise de moyenne sur les orientations des particules reste à l'heure actuelle une difficulté. En effet, le calcul doit être répété pour chacune des orientations, entraînant une augmentation du temps de calcul. Ce dernier point est d'autant plus vrai que le nombre d'orientations nécessaire augmente avec le paramètre de taille $x$ [Yurkin, 2016]. Bien que DDA soit en mesure de traiter n'importe quelle forme de particule, elle éprouve des difficultés (comme les autres méthodes) à résoudre le problème de la diffusion pour des particules possédant des paramètres de taille intermédiaires compris entre l'échelle de la longueur d'onde et le régime de l'optique géométrique [Kahnert, 2016]. Néanmoins, il convient de noter que le code numérique ADDA (qui est un code basé sur la méthode DDA dont nous reparlerons plus loin) a récemment permis d'obtenir des résultats pour une sphère de paramètre de taille $x = 320$ et d'indice de réfraction $m = 1.05$ [Yurkin and Hoekstra, 2011]. Certes ce résultats montre le potentiel de la méthode à aller traiter des particules de plus grandes tailles (voir aussi [Yurkin and Hoekstra, 2016]), mais cela nécessite tout de même d'importantes ressources informatiques. Malgré cette limitation, qui ne cesse d'être réduite compte tenu des développements informatiques (notamment grâce à la parallélisation des calculs qui permet d'aller vers des plus grands paramètres de tailles [Kahnert, 2016]), la méthode DDA se positionne déjà comme une méthode résolvant de manière "exacte" les équations de Maxwell [Yurkin and Kahnert, 2013]. En effet, les résultats obtenus par cette méthode convergent vers la valeur exacte dès lors que l'on augmente le nombre de dipôles, autrement dit la précision numérique est améliorée au détriment du temps de calcul [Yurkin and Kahnert, 2013; Kahnert, 2016].

**Codes numériques disponibles.** Il existe plusieurs codes numériques implémentant la méthode DDA. En particulier, on citera le code DDSCAT (*Dipole Discrete SCATtering*) écrit en langage Fortran 77, développé par Draine et Flatau. Régulièrement mis à jour (version actuelle DDSCAT 7.3.2 - Août 2016), il est disponible librement en ligne (http ://www.ddscat.org/) et dispose d'un guide utilisateur [Draine and Flatau, 2013]. Un autre code développé à l'Université d'Amsterdam initialement par Hoekstra (entre autres) dans les années 90 puis réécrit et amélioré par Yurkin [Yurkin et al., 2007a] en 2006. Ce

code écrit en langage C, désormais connu sous le nom ADDA (*Amsterdam Discrete Dipole Approximation*), est disponible librement en ligne (https ://github.com/adda-team/adda). Bien qu'il existe d'autres codes qui implémentent la méthode DDA, les codes DDSCAT et ADDA sont certainement les codes les plus utilisés actuellement. Une étude comparative entre plusieurs codes dont ADDA et DDSCAT est présentée dans la référence [Penttilä et al., 2007]. De cette étude, en plus de donner les points positifs et négatifs de chacun de ces codes, il est mis en avant que le code ADDA est plus rapide mais moins précis que le code DDSCAT (voir également la thèse de Maxim Yurkin [Yurkin, 2007]). Il est également mentionné que ces deux codes sont en mesure de faire des calculs parallélisés. Les capacités et les limites actuelles du code ADDA ont également été détaillées dans les travaux de Yurkin [Yurkin and Hoekstra, 2011; Yurkin, 2016].

**Applications de la méthode DDA.** La méthode DDA est très employée pour traiter diverses particules avec des géométries différentes telles que des particules marines [Gordon, 2011], des cristaux de glaces [Flatau and Draine, 2014; Yang et al., 2015], des particules biologiques [Bi and Yang, 2015; Orlova et al., 2014], des globules rouges [Yurkin, 2007; Gilev et al., 2010], des plaquettes sanguines [Moskalensky et al., 2013, 2014], des poussières minérales [Nousiainen et al., 2009], des cendres volcaniques [Kylling et al., 2014], des poussières interstellaires [Lumme, 2011], des plasmons [Vartia et al., 2016] ou encore des matériaux nano-structurés [Enguehard, 2009]. D'autres références plus anciennes sont recensées au chapitre V de l'ouvrage [Mishchenko et al., 2000]. La référence [Yurkin, 2016] fournit également des références d'applications de la méthode DDA pour des grandes particules devant la longueur d'onde.

**Conclusion.** Dans ce manuscrit, le code ADDA nous servira d'outil de validation de nos codes. En particulier, nous l'utiliserons dans Sec. IV.3.1.2 pour une particule sphéroïdale. L'utilisation de ce code nous permettra de valider nos codes sur une plus grande gamme de paramètre de taille que celle disponible avec le code T-Matrix que nous utilisons.

#### II.1.2.4 Méthode FDTD (*Finite Difference Time Domain*)

**Principe.** Cette méthode, introduite par Yee en 1966 [Yee, 1966], permet de résoudre numériquement les équations de Maxwell dans le domaine temporel. L'idée est de discrétiser à la fois les coordonnées spatiales et temporelles qui interviennent dans les équations de Maxwell. Plus précisément, ceci revient à dire que chaque dérivée spatiale et temporelle est approchée par leurs différences finies centrées. Dans la mesure où elle ne sera pas utilisé dans ce manuscrit, nous ne rentrerons pas plus dans les détails de la méthode. Le

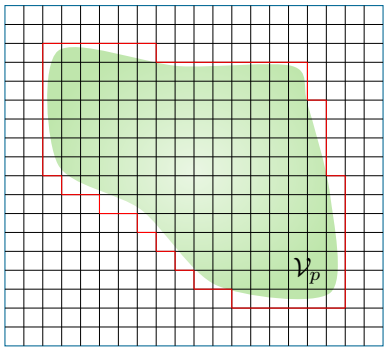



FIGURE II.4 – Schématisation d'une discrétisation d'une particule dans le cadre de la méthode FDTD qui est plus large que la particule de volume $\mathcal{V}_p$ [Kahnert, 2016; Jin, 2015]. En rouge est représentée la délimitation de la discrétisation restreinte à la particule dans le cadre de la méthode DDA.

lecteur intéressé pourra se reporter aux divers ouvrages [Jin, 2015; Taflove and Hagness, 2005; Yang and Liou, 2000; Kunz and Luebbers, 1993].

**Avantages et limites.** L'un des principaux avantages de FDTD, en plus de sa simplicité de mise en œuvre numérique, est qu'elle est applicable à des particules inhomogènes, anisotropes et avec des géométries quelconques. Cependant, elle présente l'inconvénient d'avoir besoin d'un domaine de discrétisation qui n'est pas restreint à la particule contrairement à DDA. Ceci conduit inévitablement a d'importants temps de calcul supplémentaire notamment pour des particules avec des grands paramètres de tailles. Par ailleurs, FDTD n'est pas vraiment adaptée pour tenir compte des moyennes sur les orientations dans la mesure où (comme DDA) le calcul doit être répété pour chaque nouvelle orientation de la particule [Kahnert, 2003].

**Codes numériques disponibles.** Il existe une multitude de codes numériques implémentant la méthode FDTD [Wriedt, 2009]. En 2007, TAFLOVE dénombre 27 codes FDTD commerciaux [Taflove, 2007]. Il existe également des codes disponibles librement en ligne. Parmi les plus récents, on trouve Meep [4] [Oskooi et al., 2010], GMES [5] [Chun et al., 2013], gprMax [6] [Warren et al., 2016], Angora [7][Çapoğlu et al., 2013] ... . D'autres codes sont également disponibles sur le site scattport [8].

4. `http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep`
5. `https://sourceforge.net/projects/gmes/`
6. `http://www.gprmax.com/`
7. `http://angorafdtd.org/`
8. `https://scattport.org/index.php/light-scattering-software/time-domain-codes`

**Applications.** Les domaines d'applications de FDTD sont très semblables à ceux de DDA. Par exemple, elle a été appliqué à des cristaux de glaces [Yang and Liou, 1996a], à des aérosols [Yang and Liou, 2000], et à des globules rouges [Lu et al., 2005]. Yurkin et *al* ont présenté une étude comparative entre les méthodes DDA et FDTD pour des particules sphériques faiblement absorbantes ayant des paramètres de tailles $x$ de 20 à 80 et des indices de réfractions réels $n_r$ compris entre 1.02 et 2 [Yurkin et al., 2007b]. Il montre notamment que DDA apparaît plus rapide que FDTD pour certain jeux de paramètres $(x, n_r)$ et inversement.

#### II.1.2.5 Synthèse

Dans cette section, nous avons présenté différentes méthodes numériques permettant de résoudre le problème de la diffusion d'une onde par une particule. À l'heure actuelle, ces méthodes ne permettent pas de résoudre l'ensemble des configurations qu'il est possible de rencontrer dans l'étude des systèmes photoréactifs. En particulier, des difficultés apparaissent dès lors qu'il s'agit de traiter des particules de grande taille devant la longueur d'onde et/ou avec des formes complexes (c'est le cas pour la plupart des catalyseurs de la photosynthèse), ou encore lorsque les particules ont des indices de réfractions élevés (comme pour les catalyseurs de type semiconducteurs dopés utilisés en photosynthèse artificielle). Comme indiqué dans la Table. II.1, ceci est essentiellement dû à des problèmes de précisions numériques pour les méthodes basées sur une décomposition en base de fonction telles T-Matrix, et/ou à la limitation des ressources informatiques pour les méthodes basées sur une discrétisation de la particule telles que DDA et FDTD. En attendant d'élargir les domaines d'applicabilités de ces méthodes numériques, l'étude de nombreux domaines de la physique et de l'ingénierie nécessitent encore d'utiliser des approximations du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule. C'est l'objet de la section suivante.

TABLE II.1 – Tableau synthétique des avantages et inconvénients des méthodes SVM, T-Matrix, DDA et FDTD.

| | **SVM** | **T-Matrix** | **DDA** | **FDTD** |
|---|---|---|---|---|
| **Particules de formes arbitraires** | Non, limitées à la sphère, au cylindre et au sphéroïde | Non, limitées principalement aux particules axi-symétriques | Oui, y compris particules hétérogènes et anisotropes | Oui, y compris particules hétérogènes et anisotropes |
| **Discrétisation de la particule** | Non | Non | Oui, limitée au domaine de la particule | Oui, mais sur un domaine plus large que celui de la particule |
| **Moyennes orientations/tailles particules** | Non la plupart du temps, mais possibilité de reformulation pour considérer la prise de moyenne sur les orientations | Oui | Nécessite de répéter le calcul | Nécessite de répéter le calcul |
| **Utilisation des symétries des particules** | Oui | Oui | Non | Non |
| **Précisions et stabilités numériques** | Solutions analytiques exactes. Problèmes de convergence pour des grands $x$ et/ou $m_r$ dans le cas du sphéroïde | Solution numérique *exacte* dans les régions de convergence numérique Instabilités numériques pour des grands $x$ et/ou $m_r$, des particules très allongées | Solution numérique *exacte* dans les régions de convergence numérique. Précision numérique augmente doucement lorsque le nombre de cellules augmentent au profit du temps de calcul numérique | |
| **Temps de calcul numérique** | Rapide | Plutôt rapide | Plutôt long notamment lorsqu'il s'agit de tenir compte des distributions de taille et d'orientation des particules | |

### II.1.3 Approximations

En attendant d'élargir les domaines d'applicabilité des méthodes numériques présentées dans la section précédente, un grand nombre d'études radiatives nécessitent d'utiliser des approximations du problème de diffusion onde-particule. Il existe de nombreuses approximations [Jones, 1999; Sharma and Somerford, 2006] dont les critères de validité font, la plupart du temps, intervenir les deux caractéristiques essentielles dans l'étude de l'interaction onde-particule : le paramètre de taille $x$ et l'indice de réfraction complexe relatif $m_r$ (voir Sec. I.2.3). Comme dans le cas des méthodes numériques, ces approximations font l'objet d'une recherche active afin d'étendre leurs domaines de validité respectifs.

Sharma et Somerford ont proposé une table regroupant différentes approximations et leurs domaines de validités [Sharma and Somerford, 2006]. La plupart de ces approximations concernent les particules dites ténues, c'est-à-dire à faible contraste d'indice, ce qui correspond dans notre étude au cas des micro-organismes photosynthétiques. Dans cette section, nous proposons d'introduire quelques unes de ces approximations qui sont certainement les plus connues, en particulier l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye (voir Sec. II.1.3.1) et l'approximation de la diffraction anomale (voir Sec. II.1.3.3). Ces dernières sont particulièrement adaptées à l'étude des micro-organismes photosynthétiques. Leur résolution numérique fera l'objet des chapitres concernant l'approximation de Born (voir Chap. V) et l'approximation de Schiff (voir Chap. IV) qui sont respectivement leurs équivalents en mécanique quantique. Pour les grandes particules à plus fort contraste d'indice, l'approximation de l'optique géométrique - et les travaux mentionnant ses améliorations [Liou et al., 2010; Yuan et al., 2010; Xu et al., 2006a,b; Yang and Liou, 1997, 1996b] - est aussi largement utilisée (voir par exemple [Liou and Yang, 2016; Yang and Liou, 2006]) pour l'étude des cristaux de glace dans un domaine spectral incluant l'infrarouge. Cette dernière approximation ne sera pas davantage développée dans le présent manuscrit.

#### II.1.3.1 Approximation de Rayleigh-Gans-Debye

**Critères de validité.** Cette approximation, développée par Rayleigh [Rayleigh, 1914], Gans [Gans, 1925] et Debye [Debye, 1915], est valable lorsque la taille de la particule est petite devant la longueur d'onde (petits paramètres de taille $x$) et lorsque les propriétés optiques de la particule sont proches de celles de son milieu environnant (indices de réfraction relatif $m_r$ proches de 1, voir définition dans Sec. I.2.3). Formellement, ces critères de validité s'écrivent [Van de Hulst, 1957] :

$$|m_r - 1| \ll 1 \tag{II.2}$$

$$2x|m_r - 1| \ll 1 \tag{II.3}$$

Dans ces conditions, le champ électrique au sein de la particule peut-être assimilé au champ électrique incident. Ceci simplifie le problème de manière significative : le champ interne étant connu de manière explicite, il ne reste plus qu'à faire rayonner les sources correspondantes en champ lointain.

**Formulation et calcul des propriétés radiatives.** Dans le cadre de cette approximation, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ pour une particule homogène de domaine $\mathcal{V}_p$ s'écrit [Van de Hulst, 1957; Bohren and Huffman, 1983] :

$$\bar{\bar{S}}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \begin{pmatrix} S_{11} & 0 \\ 0 & S_{22} \end{pmatrix} \tag{II.4}$$

avec

$$\left.\begin{matrix} S_{11}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) \\ S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) \end{matrix}\right\} = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r - 1) \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{ik_e(\vec{e}_s - \vec{e}_i)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0}_{V_p \mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})} \left\{\begin{matrix} \cos\vartheta_{sca} \\ 1 \end{matrix}\right. \tag{II.5}$$

où il est fréquent, dans la littérature, d'introduire la quantité $\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})$ correspondant au facteur de forme de la particule défini par :

$$\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca}) = \frac{1}{V_p} \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{ik_e(\vec{e}_s - \vec{e}_i)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \tag{II.6}$$

où $\cos\vartheta_{sca} = \vec{e}_i \cdot \vec{e}_s$. L'expression fournie par Eq. II.5 sera établie à partir d'une formulation intégrale du problème de diffusion au chapitre III. Son évaluation demande d'être en mesure de calculer le facteur de forme donné par Eq. II.6. Cette intégrale dépend de la géométrie de la particule, du nombre d'onde $k_e$ de l'onde incidente et de la direction d'observation $\vec{e}_s$. Elle est indépendante de l'indice de réfraction. Les solutions semi-analytiques du facteur de forme $\mathcal{F}$ pour diverses formes classiques de particules (sphère, sphéroïde, cylindre, disque,...) sont disponibles dans la littérature [Van de Hulst, 1957; Kerker, 1969; Fymat, 1979]. Elles font généralement intervenir des fonctions de Bessel et leur évaluation ne pose pas de difficulté. Plus récemment, d'autres solutions ont été obtenues pour les tores [Shapovalov, 2011], les cônes, les cylindres à base hexagonale, les pyramides, les prismes [Shapovalov, 2013], ainsi que les cylindres avec extrémités sphériques, paraboloïdales et pyramidales [Shapovalov, 2015].

À partir de l'expression de la matrice $\bar{\bar{S}}$, les propriétés radiatives pour un rayonnement incident non-polarisé sont obtenues comme suit :

- La section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca})$ est obtenue à partir de la définition Eq. I.23, ce qui demande d'évaluer le module carré des éléments de la matrice amplitude de diffusion :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = \left(\frac{k_e^2 V_p}{2\pi}\right)^2 |m_r - 1|^2 |\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})|^2 \frac{1 + \cos^2\vartheta_{sca}}{2} \tag{II.7}$$

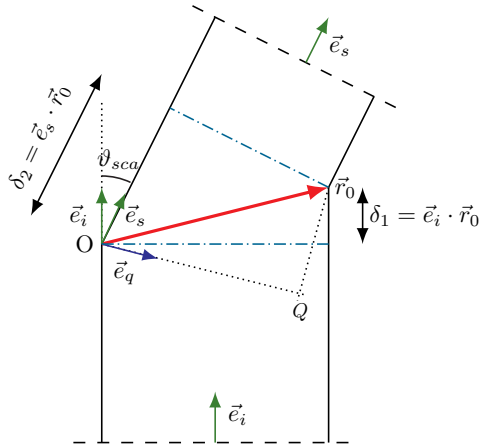



FIGURE II.5 – Représentation graphique des grandeurs géométriques et angulaires utilisées dans l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye. La différence de phase entre l'onde passant par $\vec{r}_0$ par rapport celle passant par l'origine $O$ est $\delta = k_e(\delta_1 - \delta_2) = k_e(\vec{e}_s - \vec{e}_i) \cdot \vec{r}_0 = 2k_e \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\vec{e}_q \cdot \vec{r}_0$ où $\vec{e}_q = \frac{\vec{e}_s - \vec{e}_i}{\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|}$.

- La section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ est obtenue en calculant l'intégrale de la section efficace différentielle de diffusion sur l'angle solide total (voir Eq. I.25) :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \left(\frac{k_e^2}{2\pi}\right)^2 V_p^2 |m_r - 1|^2 \iint_{4\pi} |\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})|^2 \frac{1 + \cos^2\vartheta_{sca}}{2} \sin\vartheta_{sca} d\vartheta_{sca} d\phi_{sca} \quad \text{(II.8)}$$

- La section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ est donnée par [Van de Hulst, 1957] :

$$\hat{\sigma}_{abs} = 2k_e \kappa_r V_p \quad \text{(II.9)}$$

- La section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ est obtenue en prenant la somme de $\hat{\sigma}_{sca}$ et $\hat{\sigma}_{abs}$.

**Illustration de la précision sur une particule sphérique.** Figs. II.6, II.7 et II.8 fournissent les résultats de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye pour une particule sphérique homogène isolée. Les paramètres utilisés pour ces simulations sont choisis de sorte à vérifier les conditions de validité de l'approximation. Les résultats ont été obtenus en évaluant les solutions analytiques données en Annexe D. Ils sont comparés avec ceux donnés par l'approche de Lorenz-Mie qui sert ici de référence. On observe, comme attendu, que l'approximation fournit de très bons résultats pour les faibles contrastes d'indices et faibles paramètres de tailles. Sa pertinence, même pour des paramètres de taille de l'ordre de 10, fait de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye une approximation très utilisée et qui fait toujours l'objet de développements comme nous allons le voir dans la suite.

**Domaines d'application.** La simplicité des expressions mathématiques ainsi que la possibilité de traiter diverses formes de particules (dès lors que l'on est capable de calculer le facteur de forme) rend cette approximation attractive dans différents domaines, d'autant

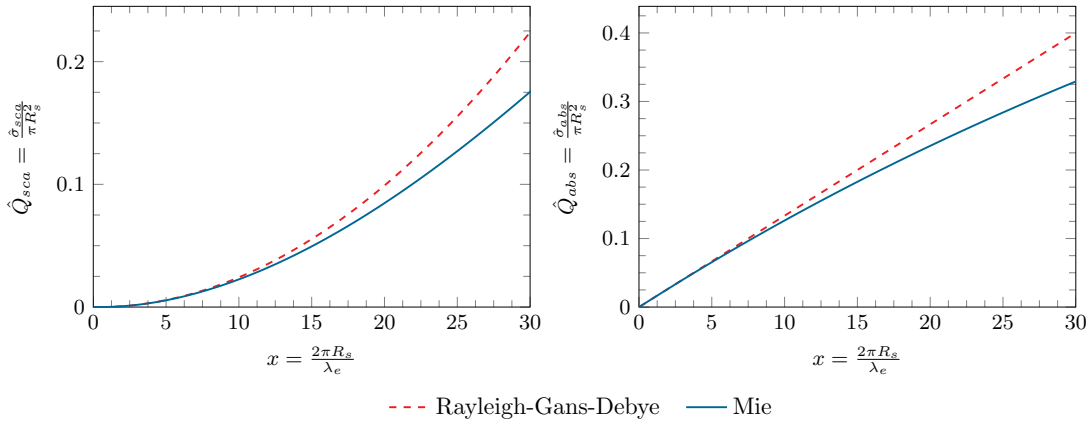



FIGURE II.6 – Efficacités de diffusion $\hat{Q}_{sca}$ et d'absorption $\hat{Q}_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $x$ d'une particule sphérique isolée de rayon $R_s$. Comparaison des résultats de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye et de l'approche rigoureuse de Lorenz-Mie. Paramètres : $\lambda_e = 0.450\,\mu m, m_r = 1.01 - 0.005i$.

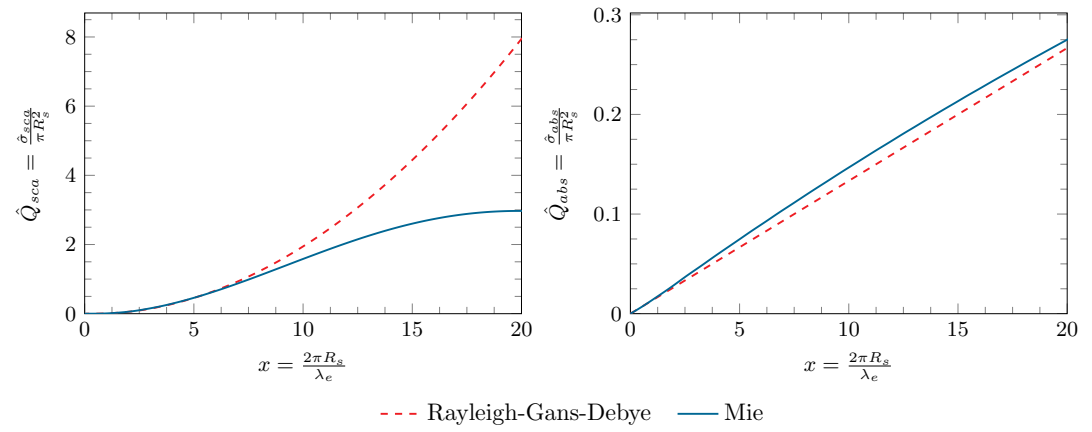



FIGURE II.7 – Efficacités de diffusion $\hat{Q}_{sca}$ et d'absorption $\hat{Q}_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $x$ d'une particule sphérique isolée de rayon $R_s$. Comparaison des résultats de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye et de l'approche rigoureuse de Lorenz-Mie. Paramètres : $\lambda_e = 0.450\,\mu m, m_r = 1.1 - 0.005i$.

plus que de nombreuses particules vérifient les conditions de validité de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye. Par exemple, on peut citer les particules biologiques [Garcia-Lopez et al., 2006], les globules rouges [Yadav and Sharma, 2008], les flocons de neige [Tyynelä et al., 2013], les cristaux de glace [Lu et al., 2014], les particules interstellaires [Sharma, 2015],....

**Modifications et améliorations.** Dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye classique discutée jusqu'ici, l'hypothèse des faibles contrastes d'indice permet de considérer que les champs incident et diffusé se propagent à l'intérieur de la particule avec le nombre d'onde $k_e$. C'est ce qui justifie que le facteur de forme est indépendant de l'indice de réfraction relatif, ce qui n'est pas tout à fait exact. Afin d'inclure cette

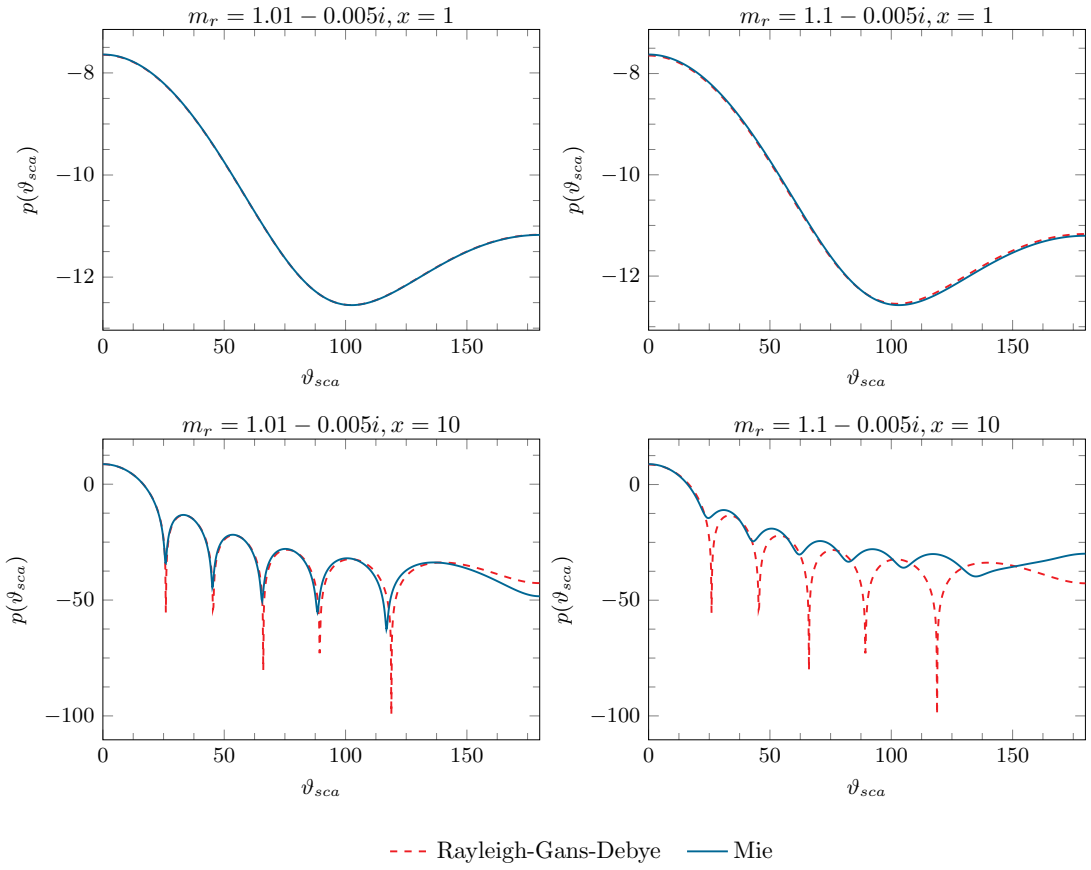



FIGURE II.8 – Fonction de phase $p(\vartheta_{sca}) = \frac{\hat{W}_{sca}}{\hat{\sigma}_{sca}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$. Comparaison des résultats obtenus avec l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye avec ceux de référence obtenus avec l'approche Lorenz-Mie.

dépendance de l'indice de réfraction relatif dans le facteur de forme, SAXON [Saxon, 1973] propose de supposer que l'onde incidente se propage au sein de la particule avec un nombre d'onde égale à $n_r k_e$ (celui du champ diffusé est $k_e$). SHIMIZU propose plutôt de supposer que le champ incident et le champ diffusé se propagent au sein de la particule avec un nombre d'onde égale à $n_r k_e$ [Shimizu, 1979, 1983]. Cette modification permet d'améliorer les résultats de la fonction de phase, en particulier les positions angulaires des minimas et maximas. Initialement établies pour des particules sphériques, les modifications proposées par SAXON et SHIMIZU ont été étendues à des cylindres infinis [Sharma and Somerford, 1988] et des sphéroïdes [Yadav and Sharma, 2008]. Ceci présente un avantage pour les communautés cherchant à estimer la taille des particules dans la mesure où il y a un lien entre la position des extremas et la taille du diffuseur considéré [Sharma and Somerford, 1988; Yadav and Sharma, 2008]. Toutefois, même si les positions des extremas sont mieux déterminées, la valeur de la fonction de phase peut s'écarter de la valeur de référence voire même de celle fournie par l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye classique. Afin de réduire ces écarts, des modifications ont été apportés par GORDON [Gordon, 1985], puis

par Zhao et *al.* [Zhao et al., 2006]. Les précédentes modifications de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye ont surtout permis d'améliorer la fonction de phase. Kómar et *al.* [Kómar et al., 2013] se sont plutôt concentrés sur l'efficacité de diffusion d'une particule sphérique en vue d'améliorer les résultats de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye lorsque l'on augmente les contrastes d'indices.

Le lecteur intéressé trouvera en Annexe D.3 davantage de détails, notamment d'un point de vue formel ainsi que quelques courbes montrant la pertinence des ces améliorations.

#### II.1.3.2 Approximation de Born

L'approximation de Born [Born, 1926] est l'équivalent en mécanique quantique de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye que nous venons de discuter. La seule différence est que dans l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye, le terme $m_r^2 - 1$ (présent initialement dans l'expression du champ électrique, voir Eq. II.1) est remplacé par son développement limitée $2(m_r - 1)$ lorsque $m_r$ est proche de 1. Cela n'est pas fait dans l'approximation de Born. Par conséquent, tout ce qui a été fait dans la section précédente reste valable à condition de remplacer $m_r - 1$ par $\frac{m_r^2-1}{2}$ afin d'obtenir les solutions dans le cadre de l'approximation de Born. Toutefois, il convient de noter que l'expression de la section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ d'une particule isolée homogène devient :

$$\hat{\sigma}_{abs} = 2k_e n_r \kappa_r V_p \tag{II.10}$$

On remarque alors que la section efficace d'absorption dépend cette fois-ci de l'indice de réfraction $n_r$. Ceci provient du fait que lorsque l'on utilise la quantité $m_r^2 - 1$, il y a un produit entre les quantités $n_r$ et $\kappa_r$ [9], ce qui n'est pas le cas dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye.

#### II.1.3.3 Approximation de la diffraction anomale

**Critères de validités.** Cette approximation, introduite par Van de Hulst [Van de Hulst, 1957] dans les années cinquante, est valable pour des particules de grandes tailles devant la longueur d'onde (grands paramètres de taille $x$) et lorsque les propriétés optiques de la particule sont proches de son milieu environnant (indices de réfraction relatif $m_r$ proche de 1, voir définitions dans Sec. I.2.3). Formellement, ces critères de validité

9. Dans le cadre de l'approximation de Born, on a $m_r^2 - 1 = n_r^2 + \kappa_r^2 - 1 + 2in_r\kappa_r$, ce qui met en évidence le produit entre $n_r$ et $\kappa_r$. Dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye, on a seulement $m_r - 1 = n_r - 1 - i\kappa_r$.

s'écrivent :

$$x \gg 1 \tag{II.11}$$

$$|m_r - 1| \ll 1 \tag{II.12}$$

Physiquement, la première hypothèse Eq. II.11 signifie que la propagation de l'onde électromagnétique au sein de la particule peut-être interprétée à l'aide de la notion de rayon de l'optique géométrique. La seconde hypothèse Eq. II.12 signifie que les phénomènes de réfraction et réflexion sont négligeables. Autrement dit, les rayons traversent la particule en ligne droite en ne subissant quasiment pas de déviation. L'approximation de la diffraction anomale consiste donc en une propagation de l'onde électromagnétique incidente en ligne droite au sein de la particule, puis une diffraction de l'onde transmise selon le principe de Huygens. La puissance diffusée est alors concentrée autour de la direction d'incidence.

L'étude de la validité de l'approximation de la diffraction anomale a été réalisée par de nombreux auteurs pour la sphère [Farone and Robinson, 1968], pour le cylindre [Liu et al., 1998], et pour le cube [Masłowska et al., 1994]. En remarquant que l'approximation de la diffraction anomale fournit des résultats satisfaisants pour des indices de réfraction de l'ordre de deux et ceci malgré la condition $|m_r - 1| \ll 1$, Sharma suggère que cette condition est trop restrictive et devrait être remplacée par $|\frac{m_r-1}{m_r+1}|^2 \ll 1$ [Sharma, 1992].

**Formulations et calcul des propriétés radiatives.** Dans le cadre de l'approximation de la diffraction anomale, l'amplitude de diffusion $S$, déterminée à partir de l'expression du champ électrique diffusée fournie en Annexe E, s'écrit [Van de Hulst, 1957] :

$$S(\vartheta_{sca}) = \frac{k_e}{2\pi} \iint_{\mathcal{P}} e^{ik_e(x_0 \cos\phi_{sca} + y_0 \sin\phi_{sca}) \sin\vartheta_{sca}} \left[\mathscr{C}_{sca}(\vec{r}_0) - 1\right] dx_0 dy_0 \tag{II.13}$$

où $x_0$ et $y_0$ sont les coordonnées de la position $\vec{r}_0$ appartenant à la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule. À partir de cette expression, on en déduit la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = |S(\vartheta_{sca})|^2 = \left| \frac{k_e}{2\pi} \iint_{\mathcal{P}} e^{ik_e(x_0 \cos\phi_{sca} + y_0 \sin\phi_{sca}) \sin\vartheta_{sca}} \left[\mathscr{C}_{sca}(\vec{r}_0) - 1\right] dx_0 dy_0 \right|^2 \tag{II.14}$$

Basée essentiellement sur des images physiques, Van de Hulst est seulement en mesure de fournir une description de la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ aux petits angles de diffusion $\vartheta_{sca}$.

La section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ est obtenue en utilisant le théorème optique (voir Eq. I.29 en prenant $S_{11} = S_{22} = S$) qui fait intervenir l'expression de l'amplitude de diffusion Eq. II.13 dans la direction avant (*i.e.* lorsque $\vartheta_{sca} = 0$) :

$$\hat{\sigma}_{ext} = 2\mathfrak{Re}\left[ \iint_{\mathcal{P}} \left(1 - e^{-ik_e(m_r-1)l(\vec{r}_0)}\right) d\vec{r}_0 \right] \tag{II.15}$$

La section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ est obtenue à partir d'image physique. Chaque rayon qui traverse la particule sur une distance $l$ voit son amplitude décroître en $e^{-k_e \kappa_r l}$ à cause du phénomène d'absorption. Par conséquent, la puissance absorbée par la particule lors de la traversée de cette dernière est $1-(e^{-k_e \kappa_r l})^2$. Ainsi, la section efficace d'absorption s'écrit :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \iint_{\mathcal{P}} \left[1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}_0)}\right] d\vec{r}_0 \tag{II.16}$$

La section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ est obtenue par différence entre la section efficace d'extinction et celle d'absorption :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \hat{\sigma}_{ext} - \hat{\sigma}_{abs} \tag{II.17}$$

**Illustration de la précision sur une particule sphérique.** Fig. II.9 montre les résultats obtenus avec l'approximation de la diffraction anomale, résolue par la méthode de Monte Carlo (voir Sec. II.2), pour une particule sphérique homogène isolée pour deux indices de réfractions relatifs différents $m_r = 1.01 - 0.005i$ et $m_r = 1.1 - 0.005i$. Ces deux indices représentent les limites basses et hautes qui sont caractéristiques des micro-organismes photosynthétiques. On constate que les résultats sont en très bon accord avec ceux de références fournis par l'approche de Lorenz-Mie.

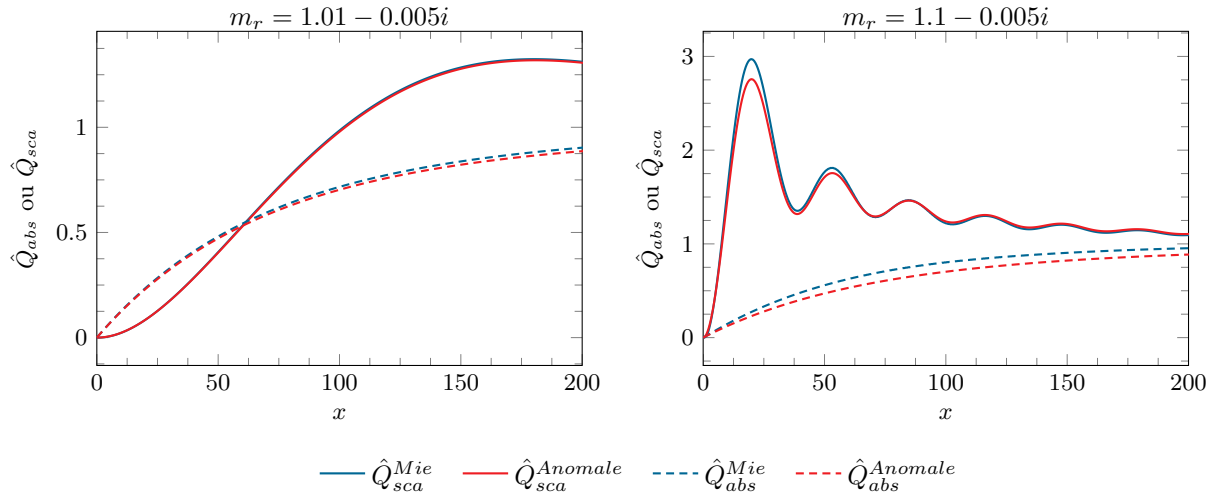



FIGURE II.9 – Efficacités de diffusion $\hat{Q}_{sca} = \hat{Q}_{ext} - \hat{Q}_{abs}$ et d'absorption $\hat{Q}_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $x$ d'une particule sphérique homogène isolée pour deux indices de réfraction relatif $m_r = 1.01 - 0.005i$ et $m_r = 1.1 - 0.005i$. Comparaisons des résultats obtenus avec l'approximation de la diffraction anomale résolue par la méthode de Monte Carlo et ceux obtenus avec l'approche de Lorenz-Mie.

**Applications.** L'approximation de la diffraction anomale est très largement utilisée pour calculer les propriétés radiatives de diverses particules : micro-organismes [Bricaud

and Morel, 1986], cristaux de glaces, globules rouges [Hammer et al., 1998], tissus biomédicaux [Sharma and Banerjee, 2012]... . Sa simplicité a permis de déterminer des expressions analytiques pour de nombreuses formes de particules : sphères [Van de Hulst, 1957], sphères avec un revêtement [Morris and Jennings, 1977], cylindres finis et infinis [Cross and Latimer, 1970; Stephens, 1984; Liu et al., 1998], disques [Bryant and Latimer, 1969], sphéroïdes [Evans and Fournier, 1994], cubes [Napper, 1967; Masłowska et al., 1994], ellipsoïdes [Bryant and Latimer, 1969; Streekstra et al., 1994], colonnes prismatiques [Chýlek and Klett, 1991b,a], colonnes hexagonales [Sun and Fu, 1999],....

**Modifications et améliorations.** L'approximation de la diffraction anomale a fait l'objet de modifications et d'améliorations afin d'obtenir des résultats plus précis vis à vis des solutions de références (par exemple Lorenz-Mie pour une sphère). Pour ce faire, Ackerman et Stephens proposent de prendre en compte les effets de bord de la particule ainsi que les effets de réfractions [Ackerman and Stephens, 1987]. Le premier permet d'améliorer l'évaluation de l'efficacité d'extinction dont la valeur asymptotique est atteinte trop rapidement avec l'approximation de la diffraction anomale classique. La seconde, qui tient compte des phénomènes de réfraction (négligés dans l'approximation classique), se traduit par une augmentation du chemin parcouru par un rayon au sein de la particule ce qui permet de mieux estimer l'efficacité d'absorption (les erreurs commises sont divisées par deux [Ackerman and Stephens, 1987]). Ackerman et Stephens constatent également que la prise en compte de ces effets de réfractions n'améliore pas significativement le résultat sur l'efficacité d'extinction excepté pour des particules avec de plus grands paramètres de taille et de plus grands contrastes d'indice. Mitchell tient compte d'autres phénomènes physiques en plus de ceux précédemment traités en proposant une paramétrisation des réflexions et réfractions internes à la particule, de l'effet tunnel [10] (non négligeable dans l'infrarouge) ainsi que des effets de bord [Mitchell, 2000]. Pour ce dernier point, Mitchell propose une autre expression que celle proposée par Ackerman et Stephens qui surestime l'efficacité d'extinction pour des paramètres de tailles $x \lesssim 15$. En 2008, une interprétation statistique de l'approximation de la diffraction anomale est fournie par Xu et al. [Xu and Katz, 2008]. Ceci permet d'obtenir les propriétés radiatives de n'importe quelle particule à partir d'une description statistique des longueurs de traversées au sein de la particule en tenant compte de des formes, des orientations et des tailles des particules.

10. Phénomène physique par lequel un photon, qui passe à proximité de la particule sans la traverser, peut être absorbé par la particule. Ceci permet d'expliquer les écarts observés entre l'approche de Lorenz-Mie et l'approximation de la diffraction anomale classique lors de l'étude d'une particule sphérique soumise à un rayonnement infrarouge.

### II.1.3.4 Approximation de Schiff

L'approximation de Schiff [Schiff, 1956] est l'équivalent en mécanique quantique de l'approximation de la diffraction anomale discutée précédemment. Elle vérifie les mêmes conditions de validité (Eqs. II.11 et II.12). Bien qu'équivalente, nous verrons dans Sec. III.6.2 que, contrairement à Van de Hulst, Schiff propose une description de la fonction de phase aux grands angles de diffusion. L'approximation de Schiff permet ainsi d'avoir une description des puissances diffusées sur l'ensemble de la gamme angulaire $[0, 2\pi]$. Ceci intéresse tout particulièrement la communauté des photo-procédés. Nous reviendrons plus en détail sur cette approximation dans Sec. III.6 et sur sa résolution numérique au chapitre IV.

### II.1.3.5 Synthèse

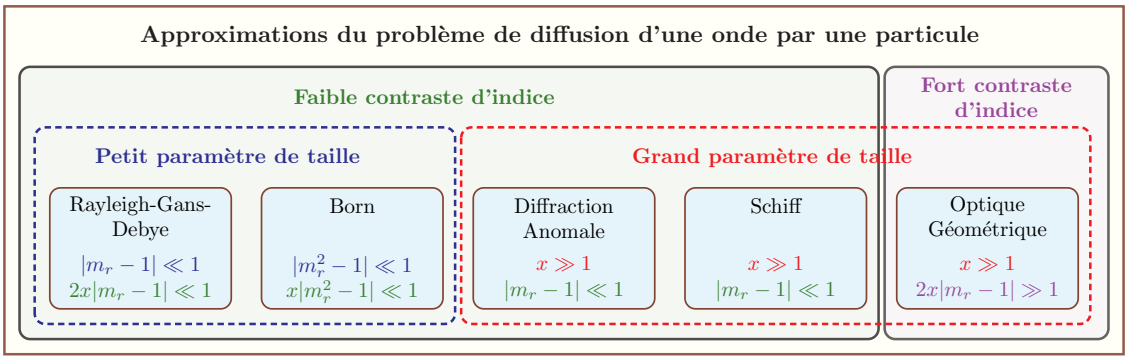



Figure II.10 – Quelques approximations du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule avec leur conditions de validités. Ces approximations sont également rangées de sorte à regrouper d'une part les approximations valables pour les petits ou grands paramètres de tailles, et d'autre part, les approximations valables pour les faibles ou les forts contrastes d'indices.

Fig. II.10 regroupe les approximations du problème de diffusion d'une onde par une particule que nous avons discutées précédemment. Comme nous avons pu le voir, ces approximations sont attractives dans la mesure où d'une part elles fournissent des résultats suffisamment précis vis à vis des solutions de références, et d'autre part, elles permettent de calculer les propriétés radiatives dans un grand nombre d'applications. Toutefois, même s'il s'agit de modèles approchés de l'interaction onde-particule, la résolution numérique de ces approximations est loin d'être évidente. En effet, il faut être en mesure de calculer l'intégrale sur le volume ou la surface projetée d'une particule, ce qui peut-être délicat dès lors que l'on s'intéresse à des particules à géométries complexes. De plus, l'évaluation de la section efficace différentielle de diffusion nécessite de calculer le module carrée d'une intégrale.

La section suivante présente les bases de la méthode de Monte Carlo qui va être proposée et utilisée dans toute la suite du manuscrit comme méthode de calcul. Dans ce qui va suivre, nous reviendrons plus en détail, en particulier, sur les approximations de Schiff (voir Sec. III.6) et de Born (voir Sec. III.4), car elles sont parfaitement adaptées à l'étude des micro-organismes photosynthétiques. La résolution numérique de ces approximations par la méthode de Monte Carlo fera l'objet des chapitres IV et V.

## II.2 Méthode de Monte Carlo

*Note : Les notions de statistique nécessaires à l'utilisation de la méthode de Monte Carlo sont fournies Annexe F.*

La méthode de Monte Carlo, développée dans les années quarante par Ulam, Von Neumann, Fermi et plus particulièrement Metropolis [Metropolis, 1987; Eckhardt, 1987], est une méthode statistique basée sur l'utilisation de nombres aléatoires, la loi des grands nombres et le théorème central limite (voir Annexe F). Elle permet d'estimer la valeur d'une grandeur intégrale qui est définie comme l'espérance d'une variable aléatoire. De plus, à chaque estimation de la grandeur, est systématiquement associée une estimation de l'erreur statistique. Ceci permet de fournir une indication sur la pertinence et la précision de l'estimation de la grandeur considérée, ce qui est un avantage par rapport aux autres méthodes numériques citées dans Sec. II.1.2. De plus, la méthode de Monte Carlo permet de traiter les géométries complexes. C'est un des avantages principaux par rapport aux méthodes déterministes. En effet la morphologie des micro-algues, lorsque celle-ci est loin de celles des sphères, comme nous le verrons plus tard, nécessite de faire appel à des méthodes statistiques afin d'éviter la lourdeur des temps de calcul. Cette approche va prendre tout son sens lorsqu'en plus de la forme complexe, il faudra prendre en compte les distributions de taille et d'orientation des micro-algues. Ces points seront traités plus en détail par la suite.

Dans ce qui suit, il s'agit d'introduire le principe du calcul d'une intégrale par la méthode de Monte Carlo que nous allons utiliser tout au long du manuscrit. Puis nous présenterons les avantages, les techniques et les outils liés à cette méthode qui vont nous permettre d'aborder la résolution du problème de diffusion par une particule dont l'état de l'art à été introduit dans Sec. II.1.

### II.2.1 Principe du calcul d'une intégrale

La méthode de Monte Carlo est une méthode de calcul d'intégrales. Pour un souci de clarté, prenons le cas d'une intégrale simple sachant que l'approche est généralisable à des intégrales multiples et même à une infinité d'intégrales. Pour le moment, considérons l'intégrale simple $\mathcal{I}$ suivante :

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{D}_X} f(x)dx \tag{II.18}$$

où $f$ est une fonction définie sur le domaine $\mathcal{D}_X$. Afin d'écrire cette intégrale sous une forme statistique, introduisons une variable aléatoire $X$ continue à valeur dans le domaine $\mathcal{D}_X$. Ceci permet alors de définir la fonction densité de probabilité $p_X(x)$ associée. En mul-

tipliant et divisant l'intégrande de l'intégrale $\mathcal{I}$ par cette fonction densité de probabilité, on fait apparaître un poids $w$ qui dépend de la fonction densité de probabilité :

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{D}_X} f(x)dx = \int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) \underbrace{\frac{f(x)}{p_X(x)}}_{=w(x)} dx = \int_{\mathcal{D}_X} p_X(x)w(x)dx = \mathbb{E}[w(X)] \tag{II.19}$$

La quantité $w(x) = \frac{f(x)}{p_X(x)}$ est appelée la fonction poids ou poids de Monte Carlo associée au calcul de $\mathcal{I}$. À noter que nous venons de définir l'intégrale $\mathcal{I}$ comme une espérance (notée $\mathbb{E}[]$) de la variable aléatoire $w(X)$. On peut alors utiliser la loi des grands nombres en générant aléatoirement $N$ réalisations $x_1, x_2, ..., x_N$ de la variable aléatoire $X$. Cela permet de générer $N$ réalisations $w_1, ..., w_N$ de la variable aléatoire $w(X)$, permettant ainsi de déduire la moyenne arithmétique $\overline{w(X_N)} = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} w_i$. La loi des grands nombres nous permet alors d'écrire que, lorsque $N$ est suffisamment grand, la moyenne arithmétique $\overline{w(X_N)}$ constitue un estimateur non biaisé $\mathcal{I}^\star$ de l'espérance de $w(X)$. Ainsi,

$$\mathcal{I} = \mathbb{E}[w(X)] \approx \overline{w(X_N)} = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} w_i = \mathcal{I}^\star \tag{II.20}$$

Nous venons d'obtenir une estimation $\mathcal{I}^\star$ de notre grandeur initiale $\mathcal{I}$. Il reste à déterminer l'erreur commise sur cette estimation. D'après le théorème central limite, l'écart type associé à l'estimation de l'intégrale $\mathcal{I}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{std}_{\mathcal{I}^\star} &= \sqrt{\text{Var}(\overline{w(X_N)})} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\text{Var}(w(X_N))} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\mathbb{E}[w(X)^2] - \mathbb{E}[w(X)]^2} \end{aligned} \tag{II.21}$$

Une estimation de cet écart type est alors donnée par :

$$\text{std}_{\mathcal{I}^\star} \approx \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} w_i^2 - \left(\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} w_i\right)^2} \tag{II.22}$$

Comme évoqué précédemment, les résultats que nous venons d'obtenir sur une intégrale simple peuvent être étendus au calcul d'intégrales multiples. Ce sera notamment le cas dans ce manuscrit dès lors que nous tiendrons compte, par exemple, des distributions de taille, d'orientation et de forme des particules (voir Sec. II.2.3.1), ou que nous aurons à traiter une non linéarité quadratique (voir Sec. II.2.3.3). Nous verrons plus loin que, ceci ne pose aucune difficulté car la propriété essentielle que nous utiliserons est que l'espérance d'une espérance est encore une espérance.

### II.2.2 Avantages au niveau informatique : gestion des géométries complexes et parallélisation

Comme spécifié précédemment, à l'issue de l'état de l'art des méthodes numériques (voir Sec. II.1.2), la gestion des géométries complexes reste une difficulté à part entière et/ou coûteuse en temps de calcul. En effet, contrairement à T-Matrix et la méthode de séparation des variables SVM, la méthode de Monte Carlo est en mesure de gérer n'importe quelle géométrie complexe d'une particule donnée par un fichier CAO (Conception Assistée par Ordinateur) tel que celui présenté Fig. II.11 correspondant à une particule hélicoïdale modélisant la cyanobactérie *Arthrospira platensis*, plus connue sous le nom de spiruline. De plus, contrairement à DDA et FDTD, il n'y a pas besoin de créer un maillage en volume de la géométrie considérée. En effet, les algorithmes de Monte Carlo tels que nous les concevons sont indépendants de la géométrie des systèmes étudiés. On parle souvent d'orthogonalité entre l'algorithme conçu par le physicien pour calculer la grandeur d'intérêt et la donnée qui représente le système à étudier (géométrie, propriétés thermophysiques, radiatives, etc..). Ce concept, issu du monde de la synthèse d'image, a des répercutions majeures sur la réduction des temps de calculs puisque l'on a accès à la donnée seulement lorsque l'on en a besoin. Par rapport aux méthodes énoncées au chapitre précédent, plutôt déterministes, cette orthogonalité vient du fait que les techniques statistiques ne nécessitent pas de mailler les particules. Nous bénéficions des techniques d'intersections entre les rayons lumineux et les objets d'une scène les plus avancées de la communauté informatique ; nous utilisons les librairies disponibles dans la littérature ([Pharr et al., 2016] par exemple). En effet, cette orthogonalité permet de traiter n'importe quelle géométrie [Eymet et al., 2013] dès lors que nous disposons d'une CAO (voir Fig. II.11). Du fait que les tirages aléatoires sont indépendants, les méthodes de Monte Carlo sont directement parallélisables, nous pouvons donc également bénéficier de cet avantage.

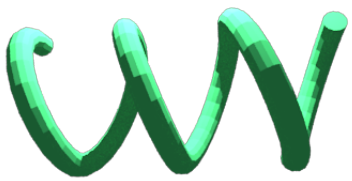


FIGURE II.11 – Exemple de fichier CAO d'une particule hélicoïdale représentant la cyanobactérie *Arthrospira platensis* (spiruline).

### II.2.3 Formulation intégrale, analyse de sensibilité, gestion des non-linéarités et principe de zéro-variance

#### II.2.3.1 Intégrales multiples et domaine d'intégration à dimension élevée

**Distributions statistiques de paramètres.** En tant que méthode statistique, la méthode de Monte Carlo (MCM) permet de prendre en compte n'importe quelle distribution de paramètres telle que la taille et l'orientation des particules. Ceci se fait sans augmentation significative du temps de calcul comparé à celui que l'on obtiendrait pour une particule de taille et d'orientation fixée. Ainsi, MCM s'avère beaucoup plus adaptée que les méthodes DDA et FDTD pour lesquelles le calcul doit être répété pour chaque taille et/ou orientation d'autant plus que le maillage est susceptible d'être modifié. Il a été également montré qu'il est possible de prendre en compte la distribution de forme des particules constituant une suspension [Weitz et al., 2016].

**Monte Carlo et équation intégrale de Fredholm de seconde espèce.** La formulation intégrale volumique du champ électrique (voir Eq. II.1) est une équation intégrale de Fredholm de seconde espèce. La résolution de ce type d'équations par la méthode de Monte Carlo est classique, comme par exemple en physique du transport. En effet, la méthode de Monte Carlo est notamment la méthode de référence pour résoudre l'équation de Boltzmann linéaire en neutronique et en transfert radiatif. Les algorithmes de Monte Carlo correspondants évaluent une formulation intégrale de la solution de l'équation de Fredholm [Delatorre et al., 2014]. Cette formulation peut être obtenue en redéployant l'équation de Fredholm de départ, c'est-à-dire en l'injectant de manière récursive dans elle même. Cela conduit à une formulation comportant une infinité d'intégrales de dimension croissante, ce qui ne pose aucune difficulté conceptuelle pour une résolution par la méthode de Monte Carlo, puisque sa convergence est indépendante de la dimension des domaines d'intégration. En pratique, cela conduit simplement à des algorithmes récursifs. Bien que classique dans le domaine du transport linéaire (et en particulier en transfert radiatif), c'est la première fois à notre connaissance qu'une telle approche est appliquée à l'équation de Fredholm du champ électrique donnée par Eq. II.1. La résolution de cette équation fera l'objet du chapitre VI en utilisant un redéploiement connu : le développement en série de Born.

#### II.2.3.2 Analyse de sensibilité

Lorsqu'une grandeur est estimée par un algorithme de Monte Carlo, il est possible d'étudier l'influence d'un paramètre $\pi$ sur la grandeur en réalisant une analyse de sensibilité, c'est-à-dire calculer les dérivées de la grandeur par rapport à $\pi$. Ceci permet alors

d'avoir une analyse physique de la grandeur considérée. De plus, ce type d'information est intéressant dès lors que l'on souhaite optimiser un procédé et fournir les paramètres pertinents grâce à l'étude des sensibilités (voir par exemple [Dauchet, 2012] pour les photobioréacteurs et [Delatorre et al., 2014; Farges et al., 2015] pour les centrales solaires).

En pratique, réaliser une analyse de sensibilité nécessite seulement d'ajouter quelques lignes de code supplémentaires pour estimer simultanément la grandeur ainsi que ses dérivées par rapport à l'ensemble des paramètres d'intérêt $\pi$. Un des avantages est que tout ceci se fait sans augmentation significative du temps de calcul puisque la même procédure d'échantillonnage est utilisée. Autrement dit, la même formulation intégrale est utilisée pour évaluer la grandeur ainsi que ses sensibilités. Seul le poids de Monte Carlo est modifié.

Dans ce manuscrit, nous calculerons les sensibilités des propriétés radiatives par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$, aux parties réelle $n_r$ et imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfraction relatif $m_r$.

#### II.2.3.3 Monte Carlo et non linéarités

L'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour traiter des problèmes non linéaires a longtemps été considéré comme une difficulté incontournable [Curtiss, 1953] dans la mesure où cette méthode est restreinte à des combinaisons linéaires des domaines d'intégrations [Kalos and Whitlock, 2008; Dauchet et al., 2016a]. Depuis un peu plus de dix ans maintenant, différentes techniques sont disponibles permettant de résoudre certains problèmes non linéaires par la méthode de Monte Carlo. Par exemple, T. Dimov a mis en place des processus dit "branchants" pour résoudre des équations intégrales de Fredholm contenant des fonctions polynomiales non linéaires [Dimov and Gurov, 2000; Dimov, 2008]. Plus récemment, les non linéarités des fonctions exponentielles d'intégrales ont pu être gérées en utilisant la technique des algorithmes à collisions nulles [Galtier et al., 2013; Galtier, 2014]. Enfin, J. Dauchet a introduit une approche utilisant un développement en série de Taylor afin de gérer des non linéarités dues à des fonctions puissances [Dauchet, 2012]. Dans ce manuscrit, nous serons confrontés à traiter une non linéarité quadratique qui intervient lors du calcul des propriétés radiatives. En effet, comme nous l'avons vu dans l'état de l'art (notamment dans la section Sec. II.1.3 concernant les approximations), le calcul des propriétés radiatives nécessite d'évaluer le module carré d'une intégrale. Comme nous le verrons plus tard, il est nécessaire de reformuler ce module carré afin d'obtenir une formulation intégrale adéquate à la méthode de Monte Carlo, c'est-à-dire écrite comme une combinaison linéaire des domaines d'intégrations [Dauchet, 2012; Charon et al., 2016]. Plus précisément, le module carré de l'intégrale sera reformulé de sorte que l'on ait à calculer une intégrale multiple. Formellement, nous montrerons plus

tard dans le manuscrit que l'on peut écrire :

$$\left|\int_{\mathcal{D}} f(\vec{r})d\vec{r}\right|^2 = \int_{\mathcal{D}}\int_{\mathcal{D}} \left[\mathfrak{Re}\, f(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, f(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, f(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, f(\vec{r}_2)\right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \tag{II.23}$$

où $\mathcal{D}$ est le domaine de définition de l'intégrale, $f$ est une fonction appartenant au corps des nombres complexes.

#### II.2.3.4 Optimisation des algorithmes par application du principe de zéro variance

Nous avons déjà vu qu'à chaque fois qu'une grandeur est estimée par la méthode de Monte Carlo, nous disposons également de l'incertitude associée à l'estimation de la dite grandeur. Cette incertitude peut-être réduite dès lors que l'on augmente le nombre de réalisations : multiplier par 100 le nombre de réalisations permet de diviser par 10 l'incertitude initiale. Cependant, procéder de cette façon peut s'avérer particulièrement lourd et inefficace, puisque cela entraîne inévitablement une augmentation du temps de calcul. Dans la littérature, il existe diverses techniques alternatives permettant de réduire l'incertitude associée à l'estimation d'une grandeur sans avoir recours à augmenter le nombre de réalisations. Ces techniques, connues sous le nom de techniques de réduction de variance, sont recensées dans les références suivantes [Hammersley and Handscomb, 1964; Dunn and Shultis, 2012; Kleijnen et al., 2013]. Parmi ces techniques, on trouve l'approche zéro-variance ou variance nulle [Assaraf and Caffarel, 1999] qui est connue depuis les débuts de la méthode de Monte Carlo et qui a été utilisée à de nombreuses reprises dans différents travaux du groupe Starwest [11] [De la Torre, 2011; Dauchet et al., 2013; Delatorre et al., 2014; Galtier, 2014]. Les algorithmes à zéro-variances ou à variances nulles [Assaraf and Caffarel, 1999] sont des algorithmes pour lesquels à chaque réalisation, la fonction poids est égale à la valeur de la grandeur que l'on cherche à évaluer. Autrement dit, on obtient une estimation exacte de la grandeur en une seule réalisation. Si une telle situation se produit, c'est que la valeur de la grandeur est déjà connue auquel cas une évaluation numérique n'est pas nécessaire. Par contre, suivre une approche de type zéro-variance, comme nous le ferons au chapitre VII, s'avère très utile pour optimiser les procédures d'échantillonnages. Une telle approche sert de guide pour réduire l'incertitude associée à la grandeur à estimer.

## II.3 Conclusion

La résolution du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une suspension de particules arbitraires est une difficulté récurrente qui n'est pas complètement

11. `http://www.starwest.ups-tlse.fr/`

résolue avec les méthodes numériques présentées dans Sec. II.1.2. En effet, d'une part, nous avons vu que les méthodes de séparation des variables SVM et T-Matrix ne permettent pas de traiter des particules de formes complexes telle que *Arthrospira platensis* (spiruline), par exemple. D'autre part, bien que les méthodes DDA et FDTD permettent de traiter des particules avec des géométries complexes, elles sont vite limités par les ressources informatiques qu'elles nécessitent lorsque les particules deviennent grande devant la longueur d'onde et avec des formes très allongées (impliquant des rayons de courbures localement faibles). Par exemple, pour des raisons de taille et d'accès mémoire, ces méthodes sont à l'heure actuelle dans l'incapacité de fournir les propriétés radiatives d'une micro-algue hélicoïdale telle qu'*Arthrospira platensis*, qui est typiquement 700 fois plus longue que la longueur d'onde $\lambda_0$, possède un diamètre de l'ordre de $10\lambda_0$ et un pas d'hélice de $60\lambda_0$ (voir Fig. II.12). De plus, même pour les micro-algues suffisamment petites, ces méthodes ne sont pas vraiment adaptées dès lors que l'on souhaite tenir compte des distributions de taille et d'orientation des particules constituants la suspension. Ceci n'est pas impossible mais requiert beaucoup de temps de calcul puisque celui-ci doit être refait à chaque nouvelle taille et/ou orientation de la particule. Ainsi, il semblerait qu'il n'existe pas de méthode disponible qui puisse gérer, de manière efficace, à la fois les géométries complexes des particules de taille intermédiaire (entre le domaine de résonance et celui de l'optique géométrique) et leurs distributions de taille, d'orientation et de forme.

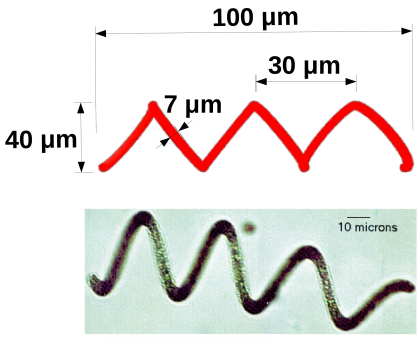



FIGURE II.12 – Illustration du micro-organisme *Arthospira platensis*, plus connu sous le nom de spiruline. Les dimensions représentées sont à comparer aux longueurs d'onde intervenant dans l'étude des photobioréacteurs : $\lambda_0 \in [400, 750]nm$ (PAR, *Photosynthetically Active Radiation*).

Fort de ce constat et compte tenu du fait que le problème de diffusion onde-particule peut-être écrit sous forme intégrale (voir Sec. II.1), il est envisagé ici de le résoudre par la méthode de Monte Carlo (MCM). D'une part, nous avons vu que cette méthode est parfaitement adaptée à une résolution en géométrie complexe, notamment grâce aux outils de la synthèse d'image. D'autre part, la méthode de Monte Carlo est en mesure de gérer les intégrales multiples sans difficultés particulières, ce qui devrait nous permettre de tenir compte des distributions de taille et d'orientation des particules sans que cela n'engendre

une augmentation significative du temps de calcul (contrairement aux méthodes DDA et FDTD). Ces deux atouts majeurs (géométries complexes et distributions de variables) nous orientent vers le choix de la méthode de Monte Carlo car elle apparaît comme une méthode numérique extrêmement prometteuse pour répondre aux besoins des chercheurs et ingénieurs de la communauté Photo-procédés. De plus, un ensemble de techniques de la méthode de Monte Carlo permettent de réaliser une analyse des résultats obtenus, pouvant ainsi fournir de précieuses informations en vue de l'optimisation des photo-procédés : calcul systématique de l'incertitude et analyse de sensibilité (voir Sec. II.2.3.3). Cependant, la méthode de Monte Carlo n'a jamais été utilisée à notre connaissance pour l'obtention des propriétés radiatives de particules (sauf dans un travail préliminaire à l'origine de cette thèse [Dauchet, 2012]) et l'exploration de cette piste fait l'objet de la suite de ce manuscrit. Mais avant de nous concentrer sur l'utilisation de la méthode de Monte Carlo, nous allons d'abord établir au chapitre suivant les formulations intégrales du champ électrique diffusé, de la matrice amplitude de diffusion ainsi que des propriétés radiatives, pour les trois modèles dont nous étudierons la résolution par la suite : approximation de Schiff, approximation de Born et développement en série de Born.

# CHAPITRE III

# Établissement de formulations intégrales d'électromagnétisme étudiées dans ce manuscrit

En partant des équations de Maxwell, ce chapitre reprend les étapes de formalisation du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule, jusqu'à l'établissement des formulations intégrales d'électromagnétisme dont la résolution numérique constituera l'objectif des chapitres suivants. Ces formulations intégrales seront rappelées par la suite, lorsque nous chercherons à les résoudre. Si ce chapitre ne comporte pas d'originalité par rapport aux travaux déjà existants en électromagnétisme, il permet toutefois de faire un point qui était nécessaire à l'avancée de cette thèse et qui pourra être utile aux spécialistes de la méthode de Monte Carlo et des photo-procédés désireux de s'approprier notre travail. Ce sera aussi l'occasion de poser un jeu cohérent de notations qui seront utilisés dans la suite du manuscrit.

## III.1 Équations de Maxwell

### III.1.1 Bref historique de la naissance de l'électromagnétisme

Les phénomènes électriques et magnétiques, connus depuis l'antiquité, ont été considérés comme deux phénomènes distincts de la physique pendant de nombreuses années. Ce n'est qu'au XIX$^{ème}$ siècle et notamment suite aux travaux expérimentaux, entre autres, des scientifiques Ørsted [1], Ampère [2] et Faraday [3] qu'un lien est envisagé entre l'électricité et le magnétisme, que l'on connait sous le nom d'électromagnétisme. Plus précisément, en avril 1820, Ørsted découvre qu'un fil parcouru par un courant électrique placé à proximité d'une aiguille aimanté met ladite aiguille en mouvement. Autrement dit, un courant électrique peut générer un champ magnétique. Il montra alors que le champ magnétique

1. Hans Christian Ørsted (1777 - 1851) : physicien et chimiste danois à l'université de Copenhague. En 1820, il découvrit l'influence d'un courant électrique sur l'aiguille d'une boussole

2. André-Marie Ampère (1775 - 1836) : mathématicien et physicien français membre de l'Académie des sciences, professeur à l'Ecole Polytechnique ainsi qu'au Collège de France.

3. Michael Faraday (1791 - 1867) : physicien et chimiste anglais. Très grand expérimentateur.

ainsi formé engendre des boucles fermées autour du fil parcouru par le courant électrique. Ces travaux furent publiés en juillet 1820 [Mattis, 1981] et eurent des répercussions très positives dans le monde scientifique. En France, en septembre 1820, Arago[4] rapporte la découverte d'Ørsted à l'Académie des Sciences [Gay-Lussac and Arago, 1820]. Suite à cela, d'autres expériences suivirent afin d'expliquer les liens entre les phénomènes électriques et magnétiques. Biot[5] et Savart[6], deux académiciens, dirigent leurs efforts sur l'étude de la force magnétique engendrée par un fil droit traversé par un courant électrique [Whittaker, 1910]. Au même moment, Ampère, également membre de l'Académie, étudie les interactions entre les courants. Il établit ainsi l'expression de la force magnétique exercée par deux fils parallèles traversés par un courant électrique et postule que cette force est proportionnelle au carré de l'inverse d'une distance [Ampère, 1825; Whittaker, 1910; Helrich, 2012]. Cette expression connue sous le nom de loi d'Ampère ainsi que l'expérience d'Ørsted conduiront aux équations de Maxwell. Quelques années plus tard, en 1831, Faraday mis en évidence, à la suite d'une série d'expériences [Helrich, 2012], qu'il est possible de produire un courant électrique à partir d'un phénomène magnétique : c'est la découverte du phénomène d'induction électromagnétique. Suite aux travaux de ses prédécesseurs, précédemment cités ainsi que ceux réalisés par Coulomb[7] dans le cadre de l'électrostatique en 1785, Maxwell présente en 1864 devant la Royal Society, un ensemble de vingt équations à vingt variables qui permet d'unifier les lois de l'électricité et du magnétisme. Maxwell apporta également une modification majeure de la loi d'Ampère en y incluant un terme supplémentaire permettant de vérifier la conservation de la charge en régime variable. On retrouve l'ensemble de ces équations dans son célèbre mémoire intitulé "*A treatise on electricity and magnetism*" [Maxwell, 1873]. Plus tard, Heaviside[8] et Gibbs[9] réduisirent l'ensemble des vingt équations de Maxwell à quatre équations vectorielles que nous utilisons de nos jours. Le lecteur intéressé pourra consulter l'article intitulé *On the notations of Maxwell's field equations* [Waser, 2000] qui permet de faire le lien entre les notations actuelles et celles utilisé par Maxwell. Ce dernier prédit également que les ondes électromagnétiques se propagent à la vitesse de la lumière et que la lumière elle même est une onde électromagnétique. Les expériences de Hertz[10] en 1888 confirment les prédictions de Maxwell [Mattis, 1981]. Le XIX$^{ème}$ siècle vu ainsi naître l'electrodynamique / l'electromagnétisme qui est désormais une branche à part entière de

4. François Arago (186 - 1853) : astronome, physicien et homme politique français. En 1809, il devient membre de l'Académie des Sciences.
5. Jean-Baptiste Biot (1774 - 1862) : physicien, astronome et mathématicien français.
6. Félix Savart (1791 - 1841) : médecin chirurgien et physicien français.
7. Charles-Augustin Coulomb (1736 - 1806) : officier, ingénieur et physicien français.
8. Oliver Heaviside (1850 - 1925) : ingénieur électricien, mathématicien et physicien anglais.
9. Josiah Willard Gibbs (1839 - 1903) : physicien, chimiste et mathématicien américain.
10. Heinrich Rudolf Hertz (1857 - 1894) : ingénieur et physicien allemand.

la physique et qui a conduit à de nombreuses applications dans le monde de la science et de l'ingénierie. Le lecteur trouvera d'autres éléments historiques plus détaillés dans les diverses sources précédemment mentionnées ainsi que dans les ouvrages qui suivent [Wen, 2010; Darrigol, 2005; Chappert, 2007]. Dans la suite, nous donnons les équations de Maxwell sous leur forme mathématique actuelle.

### III.1.2 Équations de Maxwell dans le domaine temporel

La propagation des ondes électromagnétiques, telle que la lumière visible qui fait l'objet de notre étude, ainsi que l'interaction de ces ondes avec la matière sont décrites par les équations de Maxwell macroscopiques qui dans le domaine temporel s'écrivent [Jackson, 1998] :

$$\operatorname{div} \vec{D}(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t) \tag{III.1}$$

$$\operatorname{div} \vec{B}(\vec{r},t) = 0 \tag{III.2}$$

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\, \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r},t)}{\partial t} \tag{III.3}$$

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\, \vec{H}(\vec{r},t) = \vec{J}(\vec{r},t) + \frac{\partial \vec{D}(\vec{r},t)}{\partial t} \tag{III.4}$$

où les grandeurs $\vec{E}$, $\vec{H}$, $\vec{D}$, $\vec{B}$, $\vec{J}$ et $\rho$ dépendent de la position d'observation $\vec{r}$ ainsi que du temps $t$, et désignent :

- $\vec{E}$ : le champ électrique $(V \cdot m^{-1})$
- $\vec{H}$ : le champ magnétique $(A \cdot m^{-1})$
- $\vec{D}$ : le déplacement ou induction électrique $(C \cdot m^{-2})$
- $\vec{B}$ : l'induction magnétique $(N \cdot A^{-1} \cdot m^{-1})$
- $\vec{J}$ : la densité de courant $(A \cdot m^{-2})$
- $\rho$ : la densité volumique de charges électriques $(C \cdot m^{-3})$

**Équation de conservation de la charge.** Le vecteur densité de courant $\vec{J}(\vec{r},t)$ représente les sources émises par tous les champs électromagnétiques qui se propagent. Les équations de Maxwell contiennent implicitement l'équation de conservation de la charge reliant la densité de charge $\rho$ et la densité de courant $\vec{J}$. En effet, en dérivant Eq. III.1 par rapport au temps, puis en injectant Eq. III.4 dans l'expression obtenue, et en utilisant le fait que $\operatorname{div} \overrightarrow{\operatorname{rot}}\, \vec{H} = 0$, on en déduit l'équation locale de conservation de la charge :

$$\frac{\partial \rho(\vec{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J}(\vec{r},t) = 0 \tag{III.5}$$

**Relations constitutives.** Lorsque les quantités $\vec{J}$ et $\rho$ sont connues et vérifient l'équation de continuité Eq. III.5, le système d'équations Eqs. III.1 à III.4 comporte douze inconnues, qui sont les composantes des différents champs, pour huit équations scalaires (deux équations scalaires et deux équations vectorielles). Pour fermer le problème, nous introduisons deux relations supplémentaires qui permettent de décrire le milieu dans lequel les ondes électromagnétiques se propagent. Ces relations, dîtes **relations constitutives**, permettent, indépendamment des équations de Maxwell, de faire le lien entre les propriétés du milieu de propagation et les différents champs. Elles peuvent se mettre sous la forme [Jackson, 1998; Jin, 2015] :

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r},t) + \vec{P}(\vec{r},t) \tag{III.6}$$

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r},t) + \vec{M}(\vec{r},t) \tag{III.7}$$

où les constantes $\varepsilon_0$ et $\mu_0$ sont respectivement la permittivité électrique du vide et la perméabilité magnétique du vide. Les quantités $\vec{P}(\vec{r},t)$ et $\vec{M}(\vec{r},t)$ sont respectivement les vecteurs polarisation et aimantation. Ils traduisent le déplacement des charges liées contenues à l'intérieur du milieu. De manière très générale, ces deux vecteurs dépendent à la fois des champs électrique $\vec{E}$ et magnétique $\vec{H}$.

Dans la suite, nous nous limiterons à la description de milieu **linéaire**, **instantané** (*i.e.* sans mémoire), **isotrope** et **non magnétique** (pour d'autres descriptions voir, par exemple,[Jin, 2015]). Sous cette hypothèse, les vecteurs $\vec{P}$ et $\vec{M}$ peuvent se mettre sous la forme suivante [Van Bladel, 2007; Jin, 2015] :

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \chi_e(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r},t) \tag{III.8}$$

$$\vec{M}(\vec{r},t) = \vec{0} \tag{III.9}$$

où $\chi_e$ est la susceptibilité électrique du milieu considéré. En injectant respectivement Eqs. III.8 et III.9 dans Eqs. III.6 et III.7, les relations constitutives s'écrivent :

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r},t) \tag{III.10}$$

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon(\vec{r}) E(\vec{r},t) \tag{III.11}$$

où l'on a posé $\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon_0 \varepsilon_r(\vec{r}) = \varepsilon_0(1+\chi_e)$ la permittivité du milieu considéré . Si de plus le milieu considéré est **homogène**, alors la permittivité $\varepsilon(\vec{r})$ devient indépendante de la position $\vec{r}$.

### III.1.3 Équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel

Nous introduisons ici la transformée de Fourier qui nous permettra d'écrire les équations de Maxwell dans le domaine fréquentiel que nous utiliserons dans toute la suite du manuscrit. Pour définir la transformée de Fourier, nous choisissons d'utiliser la convention $e^{+i\omega t}$ qui sera valable dans toute la suite du manuscrit.

Une fonction arbitraire du temps $F(t)$ peut être exprimée comme une intégrale de Fourier :

$$F(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathscr{F}(\omega) e^{i\omega t} d\omega \tag{III.12}$$

où $\omega$ représente la fréquence et $\mathscr{F}(\omega)$ est la transformée de Fourier de la fonction $F(t)$ qui est donnée par :

$$\mathscr{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt \tag{III.13}$$

La transformée inverse de Fourier est donnée par Eq. III.12. La transformée de Fourier peut être appliquée à toutes les quantités représentant les champs $(\vec{E}, \vec{H}, \vec{D}, \vec{B})$ et les sources $(\vec{J}, \rho)$. Pour donner un exemple, la transformée de Fourier du champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ est donnée par :

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(\vec{r}, t) e^{-i\omega t} dt \tag{III.14}$$

avec

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega \tag{III.15}$$

En utilisant les transformées de Fourier de chacune des quantités de champs et de sources, l'équation Eq. III.4 (par exemple) peut s'écrire :

$$\begin{aligned}
&\overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{J}(\vec{r}, t) + \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} \\
\Leftrightarrow &\int_{-\infty}^{+\infty} \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \vec{\mathscr{H}}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t}\left(\vec{\mathscr{D}}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t}\right) d\omega \\
\Leftrightarrow &\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \vec{\mathscr{H}} - \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}, \omega) - i\omega \vec{\mathscr{D}}(\vec{r}, \omega)\right] e^{i\omega t} d\omega = \vec{0}
\end{aligned}$$

Ceci étant valable pour n'importe quelle fréquence $w$, on en déduit :

$$\overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \vec{\mathscr{H}} = \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}, \omega) + i\omega \vec{\mathscr{D}}(\vec{r}, \omega)$$

En suivant la même démarche pour les autres équations de Maxwell (voir Eqs. III.1 à III.4), l'équation de conservation de la charge (voir Eq. III.5) et les relations constitutives (voir Eqs. III.10 et III.11), on obtient les équations de Maxwell écrites dans le domaine

fréquentiel :

$$\operatorname{div}\vec{\mathscr{D}}(\vec{r},\omega) = \varrho(\vec{r},\omega) \tag{III.16}$$
$$\operatorname{div}\vec{\mathscr{B}}(\vec{r},\omega) = 0 \tag{III.17}$$
$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r},\omega) = -i\omega\vec{\mathscr{B}}(\vec{r},\omega) \tag{III.18}$$
$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r},\omega) = \vec{\mathscr{J}}(\vec{r},\omega) + i\omega\vec{\mathscr{D}}(\vec{r},\omega) \tag{III.19}$$
$$\operatorname{div}\vec{\mathscr{J}}(\vec{r},\omega) = -i\omega\varrho(\vec{r},\omega) \tag{III.20}$$
$$\vec{\mathscr{B}}(\vec{r},\omega) = \mu_0\vec{\mathscr{H}}(\vec{r},\omega) \tag{III.21}$$
$$\vec{\mathscr{D}}(\vec{r},\omega) = \varepsilon(\vec{r})\vec{\mathscr{E}}(\vec{r},\omega) \tag{III.22}$$

Dans la suite, nous serons amenés à considérer des milieux diélectriques (en plus des hypothèses déjà mentionnées). Sous cette hypothèse, il n'y a ni de charge $\varrho$ ni de courant libre $\vec{\mathscr{J}}$. Ainsi, les équations de Maxwell s'écrivent :

$$\operatorname{div}\vec{\mathscr{D}}(\vec{r},\omega) = 0 \tag{III.23}$$
$$\operatorname{div}\vec{\mathscr{B}}(\vec{r},\omega) = 0 \tag{III.24}$$
$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r},\omega) = -i\omega\vec{\mathscr{B}}(\vec{r},\omega) \tag{III.25}$$
$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r},\omega) = i\omega\vec{\mathscr{D}}(\vec{r},\omega) \tag{III.26}$$

où les champs $\vec{\mathscr{B}}$ et $\vec{\mathscr{D}}$ sont donnés par les relations constitutives (voir Eqs. III.21 et III.22).

## III.2 Équation d'onde du problème de diffusion

L'objet de cette section est d'établir une équation d'onde du problème de diffusion d'une onde par une particule présentée dans Sec. I.2. Avant de l'établir, nous donnons les équations de Maxwell qui régissent le problème de diffusion.

**Équations de Maxwell décrivant le problème de diffusion.** Considérons une particule diélectrique contenue dans un milieu infini. D'un point de vue mathématique, cela revient à diviser l'espace en deux régions distinctes [Mishchenko et al., 2002] :

1. la région délimitée par la particule considérée comme un milieu fini diélectrique, linéaire, instantané, isotrope, non magnétique. Cette région de domaine $\mathcal{V}_p$ (le volume de la particule) possède une permittivité diélectrique complexe $\varepsilon_p(\vec{r})$ .
2. la région extérieure infinie considérée comme un milieu infini diélectrique, linéaire, instantané, isotrope, non magnétique, homogène et non absorbant. Cette région de domaine $\mathcal{V} \setminus \mathcal{V}_p$ possède une permittivité diélectrique complexe $\varepsilon_e$.

Dans chacune des deux régions considérées, les équations de Maxwell Eqs. III.25 et III.26 s'écrivent :

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) \qquad \forall\vec{r}\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{V}_p \tag{III.27}$$

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) = i\omega\varepsilon_e\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \qquad \forall\vec{r}\in\mathcal{V}\setminus\mathcal{V}_p \tag{III.28}$$

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) \qquad \forall\vec{r}\in\mathcal{V}_p \tag{III.29}$$

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) = i\omega\varepsilon_p(\vec{r})\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \qquad \forall\vec{r}\in\mathcal{V}_p \tag{III.30}$$

Il est possible de réécrire ce jeu de quatre équations en un jeu de deux équations valables pour toutes positions $\vec{r}$ du domaine $\mathcal{V}$ sous la forme :

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) \quad \forall\vec{r}\in\mathcal{V} \tag{III.31}$$

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) = i\omega\varepsilon(\vec{r})\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) - i\omega\varepsilon_e\left(1-\frac{\varepsilon(\vec{r})}{\varepsilon_e}\right)\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \qquad \forall\vec{r}\in\mathcal{V} \tag{III.32}$$

où l'on a défini la permittivité diélectrique complexe $\varepsilon$ du milieu infini par :

$$\varepsilon(\vec{r}) = \begin{cases} \varepsilon_p(\vec{r}) & \forall\vec{r}\in\mathcal{V}_p \\ \varepsilon_e & \forall\vec{r}\notin\mathcal{V}_p \end{cases} \tag{III.33}$$

Dans la suite, nous noterons

$$\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) = -i\omega\varepsilon_e\left(1-\frac{\varepsilon(\vec{r})}{\varepsilon_e}\right)\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -i\omega\varepsilon_e(1-m_r^2(\vec{r}))\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \tag{III.34}$$

où $m_r$ est l'indice de réfraction complexe relatif (voir Sec. I.2.3) vérifiant :

$$m_r^2(\vec{r}) = \frac{\varepsilon(\vec{r})}{\varepsilon_e} = \begin{cases} \frac{\varepsilon_p(\vec{r})}{\varepsilon_e} & \forall\vec{r}\in\mathcal{V}_p \\ 1 & \forall\vec{r}\notin\mathcal{V}_p \end{cases} \tag{III.35}$$

En injectant Eq. III.34 dans Eq. III.32, il vient :

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) = \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) + i\omega\varepsilon_e\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \qquad \forall\vec{r}\in\mathcal{V} \tag{III.36}$$

La quantité $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r})$, homogène à des $Am^{-2}$, s'apparente à une densité de courant. Elle représente en quelque sorte une source qui est présente dans le milieu infini $\mathcal{V}$.

Résumons ce qui vient d'être fait. Nous sommes partis des équations de Maxwell écrites d'une part dans la particule et d'autre part dans la région extérieure. Ensuite, nous avons réécrit ce système d'équations afin d'avoir une nouvelle vision complètement équivalente du problème initial. Désormais, il ne reste qu'une seule région de domaine $\mathcal{V}$ qui est un milieu infini considéré linéaire, instantané, isotrope, homogène et non magnétique

possédant une source représentée par la quantité $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r})$. Cette source étant délimitée par le volume de la particule (qui n'est donc plus vu comme une région de l'espace). Ainsi, tout se passe comme si on avait remplacé la particule de volume $\mathcal{V}_p$ par une région contenant la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}$. Ce principe est connu dans la littérature sous le nom de principe d'équivalence en volume [Jin, 2015; Balanis, 1989; Hanson and Yakovlev, 2002]. Il est illustré dans Fig. III.1.

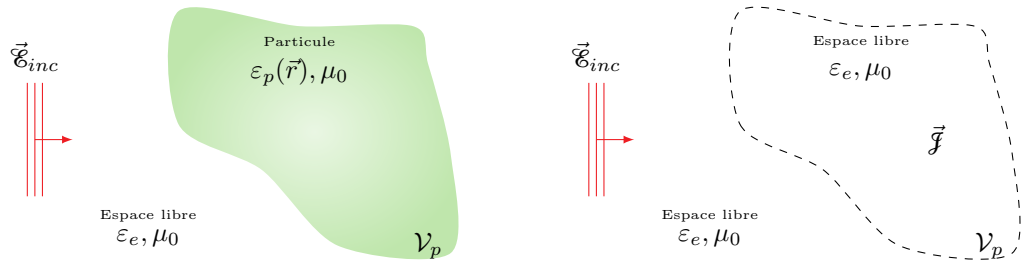



FIGURE III.1 – Illustration du principe d'équivalence en volume utilisé en électromagnétisme.

L'application de ce principe nous permet alors de réécrire les équations de Maxwell et les relations constitutives comme si nous étions partis des équations de Maxwell exprimées pour un milieu linéaire, instantané, isotrope, homogène et non magnétique possédant une source $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r})$ connue. Plus précisément, les équations de Maxwell, l'équation de conservation de la charge et les relations constitutives régissant notre problème s'écrivent :

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{D}}(\vec{r}) = \varrho(\vec{r}) \tag{III.37}$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}) = 0 \tag{III.38}$$

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\, \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = -i\omega \vec{\mathcal{B}}(\vec{r}) \tag{III.39}$$

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}}\, \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}) = \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}) + i\omega \vec{\mathcal{D}}(\vec{r}) \tag{III.40}$$

$$\operatorname{div} \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}) = -i\omega \varrho(\vec{r}) \tag{III.41}$$

$$\vec{\mathcal{B}}(\vec{r}) = \mu_0 \vec{\mathcal{H}}(\vec{r}) \tag{III.42}$$

$$\vec{\mathcal{D}}(\vec{r}) = \varepsilon_e \vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) \tag{III.43}$$

avec la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}$ donnée par Eq. III.34. On peut vérifier qu'en injectant respectivement Eqs. III.42 et III.43 dans Eqs. III.39 et III.40, on retrouve bien les équations Eqs. III.31 et III.36.

**Équation d'onde.** Les équations de Maxwell associées à notre problème de diffusion onde-particule venant d'être établies, nous allons maintenant établir l'équation d'onde

vérifiée par le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}$. Pour ce faire, on prend le rotationnel de Eq. III.31, puis on injecte Eq. III.36 :

$$\begin{aligned} & \overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0 \overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) \\ \Leftrightarrow \quad & \overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) - k_e^2\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) \end{aligned} \tag{III.44}$$

où l'on a posé le nombre d'onde $k_e = \omega\sqrt{\mu_0\varepsilon_e}$. En utilisant $\overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}} = -\vec{\nabla}^2\vec{\mathscr{E}} + \overrightarrow{\text{grad}}\,\text{div}\,\vec{\mathscr{E}}$, il vient :

$$\vec{\nabla}^2\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) + k_e^2\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = i\omega\mu_0\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) + \overrightarrow{\text{grad}}\,\text{div}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \tag{III.45}$$

En utilisant l'équation $\text{div}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = \frac{\varrho(\vec{r})}{\varepsilon_e}$ (obtenue en injectant Eq. III.43 dans Eq. III.37), puis en injectant l'équation de conservation de la charge (Eq. III.41), il vient :

$$\text{div}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = -\frac{1}{i\omega\varepsilon_e}\text{div}\,\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) = \frac{i\omega\mu_0}{k_e^2}\text{div}\,\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) \tag{III.46}$$

En injectant Eq. III.46 dans Eq. III.45, puis en utilisant Eq. III.34, l'équation vérifiée par le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}$ s'écrit :

$$\vec{\nabla}^2\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) + k_e^2\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = i\omega\mu_0\left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}\,\text{div}}{k_e^2}\right]\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}\,\text{div}}{k_e^2}\right]\left(k_e^2(1-m_r^2(\vec{r}))\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})\right) \tag{III.47}$$

où $\bar{\bar{I}}$ désigne la matrice identité. À partir de cette équation différentielle, nous allons dans la section suivante déterminer l'équation différentielle vérifiée par le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ avant d'en écrire une solution sous forme intégrale.

## III.3 Formulation intégrale du champ diffusé

### III.3.1 Équation différentielle vérifiée par le champ diffusé

Les solutions de l'équation différentielle linéaire non homogène Eq. III.47 peuvent être divisées en deux parties : une première correspondant à une solution de l'équation homogène et une seconde correspondant à une solution particulière de l'équation non homogène. Considérons alors que le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})$ est la superposition du champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r})$ et du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ :

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) + \vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) \tag{III.48}$$

Le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r})$ est solution de l'équation homogène (équation d'Helmholtz) :

$$\vec{\nabla}^2\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) + k_e^2\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) = \vec{0} \tag{III.49}$$

Autrement dit, c'est le champ obtenu en l'absence de la particule. Le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ est solution particulière de :

$$\vec{\nabla}^2\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) + k_e^2\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}\,\text{div}}{k_e^2}\right]\left(k_e^2(1-m_r^2(\vec{r}))\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})\right) \tag{III.50}$$

On postule également que le champ diffusé satisfait la condition de rayonnement à l'infini couramment appelée condition de Silver-Müller [Mishchenko, 2014] :

$$\lim_{r\to+\infty} r\left[\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) \wedge \vec{e}_r + ik_e\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})\right] = \vec{0} \tag{III.51}$$

avec $\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$ et $r = \|\vec{r}\|$.

En vue de résoudre Eq. III.50 et de déterminer une formulation intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$, nous introduisons, dans la section suivante, la fonction de Green scalaire.

### III.3.2 Fonction de Green scalaire

La fonction de Green scalaire $g(\vec{r},\vec{r}_0)$ est solution de l'équation de Helmholtz scalaire pour une source ponctuelle située en $\vec{r}_0$ :

$$\vec{\nabla}^2 g(\vec{r},\vec{r}_0) + k_e^2 g(\vec{r},\vec{r}_0) = -\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \tag{III.52}$$

où $\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$ correspond à la distribution de Dirac centrée en un point source $\vec{r}_0$. La fonction $g$ vérifie également la condition à l'infini suivante :

$$\lim_{\|\vec{r}-\vec{r}_0\|\to+\infty} g(\vec{r},\vec{r}_0) = 0 \tag{III.53}$$

Dans la suite, nous posons $\vec{\rho} = \vec{r}-\vec{r}_0$, $\rho = \|\vec{r}-\vec{r}_0\|$. En effectuant ce changement de variable, le point source se situe en la nouvelle origine du système de coordonnées sphériques prise en $\vec{r}_0$. De ce fait et compte tenu de l'isotropie de la source, $g$ doit être à symétrie sphérique. Ceci se traduit pas une indépendance des variables $\theta$ et $\varphi$ du système de coordonnée sphérique. On montre, en Annexe J.1, que la résolution de Eq. III.52 conduit à écrire la fonction de Green sous la forme suivante [Chew, 1990; Hanson and Yakovlev, 2002] :

$$g(\vec{r},\vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}}{4\pi\|\vec{r}-\vec{r}_0\|} = \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} \tag{III.54}$$

L'avantage de connaître une solution de Eq. III.52 est que nous allons pouvoir construire la solution de l'équation différentielle du champ diffusé donnée par Eq. III.50. C'est l'objet de la section suivante.

### III.3.3 Formulation intégrale du champ électrique diffusé pour une position d'observation extérieure à la particule

La fonction de Green venant d'être précisée, poursuivons la résolution de Eq. III.50 en vue d'obtenir une formulation intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$. L'équation Eq. III.52 étant linéaire, le principe de superposition permet de déterminer une solution pour un terme source plus général. Notons $\vec{\mathscr{K}}(\vec{r})$ ce terme source qui correspond à la superposition de l'ensemble des points sources contenus dans le volume de la particule :

$$\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \tag{III.55}$$

où le terme $\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)$ est donné par :

$$\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}}{k_e^2}\right]\left(k_e^2(1-m_r^2(\vec{r}_0))\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)\right) \tag{III.56}$$

En multipliant Eq. III.52 par le terme $\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)$, puis en intégrant sur le volume de la particule $\mathcal{V}_p$, il vient

$$\iiint_{\mathcal{V}_p}\left[\vec{\nabla}^2+k_e^2\right]g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 = -\iiint_{\mathcal{V}_p}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 = -\vec{\mathscr{K}}(\vec{r})$$

ce qui peut s'écrire sous la forme suivante

$$\left[\vec{\nabla}^2+k_e^2\right]\iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 = -k_e^2\left[\bar{\bar{I}}+\frac{\overrightarrow{\text{grad}}\,\text{div}}{k_e^2}\right]\left((1-m_r^2(\vec{r}))\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})\right) \tag{III.57}$$

Par comparaison entre Eqs. III.57 et III.50, on en déduit l'expression du champ électrique diffusé :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) &= -\iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathscr{K}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\ &= -\iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\left[\bar{\bar{I}}+\frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0}}{k_e^2}\right]\left(k_e^2(1-m_r^2(\vec{r}_0))\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)\right)d\vec{r}_0 \\ &= -i\omega\mu_0\iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\left[\bar{\bar{I}}+\frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0}}{k_e^2}\right]\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0\end{aligned} \tag{III.58}$$

où l'on rappelle que $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r})$ est donnée par Eq. III.34 et la fonction de Green $g(\vec{r},\vec{r}_0)$ par Eq. III.54. La quantité $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)$ est discontinue à l'interface des deux milieux (il y a un saut d'indice de réfraction). Cette discontinuité entraîne une difficulté pour évaluer les dérivées de $\vec{\mathscr{J}}$. Pour la contourner, on montre dans Encart 1 que le champ électrique diffusé (Eq. III.58) peut également se mettre sous la forme suivante :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0\left[\bar{\bar{I}}+\frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\text{div}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right]\iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \tag{III.59}$$

**Encart 1: Expression du champ diffusé - Démonstration de Eq. III.59**

Pour démontrer Eq. III.59, nous allons établir que

$$\mathcal{U}(\vec{r}) = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\text{div}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 = \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \tag{III.60}$$

Avant de commencer le calcul, précisons deux relations que nous utiliserons à plusieurs reprises. La première est donnée par :

$$\text{div}\left[g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right] = \overrightarrow{\text{grad}}\, g(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) + g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}\,\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \tag{III.61}$$

La seconde fait intervenir la fonction de Green qui vérifie :

$$\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\, g(\vec{r},\vec{r}_0) = -\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\, g(\vec{r},\vec{r}_0) \tag{III.62}$$

Nous utiliserons également le théorème de Green Ostrogradsky

$$\iiint_{\mathcal{V}_p} \text{div}\,\vec{\Phi}(\vec{r})d\vec{r} = \oiint_{\partial\mathcal{V}_p} \vec{\Phi}(\vec{s})\cdot\vec{n}(\vec{s})d\vec{s} \tag{III.63}$$

et le théorème du gradient :

$$\iiint_{\mathcal{V}_p} \overrightarrow{\text{grad}}\,\psi(\vec{r})d\vec{r} = \iint_{\partial\mathcal{V}_p} \psi(\vec{s})\vec{n}(\vec{s})d\vec{s} \tag{III.64}$$

Toutes les expressions utiles au calcul venant d'être spécifiées, nous pouvons nous concentrer sur le calcul de l'intégrale $\mathcal{U}$ :

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\vec{r}) &= \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\text{div}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&= \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} \text{div}_{\vec{r}}\left[g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.61)}}{=} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\, g(\vec{r},\vec{r}_0)\right]\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.62)}}{=} -\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\, g(\vec{r},\vec{r}_0)\right]\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.61)}}{=} -\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} \text{div}_{\vec{r}_0}\left[g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_0 + \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0
\end{aligned}$$

D'après le théorème de Green Ostrogradsky (voir Eq. III.63), puis le fait que la source $\vec{\mathcal{J}}$ est contenue au sein du volume $\mathcal{V}_p$, le premier terme de la précédente équation est

nul sur la surface fermée $\partial\mathcal{V}_p$ orientée suivant le vecteur normal unitaire $\vec{n}$ :

$$-\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} \text{div}_{\vec{r}_0} \left[ g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0) \right] d\vec{r}_0 = -\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \oiint_{\partial\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{s}_0)\vec{\mathcal{F}}(\vec{s}_0)\cdot\vec{n}(\vec{s}_0)d\vec{s}_0 = \vec{0}$$

Ainsi, en utilisant ce qui précède, $\mathcal{U}(\vec{r})$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\vec{r}) &= \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_p} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \left[ g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0) \right] d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.61)}}{=} \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[ \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\, g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0) + g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0) \right] d\vec{r}_0 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_p} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\, g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.62)}}{=} -\iiint_{\mathcal{V}_p} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\, g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.61)}}{=} -\iiint_{\mathcal{V}_p} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \left[ g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0) \right] - g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 - \iiint_{\mathcal{V}_p} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \left[ g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0) \right] d\vec{r}_0 \\
&\overset{\text{(III.64)}}{=} \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 - \oiint_{\partial\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{s}_0) \left[ \text{div}_{\vec{s}_0}\vec{\mathcal{F}} \right] \cdot \vec{n}(\vec{s}_0)(\vec{s}_0)d\vec{s}_1 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0
\end{aligned}$$

Finalement, d'après tout ce qui précède, nous obtenons le résultat annoncé initialement par Eq. III.60 :

$$\mathcal{U}(\vec{r}) = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}} \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 = \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r},\vec{r}_0)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0$$

En injectant la précédente équation dans Eq. III.58, on en déduit Eq. III.59.

Par comparaison avec la formulation Eq. III.58, l'équation Eq. III.59 présente l'avantage de ne plus avoir besoin à déterminer les dérivées de la densité de courant $\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_0)$. Cependant, en vue d'utiliser la méthode de Monte Carlo, il convient de faire rentrer l'opérateur $\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}}{k_e^2}$ sous le signe intégrale. Cette opération n'est possible que lorsque la position d'observation $\vec{r}$ est en dehors du volume de la particule $\mathcal{V}_p$. Dans le cas contraire, c'est-à-dire lorsque $\vec{r} \in \mathcal{V}_p$, l'intégrale Eq. III.59 nécessite de traiter la singularité qui apparaît lorsque $\vec{r}_0$ est très proche de $\vec{r}$. Nous reviendrons un peu plus tard sur cette singularité. Pour le moment, la question de la singularité ne se pose pas puisque l'on cherche ici à obtenir une expression du champ diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r})$ en une position $\vec{r}$ située à l'extérieur

de la particule. Par conséquent, il est tout à fait possible de passer l'opérateur $\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\text{div}_{\vec{r}}}{k_e^2}$ agissant sur $\vec{r}$ sous le signe intégral qui lui agit sur $\vec{r}_0$ :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = -i\omega\mu_0 \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] \left(g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right) d\vec{r}_0 \tag{III.65}$$

Le terme $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}\left(g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right)$ est calculé en utilisant les identités vectorielles :

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}\left(g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right) &= \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\left[g(\vec{r},\vec{r}_0)\text{div}_{\vec{r}}\,\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) + \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right] \\
&= \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\left[\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right] \\
&= \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\wedge\left(\overrightarrow{\text{rot}}_{\vec{r}}\;\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\right) + \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\wedge\left(\overrightarrow{\text{rot}}_{\vec{r}}\;\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right) \\
&\quad + \left(\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\right)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) + \left(\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\cdot\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\right)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0) \\
&= \left(\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\cdot\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\right)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)
\end{aligned}$$

En introduisant la notation du produit dyadique, notée $\otimes$, l'expression précédente peut s'écrire (voir Encart 2) :

$$\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}\left[g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right] = \left(\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\right)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \tag{III.66}$$

**Encart 2: Notation dyadique**

Soit $\vec{a},\vec{b}$ et $\vec{c}$ trois vecteurs. Notons $\bar{\bar{F}} = \vec{a}\otimes\vec{b}$ le produit dyadique de $\vec{a}$ et $\vec{b}$. On a les relations suivantes [Mishchenko et al., 2002; Tai, 1994] :

$$\begin{aligned}
(\vec{c}\cdot\vec{a})\vec{b} = \vec{c}\cdot(\vec{a}\otimes\vec{b}) = \vec{c}\cdot\bar{\bar{F}} \\
\vec{a}(\vec{b}\cdot\vec{c}) = (\vec{a}\otimes\vec{b})\cdot\vec{c} = \bar{\bar{F}}\cdot\vec{c}
\end{aligned}$$

Si de plus, $\bar{\bar{F}}$ est symétrique alors ${}^t\bar{\bar{F}} = \bar{\bar{F}}$ et on a pour tout vecteur $\vec{c}$ : $\bar{\bar{F}}\cdot\vec{c} = \vec{c}\cdot\bar{\bar{F}}$.

Appliquons ces relations à notre cas d'étude en posant : $\vec{a} = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}$, $\vec{b} = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g$ et $\vec{c} = \vec{\mathcal{J}}$. Il est possible de vérifier que la quantité $\bar{\bar{F}} = \vec{a}\otimes\vec{b} = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g$ est symétrique. Ainsi,

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}\left[g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right] &= \left(\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\cdot\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\right)\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0) \\
&= \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\cdot\left(\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\right) \\
&= \left(\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,g(\vec{r},\vec{r}_0)\right)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)
\end{aligned}$$

En utilisant III.66, on obtient la relation :

$$\begin{aligned}\left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\,\text{div}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] g(\vec{r},\vec{r}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) &= \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] g(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \\ &= \bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\end{aligned} \tag{III.67}$$

où l'on a introduit la dyade de Green $\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)$ définie par :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0) &= \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] g(\vec{r},\vec{r}_0) \\ &= g(\vec{r},\vec{r}_0)\left[1 - \frac{i}{k_e\rho} - \frac{1}{k_e^2\rho^2}\right]\bar{\bar{I}} + g(\vec{r},\vec{r}_0)\left[-1 + 3\left(\frac{i}{k_e\rho} + \frac{1}{k_e^2\rho^2}\right)\right]\vec{e}_\rho\otimes\vec{e}_\rho\end{aligned} \tag{III.68}$$

avec $\vec{e}_\rho = \frac{\vec{r}-\vec{r}_0}{\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}$. En injectant Eq. III.67 dans Eq. III.65, puis en utilisant l'expression de la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}$ (voir Eq. III.34), le champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r})$ s'écrit :

$$\forall \vec{r}\notin\mathcal{V}_p \qquad \vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \tag{III.69}$$

Nous venons d'obtenir une expression intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r})$ lorsque la position d'observation $\vec{r}$ se situe à l'extérieur de la particule. Dans le cadre de notre étude, la position $\vec{r}$ est située suffisamment loin de la particule de sorte que l'approximation du champ lointain est valide (voir Sec. I.2.2). Dans ce cas, on montre en Annexe J.2 que la dyade de Green se simplifie. On note l'expression obtenue $\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ ($FF$ pour *Far Field* en anglais) :

$$\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right] g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) \tag{III.70}$$

On a également introduit la fonction de Green en champ lointain $g^{FF}(\vec{r},r_0)$ donnée par :

$$g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \tag{III.71}$$

où $r$ est la distance entre la position d'observation $\vec{r}$ et le centre de la particule (voir Fig. I.4 dans Sec. I.2.2). En injectant Eq. III.70 dans Eq. III.69, l'expression du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r})$ pour une position d'observation $\vec{r}$ située loin de la particule s'écrit :

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r}) &= \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\ &= \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r}\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]\cdot\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0\end{aligned} \tag{III.72}$$

À partir de cette expression, nous allons établir les formulations intégrales pour trois modèles qui sont bien connus dans la littérature électromagnétique. Parmi eux, nous aborderons dans Sec. III.4 l'approximation de Born qui permet de traiter les petites particules ténues. Dans Sec. III.5, nous établirons l'équation intégrale de Fredholm qui est à la base du développement en série de Born en vue de résoudre de manière rigoureuse les équations de Maxwell. Toutefois l'utilisation de cette série nous restreint à traiter également des petites particules avec des faibles contrastes d'indice [Kleinman et al., 1990]. Nous établirons alors, dans Sec. III.6, les formulations intégrales dans le cadre de l'approximation de Schiff qui nous permet de traiter des particules ténues avec de grands paramètres de taille. Nous disposerons ainsi de tous les éléments pour obtenir les propriétés radiatives de particules ténues sur l'ensemble de la gamme de paramètre de taille.

## III.4 Établissement des formulations intégrales dans le cadre de l'approximation de Born

L'objectif de cette section est d'établir les formulations intégrales du champ diffusé, de l'amplitude de diffusion et des propriétés radiatives dans le cadre de l'approximation de Born (voir Sec. II.1.3.2) qui seront résolues au chapitre V par la méthode de Monte Carlo. Plus précisément, dans un premier temps, nous établirons la formulation intégrale du champ diffusé en une position $\vec{r}$ située loin de la particule afin d'écrire celle de la matrice amplitude de diffusion. Cette dernière nous permettra alors d'obtenir les expressions des propriétés radiatives.

### III.4.1 Formulation intégrale du champ diffusé

Nous avons vu dans Sec. II.1.3.2 que l'approximation de Born est valable pour des particules possédant des petits paramètres de taille et des faibles contrastes d'indice avec leur milieu environnant. Sous ces conditions, le champ interne $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)$ de la particule est approximé par le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$. Ainsi, l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ en une position d'observation $\vec{r}$ située loin de la particule (hypothèse de champ lointain, voir Sec. I.2.2) s'obtient en remplaçant dans Eq. III.72 le champ interne $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)$ par le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$ :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{III.73}$$

L'équation Eq. III.73 donnant le champ total $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})$ à la position d'observation $\vec{r}$ s'interprète comme la superposition de l'ensemble des ondes ayant subit une diffusion produite

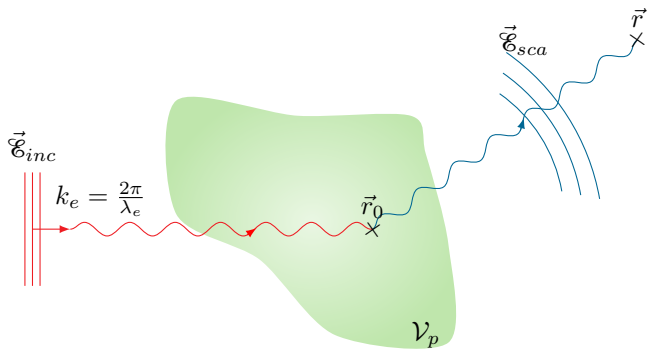



FIGURE III.2 – Schématisation de l'approximation de Born : le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ en une position d'observation $\vec{r} \notin \mathcal{V}_p$ correspond à la somme des ondes diffusées suite à une seule interaction en une position $\vec{r}_0$ avec la particule de volume $\mathcal{V}_p$. $\vec{r}$ étant la position depuis laquelle on observe le phénomène de diffusion.

par des sources dîtes secondaires induites au sein du volume $\mathcal{V}_p$ de la particule par l'onde incidente comme schématisé Fig. III.2 [Cohen-Tannoudji et al., 1977]. L'amplitude de chacune de ces sources secondaires sont proportionnelles à l'onde incidente $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$ et au contraste d'indice $m_r^2(\vec{r}_0) - 1$ évalués à la position $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$ .

### III.4.2 Formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion

En vue de calculer les propriétés radiatives, nous allons établir l'expression de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ (voir Sec. I.2.4.1) qui relie les composantes normales à la direction d'observation du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ et celles du champ incident. Elle est définie par Eq. I.14, que nous rappelons ci-dessous :

$$\begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{sca}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{sca}(\vec{r}) \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_s} = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \bar{\bar{S}} \begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc} \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc} \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_i} = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc} \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc} \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_i} \tag{III.74}$$

$\mathcal{B}_s = [\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s}]$ désigne la base sphérique liée à la position d'observation $\vec{r}$ dans laquelle on exprime le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ (voir Fig. III.3). $\mathcal{B}_i = [\vec{e}_i, \vec{e}_{\theta_i}, \vec{e}_{\varphi_i}]$ désigne la base sphérique liée à la direction d'incidence $\vec{e}_i$ (voir Fig. III.3). Compte tenu de la définition de la matrice $\bar{\bar{S}}$, cette dernière inclue un changement de base. En effet, le champ diffusé est exprimé dans la base $\mathcal{B}_s$ tandis que le champ incident est exprimé dans la base $\mathcal{B}_i$.

Afin d'établir la formulation intégrale de $\bar{\bar{S}}$, revenons à l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ donnée par Eq. III.73. Au regard de la définition de $\bar{\bar{S}}$ (voir Eq. III.74), ce champ doit être exprimé dans la base $\mathcal{B}_s$. Par conséquent, l'intégrande doit être exprimée dans cette base. Autrement dit, la dyade de Green et le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ doivent être exprimés

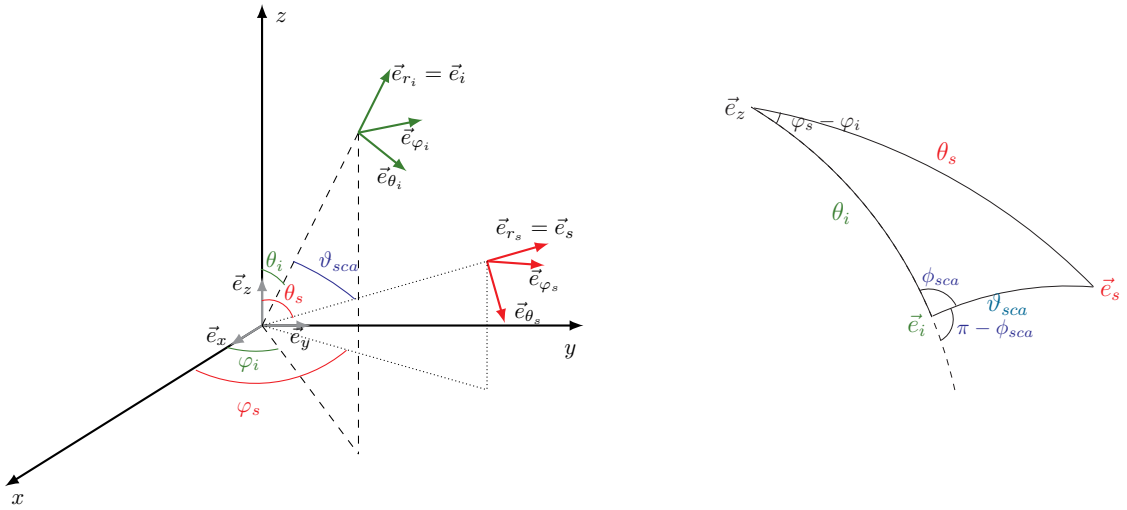



FIGURE III.3 – Représentation des bases $\mathcal{B}_i = (\vec{e}_i, \vec{e}_{\theta_i}, \vec{e}_{\varphi_i})$ et $\mathcal{B}_s = (\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s})$. La quantité $\vartheta_{sca}$ est l'angle de diffusion et représente l'angle entre $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$. L'angle $\phi_{sca}$ est l'angle formé par le plan de diffusion et le plan formé par les vecteurs $\vec{e}_z$ et $\vec{e}_i$. La figure à droite schématise un triangle sphérique présentant les angles qui existent entre la direction incidente $\vec{e}_i$, la direction d'observation $\vec{e}_s$ et l'axe $\vec{e}_z$ ainsi que les angles entre les différents plans formés à partir de ces trois vecteurs unitaires.

dans la base $\mathcal{B}_s$. Dans cette base, la dyade de Green $\bar{\bar{G}}^{FF}_{\mathcal{B}_s}(\vec{r}, \vec{r}_0)$ est connue et est diagonale (voir Eq. III.70 avec $\vec{e}_s = (1, 0, 0)$ dans $\mathcal{B}_s$) :

$$\bar{\bar{G}}^{FF}_{\mathcal{B}_s}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) & 0 \\ 0 & 0 & g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) \end{bmatrix} \tag{III.75}$$

où $g^{FF}$ est la fonction de Green en champ lointain donnée par Eq. III.71. C'est la raison pour laquelle il est intéressant d'exprimer le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ dans la base $\mathcal{B}_s$ puisque le nombre de composantes non nulles de ce champ est réduit à deux (le champ est orthogonal à la direction d'observation $\vec{e}_s$). Par contre, il est nécessaire d'exprimer le champ incident dans la base $\mathcal{B}_s$. Or, ce qui nous intéresse (toujours au regard de la définition de $\bar{\bar{S}}$, voir Eq. III.74), c'est de faire apparaître le champ incident dans la base $\mathcal{B}_i$ ; cela nous permettra de réduire à deux le nombre de composantes du champ incident puisqu'il est orthogonal à la direction d'incidence $\vec{e}_i$. En introduisant la matrice de passage $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}$ (voir Annexe K) permettant de passer de la base $\mathcal{B}_s$ à la base $\mathcal{B}_i$, l'expression du champ incident dans la base $\mathcal{B}_s$ s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{inc}(\vec{r}_0) = P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{inc}(\vec{r}_0) = e^{-ik_e \vec{e}_i \cdot \vec{r}_0} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{III.76}$$

où $\vec{e}_i$ est la direction de propagation de l'onde incidente, et $\mathscr{E}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}$ est l'amplitude constante du champ incident.

En injectant Eqs. III.75 et III.76 dans l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ (voir Eq. III.73), il vient :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) e^{-ik_e \vec{e}_i\cdot\vec{r}_0} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} d\vec{r}_0 \tag{III.77}$$

En sortant les termes qui ne dépendent pas de la position $\vec{r}_0$, puis en injectant l'expression de la fonction de Green $g^{FF}$ en champ lointain (voir Eq. III.71), l'équation précédente s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r}\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1) e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0\right]\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{III.78}$$

Sous une forme plus compacte, on écrit :

$$\begin{aligned} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) &= \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \bar{\bar{\mathcal{S}}} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \\ \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ \mathscr{E}^{\theta}_{sca}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{sca}(\vec{r}) \end{bmatrix} &= \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc}(\vec{r}) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{III.79}$$

où l'on a introduit la matrice $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ :

$$\bar{\bar{\mathcal{S}}} = -\frac{ik_e^2}{4\pi}\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1) e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0\right]\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \tag{III.80}$$

Les éléments $s_{pq}$ de cette matrice sont non nuls hormis ceux de la première ligne car les éléments de la première ligne de la matrice $\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}$ sont nuls (voir Annexe K). De plus, les éléments non nuls de la matrice $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ sont directement proportionnels aux éléments de la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}$. Plus précisément, $\forall p \in [\![2,3]\!]$ et $\forall q \in [\![2,3]\!]$, nous avons :

$$s_{pq} = \underbrace{-\frac{ik_e^2}{4\pi}\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1) e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0\right]}_{=C} p_{pq} = C p_{pq} \tag{III.81}$$

où les éléments $p_{pq}$ sont ceux de la matrice $\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] P^{\mathcal{B}_c}_{\mathcal{B}_s}$ où la matrice $P^{\mathcal{B}_c}_{\mathcal{B}_s}$ est donnée en Annexe K. En injectant Eq. III.81 dans Eq. III.82, il vient :

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \mathscr{E}^{\theta}_{sca}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{sca}(\vec{r}) \end{bmatrix} = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} C \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc}(\vec{r}) \end{bmatrix} \tag{III.82}$$

Au regard de Eq. III.82 et en utilisant la définition de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ (voir Eq. III.74), on en déduit l'expression de cette dernière :

$$\bar{\bar{S}} = C \begin{bmatrix} p_{22} & p_{23} \\ p_{32} & p_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \tag{III.83}$$

où les éléments de la matrice $\bar{\bar{S}}$ s'écrivent $S_{11} = Cp_{22}$, $S_{12} = Cp_{23}$, $S_{21} = Cp_{32}$ et $S_{22} = Cp_{33}$. En injectant l'expression de $C$ (définie dans Eq. III.81), on en déduit la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ :

$$\bar{\bar{S}} = -\frac{ik_e^2}{4\pi} \iiint_{\mathcal{V}_p} (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{III.84}$$

où la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$ correspond à la sous-matrice de $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}$ constituée des deuxièmes et troisièmes lignes et colonnes . Elle est donnée, après calcul, par

$$\begin{aligned} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} &= \begin{bmatrix} p_{22} & p_{23} \\ p_{32} & p_{33} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos\theta_s \cos\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + \sin\theta_s \sin\theta_i & \cos\theta_s \sin(\varphi_s - \varphi_i) \\ -\cos\theta_i \sin(\varphi_s - \varphi_i) & \cos(\varphi_s - \varphi_i) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{III.85}$$

où les quantités $p_{pq}, \forall (p,q) \in [\![2,3]\!]^2$ sont les éléments de la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$. Les vecteurs de direction incidente $\vec{e}_i$ et de direction d'observation $\vec{e}_s$ sont donnés par

$$\vec{e}_i = \sin\theta_i \cos\varphi_i \vec{e}_x + \sin\theta_i \sin\varphi_i \vec{e}_y + \cos\theta_i \vec{e}_z \tag{III.86}$$

$$\vec{e}_s = \sin\theta_s \cos\varphi_s \vec{e}_x + \sin\theta_s \sin\varphi_s \vec{e}_y + \cos\theta_s \vec{e}_z \tag{III.87}$$

La direction d'observation $\vec{e}_s$ peut s'écrire autrement à l'aide des angles $\theta_i$ et $\varphi_i$ définissant la direction incidente ainsi que l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ et l'angle $\phi_{sca}$. Plus précisément, dans la base $\mathcal{B}_i$, on a $\vec{e}_s = \cos\vartheta_{sca}\vec{e}_i - \sin\vartheta_{sca}\cos\phi_{sca}\vec{e}_{\theta_i} + \sin\vartheta_{sca}\sin\phi_{sca}\vec{e}_{\varphi_i}$, soit dans la base cartésienne $\mathcal{B}_c$ :

$$\vec{e}_s = \begin{pmatrix} \cos\vartheta_{sca}\sin\theta_i\cos\varphi_i - \sin\vartheta_{sca}\cos\phi_{sca}\cos\theta_i\cos\varphi_i - \sin\vartheta_{sca}\sin\phi_{sca}\sin\varphi_i \\ \cos\vartheta_{sca}\sin\theta_i\sin\varphi_i - \sin\vartheta_{sca}\cos\phi_{sca}\cos\theta_i\sin\varphi_i + \sin\vartheta_{sca}\sin\phi_{sca}\cos\varphi_i \\ \cos\vartheta_{sca}\cos\theta_i + \sin\vartheta_{sca}\sin\theta_i\cos\phi_{sca} \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_c} \tag{III.88}$$

L'intérêt d'exprimer $\vec{e}_s$ sous cette forme est que nous faisons apparaître clairement l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$.

Il convient de remarquer que nous avons écrit la matrice $\bar{\bar{S}}$ sous une forme plus générale que celle rencontrée dans le chapitre état de l'art. En effet, ici la matrice $\bar{\bar{S}}$ n'est pas diagonale car nous ne fixons pas la direction incidente $\vec{e}_i$ (en particulier $\vec{e}_i \neq \vec{e}_z$). Comme nous le verrons plus tard dans le manuscrit, ce choix est justifié pour des raisons pratiques dès lors que l'on souhaite tenir compte d'une distribution sur les orientations des particules. Plus précisément, nous verrons que pour définir l'orientation d'une particule, il est plus commode de fixer la particule et de faire notamment pivoter le vecteur $\vec{e}_i$ plutôt que de faire pivoter la particule. À noter toutefois que l'on retrouve la matrice de l'état de

l'art en prenant $\vec{e}_i = \vec{e}_z$. En effet, sous cette hypothèse nous avons $\theta_i = 0$, $\varphi_i$ quelconque (disons $\varphi_i = \varphi_s$) et par suite, $\theta_s = \vartheta_{sca}$. La matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$ s'écrit alors

$$P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} = \begin{bmatrix} \cos\vartheta_{sca} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{III.89}$$

On retrouve alors la matrice diagonale $\bar{\bar{S}}$ de l'état de l'art.

### III.4.3 Formulations intégrales des propriétés radiatives d'une particule isolée

Nous venons d'établir l'expression de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ (voir Eq. III.84) qui va directement nous servir pour établir les expressions des propriétés radiatives.

**Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$.** Pour une particule isolée, elle est donnée par Eq. I.23 que nous rappelons ci-dessous :

$$\hat{W}_{sca} = \frac{1}{2}\left(|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2\right) \tag{III.90}$$

où les éléments $S_{pq}$ sont ceux de la matrice $\bar{\bar{S}}$ (voir Eq. III.83). En utilisant Eqs. III.84 et III.85, la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ devient :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = \frac{k_e^4}{32\pi^2}\left|\iiint_{\mathcal{V}_p}(m_r^2(\vec{r}_0) - 1)e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}d\vec{r}_0\right|^2 P_{sc} \tag{III.91}$$

où $P_{sc}$ est donnée par (voir Annexe H.1)

$$P_{sc} = p_{22}^2 + p_{23}^2 + p_{32}^2 + p_{33}^2 = 1 + \cos^2\vartheta_{sca} \tag{III.92}$$

avec

$$\cos\vartheta_{sca} = \cos\theta_s\cos\theta_i + \sin\theta_s\sin\theta_i\cos(\varphi_s - \varphi_i) \tag{III.93}$$

**Section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$.** Elle est obtenue en prenant l'intégration angulaire sur $4\pi$ de la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (voir Eqs. I.25 et I.23) :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \iint_{4\pi}\hat{W}_{sca}d\vec{e}_s = \frac{1}{2}\iint_{4\pi}\left[|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2\right]d\vec{e}_s \tag{III.94}$$

où $d\vec{e}_s$ est l'angle solide autour de la direction d'observation $\vec{e}_s$ : $d\vec{e}_s = \sin\vartheta_{sca}d\vartheta_{sca}d\phi_{sca}$.

**Section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$.** On montre en Annexe H.2.2 que la section efficace d'absorption d'une particule isolée conduit à l'expression suivante :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \iiint_{\mathcal{V}_p} 2k_e n_r(\vec{r}_0)\kappa_r(\vec{r}_0) \left| \frac{\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)}{\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}} \right|^2 d\vec{r}_0 \tag{III.95}$$

où $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)$ désigne le champ interne à la particule. Dans le cadre de l'approximation de Born, ce champ interne correspond au champ incident $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) = \vec{\mathscr{E}}_{0,inc} e^{-ik_e \vec{e}_i \cdot \vec{r}_0}$. Ainsi, en utilisant ce qui précède et Eq. III.95, la section efficace d'absorption d'une particule isolée $\hat{\sigma}_{abs}$ est donnée par :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \iiint_{\mathcal{V}_p} 2k_e n_r(\vec{r}_0)\kappa_r(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{III.96}$$

qui se simplifie dès lors que la particule considérée est homogène, soit :

$$\hat{\sigma}_{abs} = 2k_e n_r \kappa_r V_p(r_{eq}) \tag{III.97}$$

où $V_p(r_{eq})$ est le volume de la particule qui dépend du rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume.

**Section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$.** Elle est obtenue en faisant la somme des sections efficaces d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ et de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$.

$$\hat{\sigma}_{ext} = \hat{\sigma}_{abs} + \hat{\sigma}_{sca} \tag{III.98}$$

## III.5 Établissement de l'équation intégrale de Fredholm à la base du développement en série de Born

Dans cette section, nous allons établir l'équation intégrale de Fredholm du champ diffusé qui est à la base du développement en série de Born qui sera résolue au chapitre VI par la méthode de Monte Carlo. Contrairement à la section précédente, le modèle abordé ici est tout à fait rigoureux : c'est la solution exacte des équations de Maxwell. Comme nous allons le voir dans la suite, l'établissement de la formulation intégrale du champ diffusé est délicate du fait de la présence d'une singularité dans l'intégrande qui doit être traitée avec précaution. Nous présenterons les formulations intégrales qui sont disponibles dans la littérature et qui gère parfaitement cette singularité. Toutefois, en pratique, ces formulations sont délicates à résoudre numériquement. Pour contourner cette difficulté, nous établirons une formulation intégrale du champ diffusé qui consiste à négliger une petite partie du volume de la particule autour de la singularité. C'est à partir

de cette formulation, que nous utiliserons au chapitre VI, que nous établirons celle de la matrice amplitude de diffusion qui nous servira à déterminer les formulations intégrales des propriétés radiatives.

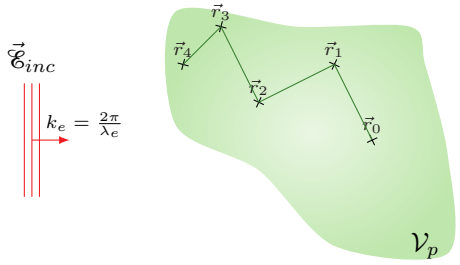



FIGURE III.4 – Représentation schématique du développement en série de Born traduisant les interactions multiples au sein de la particule de volume $\mathcal{V}_p$.

Dans la section précédente, nous avons discuté de l'approximation de Born qui suppose que le champ interne de la particule est égal au champ incident ; seule une interaction dans le volume de la particule est considérée. Cela avait permis de simplifier le modèle de diffusion onde-particule et par suite la formulation intégrale du champ diffusé. Nous supprimons ici cette hypothèse afin de tenir compte des interactions multiples au sein de la particule (voir Fig. III.4) et ainsi de travailler dans un cadre plus général. Dans ce cas, le champ interne $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)$ n'est plus approximé par le champ incident mais est vu comme la superposition du champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$ et du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$. Le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ en une position $\vec{r}$ située loin de particule est donné par Eq. III.72, que nous rappelons ci-dessous :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) &= \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \\ &= \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r}\left[\bar{\bar{I}}-\vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]\cdot\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}\underbrace{\left[\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)+\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)\right]}_{\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)}d\vec{r}_0\end{aligned} \tag{III.99}$$

Comme on peut le constater, cette expression fait intervenir le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ en une position $\vec{r}_0$ appartenant au volume de la particule $\mathcal{V}_p$. On est alors tenté de remplacer le champ $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ par l'expression du champ $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ donnée par Eq. III.99 (en remplaçant $\vec{r}$ par $\vec{r}_0$ et $\vec{r}_0$ par $\vec{r}_1$). Toutefois, ceci n'est pas possible car une singularité due à la fonction de Green apparaît dès lors que $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$. Ainsi, pour obtenir une expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ à la position $\vec{r}_0$, il est nécessaire de revenir à l'expression Eq. III.59,

que nous rappelons ci-dessous (en adaptant les indices) :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \left[ \bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \text{div}_{\vec{r}_0}}{k_e^2} \right] \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \tag{III.100}$$

Puisque $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$, il n'est pas possible de passer l'opérateur $\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \text{div}_{\vec{r}_0}}{k_e^2}$ sous le signe intégrale sous peine que ladite intégrale ne soit pas définie. En effet, l'intégrande de Eq. III.100 fait intervenir la fonction de Green $g(\vec{r}_0, \vec{r}_1)$ qui évolue en $\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|^{-1}$ lorsque $\vec{r}_1 \to \vec{r}_0$. En particulier, l'application de l'opérateur $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \text{div}_{\vec{r}_0}$ sur la fonction de Green fournit une contribution de l'intégrande en $\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|^{-3}$ qui n'est pas compensée par l'élément de volume qui est seulement en $\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|^2$. Par conséquent, il est nécessaire de recourir à un traitement particulier de l'intégrale en utilisant la notion de volume d'exclusion [Fikioris, 1965; Van Bladel, 1961, 2007; Lee et al., 1980; Yaghjian, 1980]. Ceci fait l'objet de la sous-section suivante en vue d'obtenir une formulation intégrale du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$.

### III.5.1 Formulations intégrales du champ électrique diffusé et gestion de la singularité

Afin de traiter la singularité, qui vient d'être mentionnée ci-dessus, nous proposons de suivre la démarche adoptée par Fikioris [Fikioris, 1965]. Pour ce faire, considérons un volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ sphérique de rayon $\delta$ centré à la position d'observation $\vec{r}_0$ comme représenté Fig. III.5. Ce volume, qui n'est pas nécessairement petit, doit être contenu dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ et inclure la singularité (ici $\vec{r}_0$). Le volume de la particule peut alors être divisé en deux sous volumes : le volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ et son complémentaire $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta$. En utilisant le découpage $\mathcal{V}_p = \mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta + \mathcal{V}_\delta$, l'équation du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ donnée par Eq. III.100 s'écrit :

$$\begin{aligned} \vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \Bigg[ & \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \\ & + \frac{1}{k_e^2} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \\ & + \frac{1}{k_e^2} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \Bigg] \end{aligned} \tag{III.101}$$

Afin de calculer les intégrales sur $\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$, on utilise le fait que $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) = \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) + \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)$ où la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)$ est indépendante de $\vec{r}_1$ et est considérée comme

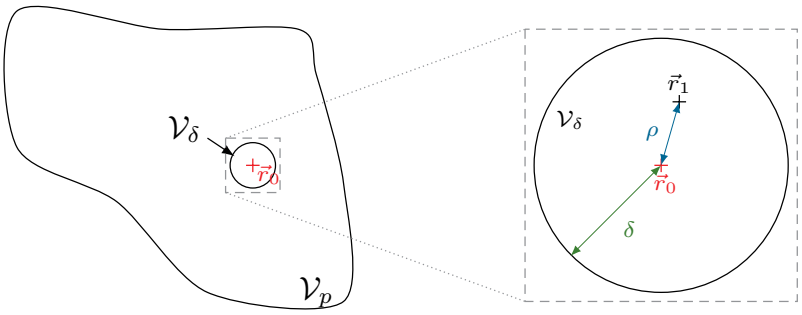



FIGURE III.5 – Volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ centré au point singulier $\vec{r}_0$ contenue dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule. La quantité $\rho = \|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|$ est la distance entre le centre du volume $\mathcal{V}_\delta$ et une position $\vec{r}_1$.

uniforme au sein du volume $\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0) \equiv \mathcal{V}_\delta$. Ceci permet d'écrire :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \Bigg[ &\iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 \\ &+ \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\left[\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 \\ &+ \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\left[\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_1 \\ &+ \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 \Bigg]\end{aligned} \tag{III.102}$$

Les deux premières intégrales excluant le volume $\mathcal{V}_\delta$ contenant la singularité sont bien définies et convergentes. L'opérateur $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}$ et le signe intégral peuvent alors être intervertis. Il en va de même pour la cinquième intégrale sous réserve que la condition de Hölder (voir Encart 3) soit vérifiée en $\vec{r}_0$ [Hölder, 1882; Kellogg, 1953; Müller, 1969]. Sous cette condition, l'intégrale $\iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)[\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)]d\vec{r}_1$, intervenant dans Eq. III.102, est deux fois dérivable. Cela permet de passer l'opérateur $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0}$ sous le signe intégrale. En utilisant la définition de la dyade de Green, Eq. III.102 devient :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \Bigg[ &\iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\left[\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_1 \\ &+ \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1}_{\vec{\mathcal{I}}_1} + \underbrace{\frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1}_{\vec{\mathcal{I}}_2} \Bigg]\end{aligned} \tag{III.103}$$

**Encart 3: Condition de Hölder**

Une fonction $\vec{\mathcal{J}}$ satisfait la condition de Hölder [Hölder, 1882; Kellogg, 1953; Müller, 1969] en $\vec{r}_0$ lorsque :

$$\exists(\alpha, M, \zeta) \in \mathbb{R}_+^3 \quad / \quad \|\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\| \leq M\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|^\alpha \quad \text{avec} \quad \|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\| \leq \zeta \quad \text{(III.104)}$$

On dit alors que $\vec{\mathcal{J}}$ est $\alpha$-höldérienne. Cette condition permet d'assurer l'existence des dérivées secondes dans les intégrales considérées.

Il ne reste plus qu'à calculer les intégrales $\vec{\mathcal{I}}_1$ et $\vec{\mathcal{I}}_2$ définies dans Eq. III.103. En notant $\rho = \|\vec{\rho}\| = \|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|$, l'intégrale $\vec{\mathcal{I}}_1$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathcal{I}}_1 = \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 &= \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|}}{4\pi\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|}\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 \\
&= \int_0^\delta \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho}\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\rho^2 \sin\theta d\rho d\theta d\phi \\
&= \int_0^\delta \rho e^{-ik_e\rho}\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\rho
\end{aligned}$$

soit en calculant la dernière intégrale :

$$\vec{\mathcal{I}}_1 = \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 = \frac{1}{k_e^2}\left[e^{-ik_e\delta}(1 + ik_e\delta) - 1\right]\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \qquad \text{(III.105)}$$

Concentrons nous désormais sur l'intégrale $\vec{\mathcal{I}}_2$ (voir Eq. III.103) . On rappelle qu'en plus de vérifier la condition de Hölder, la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)$ est uniforme au sein du volume $\mathcal{V}_\delta$. En notant $\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\| = \delta$, l'intégrale $\vec{\mathcal{I}}_2$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathcal{I}}_2 &= \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 \\
&= \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \text{div}_{\vec{r}_0}\left[g(\vec{r}_0, \vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_1 \\
&= -\frac{1}{k_e^2} \oiint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\left[g(\vec{r}_0, \vec{s}_0)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \cdot \vec{e}_\rho\right]d\vec{s}_1 \\
&= -\frac{1}{k_e^2} \oiint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \frac{e^{-ik_e\delta}}{4\pi\delta^2}(ik_e\delta + 1)\vec{e}_\rho\left(\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \cdot \vec{e}_\rho\right)\delta^2 d\vec{e}_\rho \\
&= -\frac{1}{4\pi k_e^2}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta + 1) \oiint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \vec{e}_\rho(\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \cdot \vec{e}_\rho)d\vec{e}_\rho
\end{aligned}$$

où l'on a posé $\vec{e}_\rho = \frac{\vec{r}_0 - \vec{r}_1}{\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|}$. Enfin, en utilisant le fait que $\oiint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \vec{e}_\rho(\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \cdot \vec{e}_\rho)d\vec{e}_\rho = \frac{4\pi}{3}\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)$, il vient :

$$\vec{\mathcal{I}}_2 = \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\,\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_1 = -\frac{1}{3k_e^2}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta + 1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \qquad \text{(III.106)}$$

En injectant Eqs. III.105 et III.106 dans Eq. III.103, on obtient l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ fournie par Fikioris (Eq. 20 de [Fikioris, 1965]) :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \left[ \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\left[\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_1 + \frac{1}{k_e^2}\left[\frac{2}{3}e^{-ik_e\delta}(1+ik_e\delta) - 1\right]\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)\right] \tag{III.107}$$

Eq. III.107 montre que le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ est la somme de trois termes. Le premier de ces termes provient de la densité de courant $\vec{\mathscr{J}}$ contenue dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ privé du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$. Le second terme est dû à la différence de densité de courant entre l'ensemble des positions $\vec{r}_1$ du volume $\mathcal{V}_\delta$ et la position d'observation $\vec{r}_0$. Enfin, le troisième terme représente le champ au centre du volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$, centré en $\vec{r}_0$ et contenant une densité de courant $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)$ uniforme. Van Bladel souligne que le caractère uniforme de $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)$ dans le volume $\mathcal{V}_\delta$ est d'autant plus acceptable lorsque $\delta \ll \lambda_e$ [Van Bladel, 2007] ($\lambda_e$ étant la longueur d'onde du milieu environnant). Dans la limite $\delta \to 0$, ce champ est réduit à $-\frac{\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)}{3k_e^2}$ qui est le résultat classique de la littérature [Yaghjian, 1980; Van Bladel, 1961]

L'expression Eq. III.107 est basée sur l'hypothèse que le volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ est une sphère centrée sur la position d'observation $\vec{r}_0$. Fikioris [Fikioris, 1965] montre également une formulation plus générale en utilisant un volume d'exclusion sphérique contenant la singularité sans que celle-ci soit centrée (voir Fig. III.6). Dans ce cas, il montre (voir également Annexe I.1) que le champ diffusé s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \lim_{\delta\to 0}\left[ \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\left[\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_1 + \frac{1}{k_e^2}\left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}}{k_e^2}\right]\cdot\left[\frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta+1) - 1\right]\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)\right] \tag{III.108}$$

où $\rho_0$ est la distance entre la position $\vec{r}_0$ et le centre $\vec{r}_c$ du volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ (voir Fig. III.6), $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)$ est uniforme dans $\mathcal{V}_\delta$ (en particulier l'opérateur $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}$ n'agit pas sur $\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)$).

De manière encore plus générale, le volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ n'est pas nécessairement restreint à un volume sphérique. En particulier, Lee et *al* ont proposé une autre décomposition du champ diffusé [Lee et al., 1980; Avestas, 1983; Van Bladel, 2007] qui s'écrit

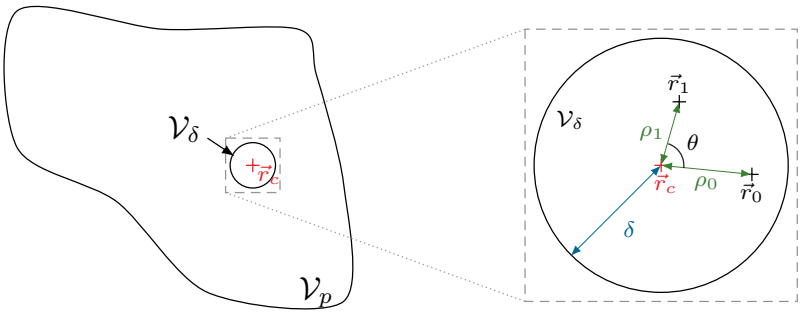



FIGURE III.6 – Volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ centré en $\vec{r}_c$ contenue dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$. La quantité $\rho_0 = \|\vec{r}_0 - \vec{r}_c\|$ représente la distance entre le centre du volume $\mathcal{V}_\delta$ et le point d'observation $\vec{r}_0$.

sous la forme suivante :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \Bigg[ \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \frac{1}{k_e^2} \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1) \cdot \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1$$
$$+ \frac{1}{k_e^2} \iiint_{\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \left[ \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_1} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_1} g(\vec{r},\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \cdot \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_1} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_1} g_0(\vec{r}_0,\vec{r}_1) \right] d\vec{r}_1 \Bigg]$$
$$+ \frac{i\omega\mu_0}{k_e^2} \bar{\bar{L}} \cdot \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) \quad \text{(III.109)}$$

où l'on a posé $g_0(\vec{r}_0,\vec{r}_1) = \frac{1}{4\pi\|\vec{r}_0-\vec{r}_1\|}$ la fonction de Green statique et où $\bar{\bar{L}}$ est donnée par Eq. III.111. La quantité $\delta$ correspondant à la moitié de la corde maximum [11]. Cette formulation montre que chacun des termes, hormis l'intégrale sur $\mathcal{V}_p$, dépendent du volume d'exclusion arbitraire $\mathcal{V}_\delta$ paramétré par $\delta$. Il est bien entendu que la somme de ces termes doit être indépendante du choix du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$. Regardons de plus près chacun des termes, excepté le premier qui ne pose pas de difficulté particulière. La quantité $\bar{\bar{L}}$ ne dépend que de la forme de $\mathcal{V}_\delta$, et est donc en particulier indépendante de la dimension du volume d'exclusion considéré (par exemple du rayon dans le cas d'un volume d'exclusion sphérique). Plus précisément, ceci signifie que $\bar{\bar{L}}$ reste constant lorsque $\mathcal{V}_\delta$ tend vers 0 en conservant sa forme, sa position et son orientation par rapport à la position $\vec{r}$. La troisième intégrale est convergente car $\vec{\mathcal{J}}$ vérifie la condition de Hölder et de plus les singularités dues à la fonction de Green $g$ et à la fonction de Green statique $g_0$ s'annulent entre elles lorsque $\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\| \to 0$. Ainsi dans la limite $\delta \to 0$, cette intégrale tend vers 0. Afin que le résultat reste constant (sous-entendu indépendant de $\mathcal{V}_\delta$), le comportement de cette troisième intégrale est compensé par l'intégrale portant sur $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta$.

11. Par définition, la corde maximum d'une géométrie est la distance maximum entre deux points de la surface de cette géométrie. Pour une sphère, la corde maximum correspond au diamètre.

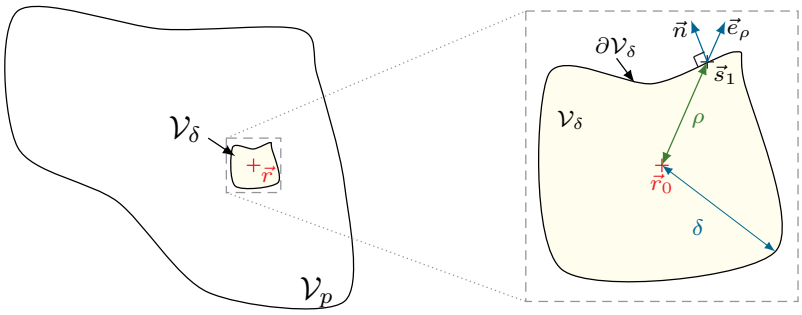



FIGURE III.7 – Notations utilisées pour définir la dyade $\bar{\bar{L}}$. $\mathcal{V}_\delta$ est un volume d'exclusion paramétré par $\delta$ et centré en $\vec{r}_0$. $\vec{s}_1$ est un point de la frontière $\partial\mathcal{V}_\delta$ de $\mathcal{V}_\delta$, $\vec{n}$ un vecteur normal à $\partial\mathcal{V}_\delta$, $\rho = \|\vec{\rho}\| = \|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|$ et $\vec{e}_\rho = \frac{\vec{r}_0 - \vec{s}_1}{\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|}$ un vecteur unitaire.

Quelle que soit la démarche adoptée pour traiter la singularité, le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$, dans la limite $\delta \to 0$, peut être vu comme la somme de la valeur principale de Cauchy et d'un terme correctif [Yaghjian, 1980; Van Bladel, 2007; Chew, 1990] :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \left[ \lim_{\delta\to 0} \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \cdot \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 - \frac{\bar{\bar{L}} \cdot \vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_0)}{k_e^2} \right] \tag{III.110}$$

où la dyade $\bar{\bar{L}}$ est donnée par (voir Fig. III.7 pour les notations) :

$$\bar{\bar{L}} = \oiint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \frac{\vec{e}_\rho \otimes \vec{n}(\vec{s}_1)}{4\pi \|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|^2} d\vec{s}_1 \tag{III.111}$$

Le premier terme de Eq. III.110 (avec la limite d'intégrale) correspond à l'évaluation du champ électrique lorsque $\delta \to 0$ sur le domaine $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$, c'est-à-dire sur le domaine de la particule privé du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$ contenant $\vec{r}_0$. En excluant une partie du volume de la particule, une discontinuité de courant est créée à la frontière $\mathcal{V}_\delta$ de $\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$, entraînant une accumulation de charges à la frontière (voir Fig. III.8) [Chen, 1977; Chew, 1989]. Ces charges vont alors générer un champ électrique au sein du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$. Lorsque ce dernier devient très petit, le champ est essentiellement d'origine électrostatique. Si l'on continue à faire tendre $\mathcal{V}_\delta$ vers zéro, ce champ électrique persiste et fournit une contribution non nulle dépendant seulement de la forme du volume $\mathcal{V}_\delta$. Or, dans le problème initial (*i.e.* sans le volume d'exclusion), ces charges n'ont pas lieu d'exister puisque le champ $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ ne doit pas dépendre du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$. Par conséquent, pour corriger cette *anomalie*, on ajoute au terme intégrale de Eq. III.110 un terme supplémentaire $-\frac{\bar{\bar{L}} \cdot \vec{\mathscr{J}}(\vec{r})}{k_e^2}$ qui supprime cette présence de charges à la surface de $\mathcal{V}_\delta$. Il correspond au champ électrostatique calculé en $\vec{r}_0$ et créé au sein du volume $\mathcal{V}_\delta$.

D'un point de vue mathématique, la dyade $\bar{\bar{L}}$, donnée par Eq. III.111, est semblable à la définition d'un angle solide dyadique normalisé par $4\pi$ [Yaghjian, 1980; Cornille, 2003]. L'expression de la dyade $\bar{\bar{L}}$ (Eq. III.111) ne fait pas intervenir la limite lorsque $\delta$ tend vers

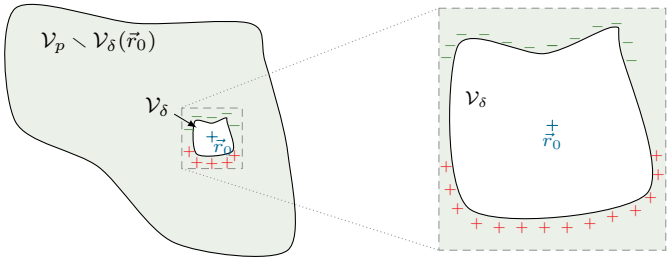



FIGURE III.8 – Illustration du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ contenu dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ et contenant la singularité correspondant (ici) au point $\vec{r}_0$. Ce volume exclu entraîne l'apparition de charge à la surface externe dudit volume.

zéro car l'intégrale de surface dépend seulement de la forme du volume $\mathcal{V}_\delta$ et de la position de la singularité au sein de $\mathcal{V}_\delta$. En particulier, $\bar{\bar{L}}$ ne dépend pas de la taille $\delta$ du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$. Différentes valeurs de $\bar{\bar{L}}$ sont disponibles dans la littérature pour différents volumes d'exclusions $\mathcal{V}_\delta$ [Yaghjian, 1980; Van Bladel, 1961, 2007]. Par exemple, pour une sphère, on a $\bar{\bar{L}} = \bar{\bar{I}}/3$ (voir Encart 4). La même expression est également obtenue lorsque $\mathcal{V}_\delta$ est un cube. Le choix d'une forme pour le volume d'exclusion dépend du problème que l'on étudie. Par exemple, il s'avère judicieux d'utiliser un volume d'exclusion cubique lorsqu'une méthode numérique est basée sur discrétisation en cellules cubiques [Yurkin et al., 2007a]. En ce qui nous concerne, nous prendrons, pour sa simplicité, un volume d'exclusion sphérique.

**Encart 4: Champ électrique dû à un volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$**

Considérons un volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ sphérique de rayon $\delta$ et centré en $\vec{r}_0$. Supposons que $\mathcal{V}_\delta$ contient une densité de courant $\vec{\mathcal{J}} = \mathcal{J}\vec{e}_z$ uniforme. À la surface de $\mathcal{V}_\delta$, notée $\partial\mathcal{V}_\delta$, se trouve une densité surfacique de charge $\sigma$ (voir Fig. III.9).

D'après la relation de continuité [Arnoldus, 2006], $\sigma$ est reliée à $\vec{\mathcal{J}}$ par la relation :

$$\vec{\mathcal{J}} \cdot \vec{n} = i\omega\sigma \tag{III.112}$$

où $\vec{n}$ est la normale à la surface (ici $\vec{n} = \vec{e}_\rho$). Ainsi

$$\sigma = -\frac{i}{\omega}\mathcal{J}\cos\theta \tag{III.113}$$

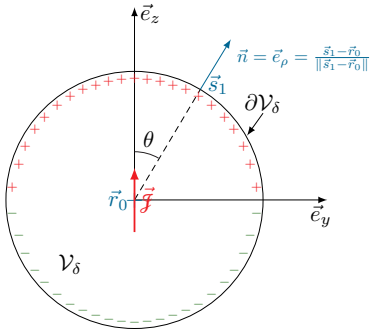



FIGURE III.9 – Illustration d'un volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ centré autour du point singulier $\vec{r}_0$. Une densité de courant $\vec{\mathcal{J}}$ est dirigée suivant l'axe $\vec{e}_z$ créant l'apparition de charges à la surface $\partial\mathcal{V}_\delta$ du volume d'exclusion. $\vec{s}_0$ est un point de la surface $\partial\mathcal{V}_\delta$ et $\vec{n} = \vec{e}_\rho$ est un vecteur unitaire.

Le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}_\delta^\ddagger(\vec{r}_0)$ au point $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_\delta$ est produit par $\vec{\mathcal{J}}$ et les charges surfaciques $\sigma$. Le plan formé par les axes $x$ et $y$ passant par $\vec{r}_0$ est un plan d'antisymétrie pour la distribution de charge donc un plan d'antisymétrie pour le champ électrique. On en déduit alors que le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}_\delta^\ddagger(\vec{r}_0)$ est dirigé suivant l'axe $z$. En utilisant les potentiels scalaire $\Phi_\delta^\ddagger$ et vectoriel $\vec{\mathscr{A}}_\delta^\ddagger$, le champ $\vec{\mathscr{E}}_\delta^\ddagger(\vec{r}_0)$ est donné par la relation

$$\vec{\mathscr{E}}_\delta^\ddagger(\vec{r}_0) = -\overrightarrow{\text{grad}}\,\Phi_\delta^\ddagger - i\omega\vec{\mathscr{A}}_\delta^\ddagger \tag{III.114}$$

avec

$$\Phi_\delta^\dagger = \frac{1}{4\pi\varepsilon_e}\iint_{\partial\mathcal{V}_\delta}\frac{\sigma(\vec{s}_0)}{\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|}d\vec{s}_1 \tag{III.115}$$

$$\vec{\mathscr{A}}_\delta^\ddagger = \frac{\mu_0}{4\pi}\iiint_{\mathcal{V}_\delta}\frac{\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)}{\|\vec{r}_0 - \vec{r}_0\|}d\vec{r}_0 \tag{III.116}$$

Lorsque $\delta \to 0$, le second terme de Eq. III.114 tends vers 0 ($\lim_{\delta\to 0} \vec{\mathcal{A}}^{\ddagger}_{\delta} = 0$). Ceci implique que la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}$ au sein du volume $\mathcal{V}_\delta$ ne contribue pas au champ $\vec{\mathscr{E}}_\delta(\vec{r}_0) = \lim_{\delta\to 0} \vec{\mathscr{E}}^{\ddagger}_{\delta}(\vec{r}_0)$. Ainsi

$$\vec{\mathscr{E}}_\delta(\vec{r}_0) = \lim_{\delta\to 0} \vec{\mathscr{E}}^{\ddagger}_{\delta}(\vec{r}_0) = -\lim_{\delta\to 0} \overrightarrow{\text{grad}}\, \Phi^{\ddagger}_{\delta} \tag{III.117}$$

Ainsi en injectant Eq. III.115 dans Eq. III.117, puis en utilisant Eq. III.113 il vient

$$\begin{aligned}
\vec{\mathscr{E}}_\delta(\vec{r}_0) &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_e} \lim_{\delta\to 0} \iint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \sigma(\vec{s}_0) \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0} \left[\frac{1}{\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|}\right] d\vec{s}_1 \\
&= \frac{i\mathcal{J}}{4\pi\varepsilon_e\omega} \lim_{\delta\to 0} \iint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \cos\theta \left[-\frac{1}{\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|^2} \frac{\vec{r}_0 - \vec{s}_1}{\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|}\right] d\vec{s}_1 \\
&= \frac{i\mathcal{J}}{4\pi\varepsilon_e\omega} \lim_{\delta\to 0} \iint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \cos\theta \left[\frac{1}{\|\vec{r}_0 - \vec{s}_1\|^2} \vec{e}_\rho\right] d\vec{s}_1 \\
&= \frac{i\mathcal{J}}{4\pi\varepsilon_e\omega} \lim_{\delta\to 0} \iint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \cos^2\theta \frac{1}{\delta^2} \delta^2 \sin\theta d\theta d\varphi \vec{e}_z \\
&= \frac{i\mathcal{J}}{2\varepsilon_e\omega} \int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta d\theta \vec{e}_z \\
&= \frac{i}{3\varepsilon_e\omega} \mathcal{J}\vec{e}_z
\end{aligned}$$

où $\vec{e}_\rho = \frac{\vec{\rho}}{\rho} = \frac{\vec{s}_1 - \vec{r}_0}{\|\vec{s}_1 - \vec{r}_0\|}$. Ainsi comme $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) = \mathcal{J}\vec{e}_z$, le champ $\vec{E}_\delta(\vec{r}_0)$ s'écrit finalement, pour un volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ sphérique, sous la forme

$$\vec{\mathscr{E}}_\delta(\vec{r}_0) = \frac{i}{3\varepsilon_e\omega} \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) = i\omega\mu_0 \frac{\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)}{3k_e^2} \tag{III.118}$$

où l'on a également utilisé la relation $k_e^2 = \varepsilon_e\mu_0\omega^2$. En comparant Eq. III.118 avec le second terme de l'équation Eq. III.8, on en déduit que pour un volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ sphérique, la dyade $\bar{\bar{L}}$ est donnée par :

$$\bar{\bar{L}} = \frac{\bar{\bar{I}}}{3} \tag{III.119}$$

Contrairement aux formulations basées sur la décomposition de Fikioris (Eq. III.107) et la décomposition de Lee (Eq. III.109), la formulation Eq. III.110 nécessite que le volume exclu $\mathcal{V}_\delta$ soit infinitésimal. Ceci implique donc de se rapprocher de la singularité, ce qui entraîne des difficultés de convergence numérique. Toutefois, comme le souligne Wang [Wang, 1982], l'utilisation d'un très petit volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ n'est pas à exclure car la résolution numérique des équations Eqs. III.107 et III.109 (qui utilise un volume d'exclusion fini) est loin d'être évidente. En particulier, il est possible de résoudre ces équations par la méthode de Monte Carlo en utilisant des algorithmes dit *branchant* afin de gérer

les multiples récursions présentes dans la formulation. Autrement dit, il ne s'agit plus de suivre *simplement* un seul chemin mais de se déplacer sur un *arbre* constitué de plusieurs *branches* qui vont se subdiviser au fur et à mesure que l'on avance dans le développement. Pour illustrer ce propos, regardons, par exemple, l'expression Eq. III.109. Cette dernière fait intervenir (par l'intermédiaire de la quantité $\vec{\mathcal{J}}$) cinq fois le champ diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}$ correspondant au départ de cinq branches. En poursuivant la récursion, chacune de ces branches va donner naissance à cinq nouvelles branches et ainsi de suite. On comprend bien que la gestion d'un tel algorithme peut vite devenir compliqué. Dans ce manuscrit, pour contourner ces difficultés, nous choisissons de négliger une petite partie du volume de la particule contenant la singularité tout en conservant le terme correctif (*i.e.*, le terme contenant la dyade $\bar{\bar{L}}$). Ceci fait l'objet de la section suivante.

### III.5.2 Formulation intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r})$ négligeant un petit volume d'exclusion

Dans toute la suite, nous considérons un volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ sphérique de rayon $\delta$ centré en $\vec{r}_0$. Dans ce cas, la dyade $\bar{\bar{L}}$ vaut $\bar{\bar{L}} = \bar{\bar{I}}/3$. Suite à la discussion menée précédemment, nous proposons de négliger un petit volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ de sorte qu'il n'y ait plus besoin de passer à la limite $\delta \to 0$. D'une part, ceci permet d'avoir une expression du champ diffusé plus simple à résoudre numériquement (comparées aux formulations Eqs. III.107 et III.109). D'autre part, ceci permet de ne pas avoir une limite devant l'intégrale qui n'est compatible avec aucune méthode de résolution numérique.

**Formulation intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$, $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$ négligeant un petit volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$.** Sous les hypothèses précédentes, le champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ exprimé en $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$ est approché (on notera ce champ approché $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}$) par la formulation intégrale suivante :

$$\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r}_0) \approx \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \left[ \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \cdot \vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 - \frac{\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0)}{3k_e^2} \right] \tag{III.120}$$

Cette expression est obtenue à partir de la formulation intégrale Eq. III.107 proposée par Fikioris en négligeant l'intégrale sur le volume $\mathcal{V}_\delta$ (voir le second terme dans Eq. III.107) et en prenant $\mathcal{V}_\delta$ suffisamment petit de sorte que la quantité $\frac{2}{3}e^{-ik_e\delta}(1 + ik_e\delta) - 1$ tende vers $-\frac{1}{3}$.

Dans la suite, nous reformulons Eq. III.120 afin d'écrire une expression du champ diffusé $\vec{\mathcal{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ en faisant intervenir le champ total $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}$ plutôt que la densité de courant $\vec{\mathcal{J}}$. Plus précisément, en injectant la relation $\vec{\mathcal{J}}(\vec{r}_0) = -i\omega\varepsilon_e(1 - m_r^2(\vec{r}_0))\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ (voir Eq. III.34)

dans Eq. III.120, on obtient :

$$\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0) = \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_1) - 1) \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \cdot \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 + \frac{1}{3}(1 - m_r^2(\vec{r}_0)) \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) \quad \text{(III.121)}$$

Puis, en utilisant la relation $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = \vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0)$, Eq. III.121 s'écrit après avoir réarrangé les termes :

$$\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0) = \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} 3k_e^2 \frac{m_r^2(\vec{r}_1) - 1}{m_r^2(\vec{r}_0) + 2} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \cdot \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 + \frac{1 - m_r^2(\vec{r}_0)}{2 + m_r^2(\vec{r}_0)} \vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \quad \text{(III.122)}$$

Plus généralement, pour toutes les positions $\vec{r}_n \in \mathcal{V}_p$, $n \in \mathbb{N}$, le champ diffusé $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_n)$ s'écrit :

$$\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_n) = \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} 3k_e^2 \frac{m_r^2(\vec{r}_{n+1}) - 1}{m_r^2(\vec{r}_n) + 2} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_n, \vec{r}_{n+1}) \cdot \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_{n+1}) d\vec{r}_{n+1} + \frac{1 - m_r^2(\vec{r}_n)}{2 + m_r^2(\vec{r}_n)} \vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_n) \quad \text{(III.123)}$$

**Commentaire sur la taille du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$.** L'écriture Eq. III.120 nécessite de se poser la question de la taille du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ à prendre. Hormis le fait que ce dernier doit être petit, le choix de la taille de ce volume d'exclusion résulte d'un bon compromis entre précision numérique et difficultés de convergence numérique. Un critère est donné dans l'article [Yaghjian, 1980] [12] :

$$k_e \delta \lesssim \frac{1}{2} \quad \text{(III.124)}$$

où $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$ est le nombre d'onde du milieu extérieur. Dans le cas où le volume $\mathcal{V}_p$ est une particule diélectrique, la longueur d'onde au sein de la particule peut-être plus petite par rapport à celle de son milieu environnant. Ceci nécessite alors de prendre une taille $\delta$ bien inférieure à celle proposée par Eq. III.124 [Yaghjian, 1980].

**Formulation intégrale du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$ en champ lointain.** En vue de calculer les propriétés radiatives, ce qui nous intéresse, c'est l'expression du champ électrique diffusé $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$ en une position d'observation $\vec{r}$ située loin de la particule. Elle est donnée par Eq. III.99 :

$$\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) \bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot [\vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0)] d\vec{r}_0 \quad \text{(III.125)}$$

12. Dans l'article [Yaghjian, 1980], le critère est plutôt écrit sous la forme $k_e \delta_Y \lesssim 1$. La différence provient du fait que YAGHJIAN considère $\delta_Y$ comme étant la corde maximum, alors que dans ce manuscrit on considère $\delta$ comme étant la moitié de la corde maximum. Ainsi, le lien entre les deux notations est $\delta_Y = 2\delta$.

avec $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0)$ donné par Eq. III.123.

À partir de l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$, fournie par Eq. III.125, nous allons pouvoir expliciter la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ comme nous allons le voir dans la prochaine section.

### III.5.3 Formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$

Nous allons établir ici la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ qui est définie par (voir Sec. I.2.4.1, Eq. I.14) :

$$\begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{sca}(\vec{r}) \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{sca}(\vec{r}) \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_s} = \bar{\bar{S}} \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \begin{bmatrix} \mathscr{E}^{\theta}_{0,inc} \\ \mathscr{E}^{\varphi}_{0,inc} \end{bmatrix}_{\mathcal{B}_i} \tag{III.126}$$

où $\mathcal{B}_s = (\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s})$ et $\mathcal{B}_i = (\vec{e}_i, \vec{e}_{\theta_i}, \vec{e}_{\varphi_i})$ sont deux bases associées aux coordonnées sphériques. Compte tenu de l'écriture, la matrice $\bar{\bar{S}}$ inclut un changement de base.

Pour obtenir une expression de la matrice $\bar{\bar{S}}$, nous introduisons la quantité $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ désignant une matrice $3 \times 3$ qui relie le champ diffusé et le champ incident :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \bar{\bar{\mathcal{S}}} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{III.127}$$

Les matrices $\bar{\bar{S}}$ et $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ sont alors reliées par la relation suivante :

$$\bar{\bar{S}} = \bar{\bar{\mathcal{S}}}_{|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{III.128}$$

La notation $\bar{\bar{\mathcal{S}}}_{|\{2,3\}\{2,3\}}$ signifie que l'on forme une sous matrice constituée par les éléments intersectant les lignes 2 et 3 avec les colonnes 2 et 3. Autrement dit, c'est la sous matrice formée en supprimant la ligne 1 et la colonne 1 de la matrice initiale $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$. Ainsi, une fois que l'on aura écrit la formulation intégrale de la matrice $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$, nous en déduirons immédiatement celle de la matrice $\bar{\bar{S}}$ en utilisant Eq. III.128.

**Formulation intégrale de $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$.** Nous partons de la formulation intégrale du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$ donnée par Eq. III.125. Ensuite, nous allons exprimer ce champ dans la base $\mathcal{B}_s = (\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s})$ liée à la position d'observation $\vec{r}$. Dans cette base, le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$ ne possède que deux composantes puisque le champ est orthogonal à la direction d'observation $\vec{e}_s$. On peut le voir directement sur l'équation avec le terme $\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s$ qui, dans la base $\mathcal{B}_s$ s'écrit :

$$\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{III.129}$$

Toutefois, travailler dans cette base $\mathcal{B}_s$ implique d'écrire tous les champs et les dyades de Green dans cette base. Pour plus de clarté dans ce qui va suivre, nous réécrivons Eq. III.125, en faisant clairement apparaître la base $\mathcal{B}_s$ sur les grandeurs qui devront être calculées dans cette base :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}_{\mathcal{B}_s}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\left[\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{inc}(\vec{r}_0)+\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_0 \tag{III.130}$$

avec

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}_n) =& \frac{1-m_r^2(\vec{r}_0)}{2+m_r^2(\vec{r}_0)}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{inc}(\vec{r}_0)\\ &+\iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_1)-1}{m_r^2(\vec{r}_0)+2}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\left[\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{inc}(\vec{r}_1)+\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}_1)\right]d\vec{r}_1\end{aligned} \tag{III.131}$$

En vue d'écrire une formulation intégrale pour $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$, nous introduisons comme nous l'avions fait dans la section précédente une matrice de passage $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}$ de la base $\mathcal{B}_s$ à la base $\mathcal{B}_i$ (voir Annexe K). Ainsi, $\forall n \in \mathbb{N}$, le champ incident $\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{inc}(\vec{r}_n)$ exprimé dans la base $\mathcal{B}_s$ s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_s}_{inc}(\vec{r}_n) = P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{inc}(\vec{r}_n) = e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}(\vec{r}_n) \tag{III.132}$$

Par ailleurs, $\forall n \in \mathbb{N}^*$, nous introduisons une matrice $\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n)$ définie telle que :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}_n) = \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n)P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{III.133}$$

En utilisant Eqs. III.132 et III.133, Eqs. III.130 et III.131 s'écrivent :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) &= \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}_{\mathcal{B}_s}\cdot\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}+\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}\right]d\vec{r}_0\\ &= \left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}_{\mathcal{B}_s}\cdot\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}}+\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)\right]d\vec{r}_0\right]P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}\end{aligned} \tag{III.134}$$

et

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}_n) =& \frac{1-m_r^2(\vec{r}_n)}{2+m_r^2(\vec{r}_n)}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}\\ &+\iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_{n+1})-1}{m_r^2(\vec{r}_n)+2}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})\\ &\quad\times\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_{n+1}}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}+\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_{n+1})P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}\right]d\vec{r}_{n+1}\\ =&\left[\frac{1-m_r^2(\vec{r}_n)}{2+m_r^2(\vec{r}_n)}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}\bar{\bar{I}}\right.\\ &+\iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_{n+1})-1}{m_r^2(\vec{r}_n)+2}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})\\ &\left.\quad\times\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_{n+1}}+\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_{n+1})\right]d\vec{r}_{n+1}\right]P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}\\ =&\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n)P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}\end{aligned} \tag{III.135}$$

où, $\forall n \in \mathbb{N}$, $\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n)$ est donnée de façon récursive par :

$$\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n) = \frac{1-m_r^2(\vec{r}_n)}{2+m_r^2(\vec{r}_n)} e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}\bar{\bar{I}} + \iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} 3k_e^2 \frac{m_r^2(\vec{r}_{n+1})-1}{m_r^2(\vec{r}_n)+2} \bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1}) \left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_{n+1}}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_{n+1})\right] d\vec{r}_{n+1} \tag{III.136}$$

Enfin, en injectant l'expression de la dyade de Green $\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ en champ lointain dans Eq. III.134, l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r})$ en une position $\vec{r}$ située loin de la particule s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r}\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]\cdot\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \times \left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_0\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{III.137}$$

En comparant les expressions du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}_n)$, données par Eqs. III.127 et III.137, on en déduit la formulation intégrale de $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ :

$$\bar{\bar{\mathcal{S}}} = -\frac{i}{4\pi}\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]\cdot\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_0\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \tag{III.138}$$

où $\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)$ est donnée de façon récursive par Eq. III.136.

**Formulation intégrale de $\bar{\bar{S}}$.** En injectant Eq. III.138 dans Eq. III.128, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ s'écrit :

$$\bar{\bar{S}} = -\frac{i}{4\pi}\left\{\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right]\cdot\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \times \left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_0\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\right\}_{|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{III.139}$$

Cette expression peut se simplifier en remarquant que pour toute matrice $M$, nous avons la relation suivante (voir Annexe K) :

$$\left\{\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s\otimes\vec{e}_s\right] M\right\}_{|_{\{2,3\}\{2,3\}}} = M_{|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{III.140}$$

où $\vec{e}_s = (1,0,0)$ est exprimée dans la base $\mathcal{B}_s$ (sinon on ne pourrait pas écrire cette relation). En utilisant cette relation, Eq. III.139 s'écrit :

$$\bar{\bar{S}} = -\frac{i}{4\pi}\left\{\left[\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_0\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\right\}_{|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{III.141}$$

où $\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0)$ est donnée de façon récursive par Eq. III.136. Nous venons d'obtenir la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$. Cette formulation intégrale sera résolue par la méthode de Monte Carlo au chapitre VI.

### III.5.4 Formulations intégrales des propriétés radiatives d'une particule isolée

Les propriétés radiatives d'une particule isolée sont obtenues à partir de la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion que nous venons d'établir (voir Eq. III.141). Dans la suite, nous notons $S_{pq}$ $(p,q) \in [\![1,2]\!]^2$ les éléments de la matrice $\bar{\bar{S}}$.

**Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$.** Elle est obtenue en utilisant Eq. I.23 que nous rappelons ci-dessous :

$$\hat{W}_{sca} = \frac{1}{2}\left(|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2\right) \tag{III.142}$$

**Section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$.** Elle est obtenue en intégrant sur $4\pi$ la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (voir Eqs. I.25 et I.23) :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \iint_{4\pi} \hat{W}_{sca} d\vec{e}_s = \frac{1}{2}\iint_{4\pi} \left[|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2\right] d\vec{e}_s \tag{III.143}$$

où $d\vec{e}_s$ est l'angle solide autour de la direction d'observation $\vec{e}_s$ : $d\vec{e}_s = \sin\vartheta_{sca} d\vartheta_{sca} d\phi_{sca}$.

**Section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$.** Elle est déterminée à partir du théorème optique donné dans Sec. I.2.4.3 (voir également [Mishchenko et al., 2002; Borghese et al., 2007]) :

$$\hat{\sigma}_{ext} = -\frac{2\pi}{k_e}\mathfrak{Re}\left(S_{11}(\vec{e}_i,\vec{e}_i) + S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_i)\right) \tag{III.144}$$

**Section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$.** Elle est obtenue en prenant la différence entre les sections efficaces d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ et de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \hat{\sigma}_{ext} - \hat{\sigma}_{sca} \tag{III.145}$$

## III.6 Établissement des formulations intégrales dans le cadre de l'approximation de Schiff

Nous verrons au chapitre VI que la résolution du développement en série de Born est délicate car les intégrandes qui y sont présentes sont fortement oscillantes [Li et al., 2010], notamment lorsque le paramètre de taille augmente. Par conséquent, pour obtenir les propriétés radiatives des particules de grande taille, nous proposons d'utiliser l'approximation

de Schiff. Comme nous allons le voir, elle consiste à appliquer l'approximation des phases stationnaires au développement en série de Born afin de gérer les intégrandes oscillantes. En procédant ainsi, nous établirons dans cette section la formulation intégrale du champ diffusé qui en découle. Puis, nous en déduirons celle de l'amplitude de diffusion qui sera nécessaire pour établir les formulations intégrales des propriétés radiatives. La résolution de ces formulations intégrales par la méthode de Monte Carlo fera l'objet du chapitre IV.

### III.6.1 Formulation intégrale du champ électrique

Dans les deux sections précédentes, le problème de la diffusion d'une onde par une particule est résolu en considérant les grandeurs vectorielles des champs. Ici, dans le cadre de l'approximation de Schiff, la description de la propagation des ondes électromagnétiques est scalaire. Sous cette hypothèse, ceci revient à négliger le terme en $\frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}}{k_e^2} g$ dans l'expression de la dyade de Green (Eq. III.68). De plus, contrairement à la section précédente (voir Sec. III.5), il n'y a plus de problème de singularité puisque le terme évoluant comme l'inverse d'une distance présent dans la fonction de Green est compensée avec l'élément de volume qui évolue comme une distance au carré. Ceci permet de simplifier l'expression du champ électrique diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$. Plus précisément, en une position d'observation $\vec{r}$, le champ $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ est donné par :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) g(\vec{r}, \vec{r}_0) \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{III.146}$$

Comme dans les deux sections précédentes, en vue de calculer les propriétés radiatives, ce qui nous intéresse c'est le champ diffusé exprimé en une position $\vec{r}$ située loin de la particule de sorte que l'approximation du champ lointain est valide (voir Sec. I.2.2). Sous cette hypothèse, la fonction de Green est celle correspondant au champ lointain donnée par Eq. III.71 que l'on rappelle ci dessous :

$$g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} e^{ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \tag{III.147}$$

En injectant Eq. III.147 dans Eq. III.146, le champ électrique diffusé exprimé en une position d'observation $\vec{r}$ située loin de la particule s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) e^{ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{III.148}$$

où le champ interne $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)$ est donné par

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_1) - 1) g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \tag{III.149}$$

ou plus généralement de façon récursive par $\forall q \in \mathbb{N}^*$ :

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_{q-1}) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_{q-1}) + \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_q) - 1) g(\vec{r}_{q-1}, \vec{r}_q) \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_q) d\vec{r}_q \tag{III.150}$$

$g(\vec{r}_{q-1},\vec{r}_q)$ est la fonction de Green donnée par

$$g(\vec{r}_{q-1},\vec{r}_q)=\frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_{q-1}-\vec{r}_q\|}}{4\pi\|\vec{r}_{q-1}-\vec{r}_q\|} \tag{III.151}$$

et $\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_q)$ le champ incident donné par

$$\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_q)=\mathscr{E}_{0,inc}e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_q} \tag{III.152}$$

où $\vec{k}_i=k_e\vec{e}_i$ est le vecteur d'onde incident et $\mathscr{E}_{0,inc}$ est l'amplitude constante du champ incident.

Comme on le constate dans Eq. III.150, le champ interne $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ est une équation intégrale de Fredholm de seconde espèce. Comme dans la section précédente, le redéploiement de cette équation intégrale de Fredholm conduit alors à une série infinie connue sous le nom de développement en série de Born ou en série de Neumann. Plus précisément, le redéploiement consiste à injecter de façon récursive Eq. III.150 dans Eq. III.149. En procédant ainsi, le champ interne $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\vec{r}_0)=\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0)&+\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_1k_e^2(m_r^2(\vec{r}_1)-1)g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\Big[\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_1)\\&+\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_2k_e^2(m_r^2(\vec{r}_2)-1)g(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\Big[\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_2)\\&+\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_3k_e^2(m_r^2(\vec{r}_3)-1)g(\vec{r}_2,\vec{r}_3)\Big[\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_3)\\&+\cdots\end{aligned} \tag{III.153}$$

En développant, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\vec{r}_0)=\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0)&+\iiint_{\mathcal{V}_p}k_e^2(m_r^2(\vec{r}_1)-1)g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1\\&+\iiint_{\mathcal{V}_p}\iiint_{\mathcal{V}_p}k_e^4(m_r^2(\vec{r}_1)-1)(m_r^2(\vec{r}_2)-1)g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)g(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_2)d\vec{r}_1d\vec{r}_2\\&+\iiint_{\mathcal{V}_p}\iiint_{\mathcal{V}_p}\iiint_{\mathcal{V}_p}k_e^6(m_r^2(\vec{r}_1)-1)(m_r^2(\vec{r}_2)-1)(m_r^2(\vec{r}_3)-1)\\&\qquad\times g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)g(\vec{r}_1,\vec{r}_2)g(\vec{r}_2,\vec{r}_3)\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_3)d\vec{r}_1d\vec{r}_2d\vec{r}_3\\&+\cdots\end{aligned} \tag{III.154}$$

soit sous une forme plus compacte :

$$\mathscr{E}(\vec{r}_0)=\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0)+\sum_{q=1}^{+\infty}k_e^{2q}\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_1\cdots\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_q\left[\prod_{k=1}^{q}(m_r^2(\vec{r}_k)-1)g(\vec{r}_{k-1},\vec{r}_k)d\vec{r}_k\right]\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_q) \tag{III.155}$$

Dans la suite, nous considérons la particule comme un milieu homogène d'indice de réfraction uniforme : $m_r(\vec{r})=m_r$. Ainsi, l'équation précédente s'écrit :

$$\mathscr{E}(\vec{r}_0)=\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0)+\sum_{q=1}^{+\infty}\left[k_e^2(m_r^2-1)\right]^q\mathcal{I}_q \tag{III.156}$$

où l'on a posé $\forall q \in \mathbb{N}^*$,

$$\mathcal{I}_q = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_q \left[\prod_{k=1}^{q} g(\vec{r}_{k-1}, \vec{r}_k) d\vec{r}_k\right] \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_q) \tag{III.157}$$

Nous venons d'obtenir une expression du champ interne à la particule à l'aide du développement en série de Born qui peut être vu comme la somme d'une succession d'intégrales. L'approximation de Schiff va consister à sommer chacun des termes de la série de Born après avoir approximé chacun des termes intégrales $\mathcal{I}_q$ par la méthode des phases stationnaires.

Concentrons nous dans un premier temps sur l'intégrale $\mathcal{I}_1$ dans laquelle on remplace la fonction de Green $g(\vec{r}_1, \vec{r}_0)$ (Eq. III.151) ainsi que le champ incident $\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_1)$ (voir Eq. III.152) par leurs expressions. Puis, nous effectuons le changement de variable $\vec{\rho}_1 = \vec{r}_1 - \vec{r}_0$, $\rho_1 = \|\vec{\rho}_1\| = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|$. Ainsi,

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_1 &= \iiint_{\mathcal{V}_p} g(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|}}{4\pi\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|} \mathscr{E}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_1} d\vec{r}_1 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-i(k_e\rho_1 + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_1)}}{4\pi\rho_1} \mathscr{E}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_1 \\
&= \frac{e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0}}{4\pi} \mathscr{E}_{0,inc} \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-i(k_e\rho_1 + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_1)}}{\rho_1} d\vec{r}_1 \\
&= \frac{e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0}}{4\pi} \mathscr{E}_{0,inc} \int_0^{+\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{H}(\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + \vec{\rho}_1 \in \mathcal{V}_p) \frac{e^{-i(k_e\rho_1 + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_1)}}{\rho_1} \rho_1^2 \sin\theta d\rho_1 d\theta d\varphi
\end{aligned} \tag{III.158}$$

où $\mathcal{H}(\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + \vec{\rho}_1) \in \mathcal{V}_p$ est la fonction de Heaviside qui vaut 1 si $\vec{r}_1 \in \mathcal{V}_p$, 0 sinon. Notons $\theta$ l'angle entre les vecteurs $\vec{k}_i$ et $-\vec{\rho}_1$. On a ainsi $\vec{k}_i \cdot \vec{\rho}_1 = -k_e\rho_1 \cos\theta$. En effectuant un changement de variable $\mu = \cos\theta$, $d\mu = -\sin\theta d\theta$, il vient :

$$\mathcal{I}_1 = \frac{e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0}}{4\pi} \mathscr{E}_{0,inc} \int_0^{+\infty} \int_{-1}^{1} \int_0^{2\pi} \mathcal{H}(\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + \vec{\rho}_1 \in \mathcal{V}_p) e^{-ik_e\rho_1(1-\mu)} \rho_1 d\rho_1 d\mu d\varphi \tag{III.159}$$

En calculant les intégrales sur $\mu$ et $\varphi$, il vient

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{2\pi i}{k_e} \frac{e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0}}{4\pi} \mathscr{E}_{0,inc} \int_0^{+\infty} \mathcal{H}(\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + \vec{\rho}_1 \in \mathcal{V}_p) \left[1 - e^{-2ik_e\rho_1}\right] d\rho_1 \tag{III.160}$$

Le terme $1 - e^{-2ik_e\rho_1}$ provient de $\int_{-1}^{1} e^{-ik_e\rho_1(1-\mu)} d\mu = -\frac{i}{k_e\rho_1} \left[e^{-ik_e\rho_1(1-\mu)}\right]_{-1}^{1}$. Plus précisément, le terme 1 provient de l'évaluation de la primitive en $\mu = 1$ (*i.e.* en $\theta = 0$) et le terme en $-e^{-2ik_e\rho_1}$ provient de l'évaluation de la primitive en $\mu = -1$ (*i.e.* en $\theta = \pi$). Reste maintenant à évaluer l'intégrale Eq. III.160. Pour ce faire, utilisons le fait que la taille de la particule est grande devant la longueur d'onde (*i.e.* $x = k_e a \gg 1$, $a$ longueur

caractéristique de la particule). Sous cette condition, nous avons $k_e\rho_1 \gg 1$ impliquant que l'exponentielle $e^{-2ik_e\rho_1}$ oscille très rapidement entraînant ainsi une contribution intégrale négligeable devant 1 (l'autre terme). Compte tenu de la précédente intégration sur la variable $\mu$ (soit $\theta$), on s'aperçoit que la principale contribution à l'intégrale $\mathcal{I}_1$ vient d'une région située au voisinage de $\mu = 1$ ($\theta = 0$), c'est-à-dire lorsque $-\vec{\rho}_1$ et $\vec{k}_i$ sont quasi alignés. Plus précisément, la principale contribution à l'intégrale $\mathcal{I}_1$ est issue d'une zone angulaire en forme de paraboloïde de révolution de sommet $\vec{r}_0$, d'axe de rotation $-\vec{e}_i$ et correspondant à des angles $\theta$ tels que[13] $\theta \lesssim \sqrt{\frac{2}{k_e\rho_1}}$ (petits angles de diffusion). Cette zone, dite de phase stationnaire, notée $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$, est représentée Fig. III.10. Ainsi, pour des particules de grands paramètres de taille $x \gg 1$, l'application de la méthode des phases stationnaires [Schiff, 1956] conduit à écrire Eq. III.160 sous la forme :

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{i}{2k_e} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \mathscr{C}_{0,inc} \int_0^{+\infty} \mathcal{H}(\vec{r}_1 = \vec{r}_0 - \rho_1\vec{e}_i \in \mathcal{V}_p) d\rho_1 + \mathcal{O}(k_e^{-2}) \tag{III.161}$$

Il convient de remarquer que, contrairement à Eq. III.160 dont l'intégrale se fait pour l'ensemble des positions $\vec{r}_1 \in \mathcal{V}_p$, l'intégrale donnée par Eq. III.161 se fait seulement sur les positions $\vec{r}_1$ appartenant à la région de phase stationnaires $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$ puisque $\vec{\rho}_1 = -\rho_1\vec{e}_i$. En clair, la méthode des phases stationnaires consiste à dire que les oscillations rapides de l'intégrande loin de la région de phase stationnaire conduisent à une contribution à l'intégrale qui est négligeable devant celle provenant de la région de phase stationnaire. Poursuivons le calcul de l'intégrale Eq. III.161 en remarquant que l'intégrale sur $\rho_1$ correspond à la distance parcourue par un rayon parallèle à la direction incidente $\vec{e}_i$, entre son entrée dans la particule $\vec{r}_0^{\,\text{in}}$ et la position $\vec{r}_0$ au sein de la particule. En prenant l'axe des abscisses $z$ dirigé suivant $\vec{e}_i$, on en déduit que l'intégrale sur $\rho_1$ est égale à la distance $\rho = z_0 - z_0^{\text{in}}$ (voir Fig. III.10) :

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{i}{2k_e} \mathscr{C}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} (z_0 - z_0^{\text{in}}) + \mathcal{O}(k_e^{-2}) \tag{III.162}$$

Avant de poursuivre, pour généraliser le calcul de $\mathcal{I}_1$ au calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_q$, remarquons qu'à partir de Eq. III.158 ($4^{ème}$ égalité) et Eq. III.161, il est possible d'extraire la relation suivante (écrite sous une forme plus générale) :

$$\forall k \in \mathbb{N}^* \qquad \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-i(k_e\rho_k + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_k)}}{4\pi\rho_k} d\vec{r}_k \approx -\frac{i}{2k_e} \int_0^{+\infty} \mathcal{H}(\vec{r}_k = \vec{r}_{k-1} - \rho_k\vec{e}_i \in \mathcal{V}_p) d\rho_k \tag{III.163}$$

où $\rho_k = \|\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}\|$ est la distance entre deux positions $\vec{r}_k$ et $\vec{r}_{k-1}$. Cette relation nous sera utile lors du calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_q$ qui va suivre.

13. Notons $g(\theta) = 1 - \cos\theta$. On a $\frac{\partial g}{\partial\theta} = 0 \Leftrightarrow \sin\theta = 0 \Leftrightarrow \theta = 0$ ou $\pi$. Le point $\theta = 0$ est un point stationnaire et en effectuant un développement de Taylor de la quantité $g$ au voisinage de $\theta = 0$, il vient $g(\theta) \approx 1 - (1 - \frac{\theta^2}{2}) = \frac{\theta^2}{2}$. On en déduit ainsi que $k_e\rho_1\frac{\theta^2}{2} \gg 1$

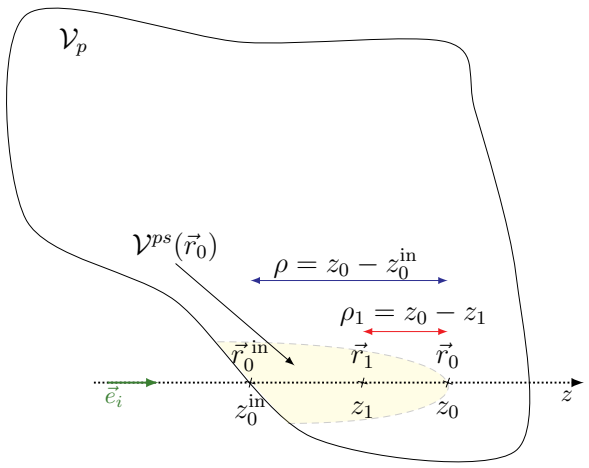



FIGURE III.10 – Représentation de la zone de phase stationnaire $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$ pour le calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_1$ pour les petits angles de diffusion. Un rayon se propage sur une ligne quasi-droite depuis l'infini jusqu'à la position $\vec{r}_0$ suivant la direction incidente $\vec{e}_i$. $\rho$ représente la distance parcourue par le rayon au sein de la particule depuis son entrée à la position $\vec{r}_0^{\,\text{in}}$ jusqu'à la position $\vec{r}_0$.

En suivant la même démarche que pour le calcul de $\mathcal{I}_1$, puis en remplaçant les fonctions de Green $g(\vec{r}_{k-1}, \vec{r}_k)$ et le champ incident $\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_q)$ par leurs expressions (voir Eqs. III.151 et III.152), l'intégrale $\mathcal{I}_q$ (voir Eq. III.157) s'écrit :

$$\mathcal{I}_q = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_q \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \left[\prod_{k=1}^{q} \frac{e^{-ik_e\rho_k}}{4\pi\rho_k}\right] \mathscr{E}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_q} \tag{III.164}$$

avec $\forall k \in [\![1,q]\!]$, $\vec{\rho}_k = \vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}$, $\rho_k = \|\vec{\rho}_k\| = \|\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}\|$. En remarquant que $\vec{k}_i \cdot \vec{r}_q = \vec{k}_i \cdot \vec{r}_0 + \vec{k}_i \cdot \sum_{k=1}^{q} (\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}) = \vec{k}_i \cdot \vec{r}_0 + \vec{k}_i \cdot \sum_{k=1}^{q} \vec{\rho}_k$, puis en utilisant la relation Eq. III.163 après avoir appliquée la méthode des phases stationnaires, Eq. III.164 devient :

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_q &= \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_q \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \frac{e^{-i\sum_{k=1}^{q}(k_e\rho_k + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_k)}}{\prod_{k=1}^{q} 4\pi\rho_k} \mathscr{E}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \\
&= \mathscr{E}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \prod_{k=1}^{q} \left[\iiint_{\mathcal{V}_p,k} \frac{e^{-i(k_e\rho_k + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_k)}}{4\pi\rho_k} d\vec{r}_k\right] \\
&= \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \mathscr{E}_{0,inc} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \prod_{k=1}^{q} \left[\int_0^{+\infty} \mathcal{H}(\vec{r}_k = \vec{r}_{k-1} - \rho_k\vec{e}_i \in \mathcal{V}_p) d\rho_k\right] + \mathcal{O}(k_e^{-2})
\end{aligned} \tag{III.165}$$

où $\vec{r}_k$ est une position située entre la position d'entrée dans la particule $\vec{r}_0^{\,\text{in}}$ et la position $\vec{r}_{k-1}$ comme l'illustre Fig. III.11. Ainsi $\forall k \in [\![1,q]\!]$, la distance $\rho_k$ varie entre 0 et $z_{k-1} - z_0^{\text{in}}$. Autrement dit, $\rho_k$ varie entre entre 0 et $\rho - \sum_{j=1}^{k-1} \rho_j$, où $\rho = z_0 - z_0^{\text{in}}$. Ainsi l'intégrale $\mathcal{I}_q$

(voir Eq. III.165) s'écrit :

$$\mathcal{I}_q = \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \prod_{k=1}^{q} \left[\int_0^{\rho-\sum_{j=1}^{k-1}\rho_j} d\rho_k\right] + \mathcal{O}(k_e^{-2q})$$

$$= \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \int_0^{\rho} d\rho_1 \int_0^{\rho-\rho_1} d\rho_2 \cdots \int_0^{\rho-\sum_{j=1}^{q-1}\rho_j} d\rho_q + \mathcal{O}(k_e^{-2q}) \quad \text{(III.166)}$$

avec, lorsque $k = 1$, $\sum_{j=1}^{0} = 0$. Les intégrales portant sur $\rho_k$, $k \in [\![1, q]\!]$ sont calculées en utilisant la relation suivante :

$$\forall l \in [\![0, q-1]\!] \qquad \int_0^{\eta_{q-1-l}} (\eta_{q-1-l} - \rho_{q-l})^l \, d\rho_{q-l} = \frac{\eta_{q-1-l}^{l+1}}{l+1} \quad \text{(III.167)}$$

où $\eta_{q-1-l} = \rho - \sum_{j=1}^{q-1-l} \rho_j$. Lorsque $l = q-1$, on pose $\sum_{j=1}^{0} \rho_j = 0$ d'où $\eta_0 = \rho = z_0 - z_0^{in}$. En utilisant Eq. III.167, Eq. III.166 devient

$$\mathcal{I}_q = \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} \frac{(z_0 - z_0^{\text{in}})^q}{q!} + \mathcal{O}(k_e^{-2q}) \quad \text{(III.168)}$$

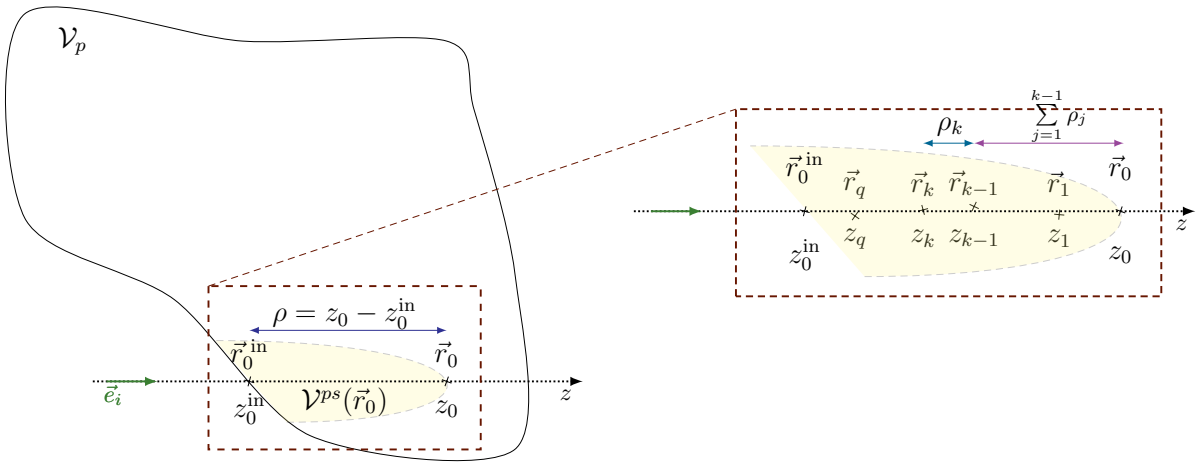



FIGURE III.11 – Représentation de la zone de phase stationnaire $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$ pour le calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_q$ pour les petits angles de diffusion. Un rayon se propage sur une ligne quasi-droite depuis l'infini jusqu'à la position $\vec{r}_0$ suivant la direction incidente $\vec{e}_i$. $\rho$ représente la distance parcourue par le rayon au sein de la particule depuis son entrée à la position $\vec{r}_0^{\,\text{in}}$ jusqu'à $\vec{r}_0$. $\rho_k = \|\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}\|$ est la distance entre les positions $\vec{r}_k$ et $\vec{r}_{k+1}$.

En injectant Eq. III.168 dans le développement en série de Born du champ électrique interne $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ (Eq. III.156), il vient (en utilisant notamment le développement en série entière $\sum_{n=0}^{+\infty} y^n = \exp y$) :

$$\mathscr{E}(\vec{r}_0) = \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) \exp\left[-ik_e \frac{m_r^2 - 1}{2}(z_0 - z_0^{\text{in}})\right] + \mathcal{O}\left(\sum_{q=1}^{+\infty} (m_r^2 - 1)^q\right) \quad \text{(III.169)}$$

Jusqu'ici, nous avons seulement utilisé la condition portant sur le paramètre de taille $x \gg 1$. En considérant maintenant l'hypothèse sur les contrastes d'indice, à savoir $|m_r^2 - 1| \ll 1$, les termes d'ordres $(m_r^2-1)^q$ peuvent être négligés. Ainsi, le champ interne dans la particule correspond à une onde plane incidente atténuée et déphasée sur une distance $z_0 - z_0^{\text{in}}$ correspondant à la distance entre l'entrée dans la particule et la position $\vec{r}_0$ considérée.

Jusqu'à maintenant, nous avons montré l'existence d'une zone de phase stationnaire qui est due à un rayon qui entre dans la particule suivant la direction incidente $\vec{e}_i$ et qui atteint la position $\vec{r}_0$ selon cette même direction. Ceci implique que les expressions précédemment obtenues sont valables seulement pour des petits angles de diffusion. Pour des angles de diffusion plus importants, Schiff montre qu'il convient de considérer une autre zone de phase stationnaire [Schiff, 1956]. En effet, un rayon peut entrer suivant une direction parallèle à celle de la direction incidente $\vec{e}_i$, puis subir une diffusion suivant la direction $\vec{e}_s$ avant d'atteindre la position $\vec{r}_0$ (voir Fig. III.12) . Nous allons maintenant considérer cette situation en calculant l'intégrale suivante :

$$\mathcal{I}_{n+m} = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+m} \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_n \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \left[ \prod_{q=1}^{n+m} g(\vec{r}_q, \vec{r}_{q-1}) \right] e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_{n+m}}$$

que l'on peut réécrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{n+m} = & \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+m} \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+1} \left[ \prod_{q=n+1}^{n+m} g(\vec{r}_q, \vec{r}_{q-1}) \right] e^{-i\vec{k}_i \cdot \sum_{q=n+1}^{n+m} \vec{\rho}_q}}_{=\mathcal{I}_{n+m,n+1}} \\ & \times \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_n \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \left[ \prod_{q=1}^{n} g(\vec{r}_q, \vec{r}_{q-1}) \right] e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_n}}_{=\mathcal{I}_{n,1}} \end{aligned} \tag{III.170}$$

où l'on a utilisé le fait que le terme $\vec{k}_i \cdot \vec{r}_{n+m}$ peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \vec{k}_i \cdot \vec{r}_{n+m} &= \vec{k}_i \cdot \vec{r}_n + \vec{k}_i \cdot \underbrace{(\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_n)}_{\vec{\rho}_{n+1}} + \vec{k}_i \cdot \underbrace{(\vec{r}_{n+2} - \vec{r}_{n+1})}_{\vec{\rho}_{n+2}} + \cdots + \vec{k}_i \cdot \underbrace{(\vec{r}_{n+m} - \vec{r}_{n+m-1})}_{\vec{\rho}_{n+m}} \\ &= \vec{k}_i \cdot \vec{r}_n + \sum_{q=n+1}^{n+m} \vec{\rho}_q \end{aligned}$$

Ainsi $\mathcal{I}_{n+m} = \mathcal{I}_{n+m,n+1} \times \mathcal{I}_{n,1}$. Le terme $\mathcal{I}_{n+m,n+1}$ correspond à la contribution sur une ligne droite parallèle à la direction d'incidence depuis la position $\vec{r}_{n+m}$ jusqu'à la position $\vec{r}_n$ (*i.e.* où tous les $\vec{\rho}_q$, $q \in [\![n+1, n+m]\!]$ sont quasiment alignés avec $-\vec{e}_i$). Le terme $\mathcal{I}_{n,1}$ quant à lui correspond à la contribution sur une ligne droite depuis la position $\vec{r}_n$ jusqu'à $\vec{r}_0$ suivant la direction $\vec{e}_s$ (*i.e.* où tous les $\vec{\rho}_q$, $q \in [\![1, n]\!]$ sont quasiment alignés avec $-\vec{e}_s$).

Ces deux configurations sont représentées dans Fig. III.12. On montre, dans Annexe G.1, que l'intégrale $\mathcal{I}_{n+m} = \mathcal{I}_{n+m,n+1} \times \mathcal{I}_{n,1}$ (voir Eq. III.170) s'écrit :

$$\mathcal{I}_{n+m} = \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^m \frac{(z_n - z_n^{\text{in}})^m}{m!} \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{n-1} \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} \frac{\rho^{n-1}}{(n-1)!} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_n} d\vec{r}_n \qquad \text{(III.171)}$$

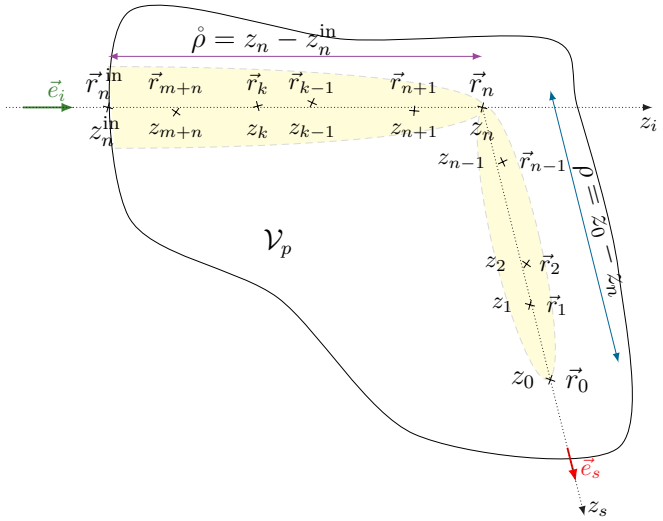



FIGURE III.12 – Représentation de la zone de phase stationnaire dans le cas des grands angles de diffusion. Un rayon se propage sur une ligne quasi-droite depuis l'infini jusqu'à la position $\vec{r}_n$ suivant la direction incidente $\vec{e}_i$. Puis, il subit une diffusion en $\vec{r}_n$ avant de se propager sur une ligne quasi-droite jusqu'à la position $\vec{r}_0$ suivant la direction d'observation $\vec{e}_s$. $\mathring{\rho}$ et $\rho$ représentent respectivement la distance parcourue entre l'entrée dans la particule au point $\vec{r}_n^{\,\text{in}}$ jusqu'à la position $\vec{r}_n$ et la distance parcourue depuis $\vec{r}_n$ jusqu'à la position $\vec{r}_0$.

En résumé, nous venons de calculer les contributions à l'intégrale $\mathcal{I}_q$ (voir Eq. III.157) qui correspondent à la superposition des $q+1$ régions de phases stationnaires. Plus précisément, il y a une contribution provenant d'une région de phase stationnaire, notée $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$, qui correspond à un rayon provenant de l'infini se propageant sur une ligne droite quasi-parallèle à la direction d'incidence $\vec{e}_i$ jusqu'à la position $\vec{r}_0$ (voir Fig. III.10). Les $q$ autres contributions proviennent des $q$ régions de phases stationnaires correspondant à un rayon se propageant depuis l'infini suivant la direction incidente $\vec{e}_i$ jusqu'à la position $\vec{r}_n$, puis suivant une ligne droite parallèle à la direction d'observation $\vec{e}_s$ jusqu'à la position $\vec{r}_0$.

Avant d'ajouter l'ensemble de ces contributions, il convient de s'assurer que chacune des $q+1$ régions sont distinctes. Cela est vérifié seulement si la position $\vec{r}_n$ ne se trouve pas dans la zone de phase stationnaire $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$. Autrement dit, il ne faut pas que la position $\vec{r}_n$ soit trop proche de la ligne droite provenant de l'infini allant jusqu'en $\vec{r}_0$ suivant la

direction $\vec{e}_i$. Compte tenu de cette remarque, il convient de retirer ce cas de l'intégrale (puisqu'il est déjà pris en compte dans la première zone de phase stationnaire). C'est ce qui est fait via la présence de la fonction de Heaviside qui assure que $\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$ dans l'intégrale $\mathcal{I}_q$ donnée par :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_q \approx & \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0)\frac{(z_0-z_0^{\text{in}})^q}{q!} \\ & + \sum_{n=1}^{q} \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[ \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{q-n} \frac{(z_n-z_n^{\text{in}})^{q-n}}{(q-n)!} H[\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)] \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} \right. \\ & \left. \times \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{n-1} \frac{\rho^{n-1}}{(n-1)!} \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_n) \right] d\vec{r}_n\end{aligned} \tag{III.172}$$

Afin d'obtenir une expression du champ $\mathscr{E}(\vec{r})$, on injecte Eq. III.172 dans le développement en série de Born du champ électrique total $\mathscr{E}(\vec{r})$ (voir Eq. III.156) :

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\vec{r}_0) = & \left[ 1 + \underbrace{\sum_{q=1}^{+\infty} [k_e^2(m_r^2-1)]^q \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \frac{(z_0-z_0^{\text{in}})^q}{q!}}_{=\Sigma} \right] \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) + \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[ \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_n) \right. \\ & \left. \times H[\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)] \underbrace{\sum_{q=1}^{+\infty}\sum_{n=1}^{q} [k_e^2(m_r^2-1)]^q \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{q-n} \frac{(z_n-z_n^{\text{in}})^{q-n}}{(q-n)!} \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{n-1} \frac{\rho^{n-1}}{(n-1)!}}_{=\Sigma'} \right] d\vec{r}_n\end{aligned} \tag{III.173}$$

La première somme, notée $\Sigma$, s'écrit en utilisant le développement en série entière de la fonction exponentielle, soit $\exp(u) = \sum_{k=0}^{+\infty} u^k$. Ainsi,

$$\Sigma = \sum_{q=0}^{+\infty} [k_e^2(m_r^2-1)]^q \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^q \frac{(z_0-z_0^{\text{in}})^q}{q!} = \exp\left[-ik_e\frac{m_r^2-1}{2}\left(z_0-z_0^{\text{in}}\right)\right] \tag{III.174}$$

Afin de calculer la somme double $\sum_{q=0}^{+\infty}\sum_{n=1}^{q}$ présente dans l'expression de la seconde somme, notée $\Sigma'$, on utilise l'identité sur les sommes doubles :

$$\sum_{q=0}^{+\infty}\sum_{n=1}^{q} u_{n,q-n} = \sum_{j=0}^{+\infty}\sum_{p=0}^{+\infty} u_{j,p} \tag{III.175}$$

En prenant $p = n-1$ et $j = q-n$, puis en utilisant le développement en série entière de la fonction exponentielle $\exp(u) = \sum_{k=0}^{+\infty} u^k$, la quantité $\Sigma'$ s'écrit

$$\begin{aligned}
\Sigma' &= \sum_{q=1}^{+\infty}\sum_{n=1}^{q}[k_e^2(m_r^2-1)]^q\left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{q-n}\frac{\mathring{\rho}^{q-n}}{(q-n)!}\left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{n-1}\frac{\rho^{n-1}}{(n-1)!} \\
&= k_e^2(m_r^2-1)\sum_{j=0}^{+\infty}[k_e^2(m_r^2-1)]^j\left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{j}\frac{\mathring{\rho}^j}{j!}\sum_{p=0}^{+\infty}[k_e^2(m_r^2-1)]^p\left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{p}\frac{\rho^p}{p!} \\
&= k_e^2(m_r^2-1)\exp\left[-ik_e\frac{m_r^2-1}{2}\mathring{\rho}\right]\exp\left[-ik_e\frac{m_r^2-1}{2}\rho\right] \\
&= k_e^2(m_r^2-1)\exp\left[-ik_e\frac{m_r^2-1}{2}(\mathring{\rho}+\rho)\right] \qquad \text{(III.176)}
\end{aligned}$$

En injectant Eqs. III.174 et III.176 dans Eq. III.173, le champ interne $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathscr{E}(\vec{r}_0) &= \exp\left[-ik_e\frac{m_r^2-1}{2}(z_0-z_0^{in})\right]\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) \\
&- \iiint_{\mathcal{V}_p} H[\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)]\frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho}[k_e^2(m_r^2-1)]\exp\left[-ik_e\frac{m_r^2-1}{2}(\mathring{\rho}+\rho)\right]\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_n)d\vec{r}_n
\end{aligned} \qquad \text{(III.177)}$$

Une interprétation physique de Eq. III.149 peut être donnée en utilisant les images de la diffusion. Le champ interne $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ peut être vu comme la somme de deux contributions. D'une part, le premier terme traduit les ondes se propageant dans la direction incidente $\vec{e}_i$ arrivant à la position $\vec{r}_0$ après avoir traversée la particule sur une distance $z_0 - z_0^{in}$ sans avoir subi une quelconque interaction (voir Fig. III.13). Ceci correspond au champ électrique incident déphasé et atténué le long de la longueur de traversée de la particule. D'autre part, le second terme traduit les ondes ayant subi une interaction (une diffusion) avec la particule à la position $\vec{r}_n$ avant d'atteindre la position $\vec{r}_0$ (voir Fig. III.13). Cette contribution correspond au champ incident atténué et déphasé le long de la longueur de traversée $\mathring{\rho}+\rho$ au sein de la particule et proportionnel au potentiel de diffusion $-k_e^2(m_r^2-1)$. Dans chacune des deux contributions, on remarque que le déphasage est proportionnel à $\frac{m_r^2-1}{2}$. La présence du carré rend difficile l'interprétation car il y a un produit entre l'indice réel $n_r$ et l'indice imaginaire $\kappa_r$ qui intervient. Toutefois, dans le domaine de la diffusion de la lumière, il est d'usage d'effectuer un développement limité de $m_r^2-1$ lorsque $m_r$ est proche de 1 en ne gardant que le premier ordre de la série de Taylor (c'est ce qui est fait dans l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye comme mentionné dans Sec. II.1.3.1). Plus précisément, on a $m_r^2 - 1 \approx 2(m_r-1)$ (et il n'y a plus de produit entre $n_r$ et $\kappa_r$). Dans le cadre de Schiff, les contrastes d'indice étant petits, nous allons voir que cette approximation est pertinente. Pour ce faire, remarquons que $m_r^2-1$ s'écrit sous la forme :

$$m_r^2 - 1 = 2(m_r-1) + (m_r-1)^2 \qquad \text{(III.178)}$$

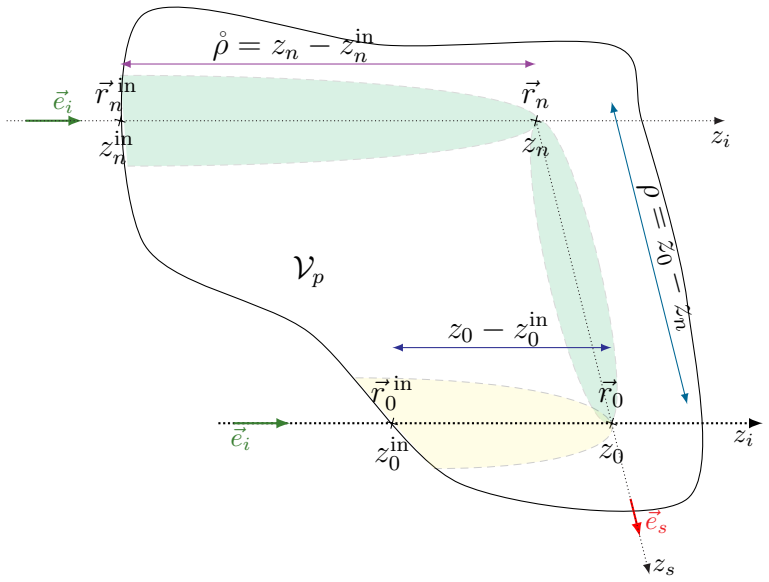



FIGURE III.13 – Illustration des deux contributions dans le cadre de l'approximation de Schiff.

En injectant Eq. III.178 dans l'expression du développement en série de Born Eq. III.156, il vient :

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\vec{r}_0) &= \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) + \sum_{q=1}^{+\infty} \left[k_e^2(2(m_r-1)+(m_r-1)^2)\right]^q \mathcal{I}_q \\ &= \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) + 2k_e^2(m_r-1)\mathcal{I}_1 + (m_r-1)^2\left[k_e^2\mathcal{I}_1 + 4k_e^4\mathcal{I}_2\right] \\ &\quad + (m_r-1)^3\left[4k_e^4\mathcal{I}_2 + 8k_e^6\mathcal{I}_3\right] + \cdots\end{aligned} \tag{III.179}$$

Or l'expression des intégrales $\mathcal{I}_q$ approchées par les phases stationnaires (Eq. III.172) correspond à un ordre de grandeur $\mathcal{I}_q \sim (\frac{a}{k_e})^q$, où l'on rappelle que $q$ correspond à l'ordre du développement. En utilisant le fait que $k_e a \gg 1$ (seconde hypothèse de l'approximation de Schiff), on en déduit que les termes d'ordre inférieurs à $(k_e a)^{q-1}$ contribuant à l'ordre $q$ du développement Eq. III.179 sont négligeables devant le terme en $(k_e a)^q$. Par exemple, si l'on regarde de plus près la contribution du terme d'ordre 3, le terme $4k_e^4\mathcal{I}_2 \sim 4k_e^2a^2$ est négligeable devant le terme $8k_e^6\mathcal{I}_3 \sim 8k_e^3a^3$. Ainsi, Eq. III.179, peut s'écrire :

$$\begin{aligned}\mathscr{E}(\vec{r}_0) &= \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) + 2k_e^2(m_r-1)\mathcal{I}_1 + 4k_e^4(m_r-1)^2\mathcal{I}_2 + 8k_e^6(m_r-1)^3\mathcal{I}_3 + \cdots \\ &= \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) + \sum_{q=1}^{+\infty}\left[2k_e^2(m_r-1)\right]^q\mathcal{I}_q\end{aligned} \tag{III.180}$$

Finalement, dans le cadre de l'approximation de Schiff, l'approximation $m_r^2 - 1 \approx 2(m_r-1)$ est complètement justifiée et cohérente vis à vis des calculs menés qui utilisent l'approximation des phases stationnaires. Ainsi, dans la suite, nous pouvons remplacé

$m_r^2 - 1$ par $2(m_r - 1)$, de sorte que le champ diffusé $\mathscr{E}_{sca}(\vec{r})$ (voir Eq. III.146) s'écrive :

$$\mathscr{E}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} \iiint_{\mathcal{V}_p} 2k_e^2 (m_r(\vec{r}_0) - 1) e^{ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \mathscr{E}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{III.181}$$

où $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ est donné à partir de Eq. III.177 en remplaçant $m_r^2 - 1$ par $2(m_r - 1)$ :

$$\begin{aligned} \mathscr{E}(\vec{r}_0) = &\exp\left[-ik_e(m_r - 1)(z_0 - z_0^{in})\right] \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) \\ &- \iiint_{\mathcal{V}_p} H[\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)] \frac{e^{-ik_e \rho}}{4\pi\rho} [2k_e^2(m_r - 1)] \exp\left[-ik_e(m_r - 1)(\mathring{\rho} + \rho)\right] \mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_n) d\vec{r}_n \end{aligned} \tag{III.182}$$

La formulation intégrale du champ électrique diffusé $\mathscr{E}_{sca}(\vec{r})$ exprimé à la position d'observation $\vec{r}$ vient d'être obtenue dans le cadre de l'approximation de Schiff. En vue de calculer les propriétés radiatives, nous allons, dans un premier temps, fournir la formulation intégrale de l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$. C'est l'objet de la section qui suit.

### III.6.2 Formulation intégrale de l'amplitude de diffusion

Par définition, l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ est donnée par :

$$\mathscr{E}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) \mathscr{E}_{0,inc} \tag{III.183}$$

En utilisant Eqs. III.183 et III.181, on en déduit l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi} \iiint_{\mathcal{V}_p} (m_r(\vec{r}_0) - 1) e^{ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \frac{\mathscr{E}(\vec{r}_0)}{\mathscr{E}_{0,inc}} d\vec{r}_0 \tag{III.184}$$

avec le champ électrique interne $\mathscr{E}(\vec{r}_0)$ fourni par Eq. III.182.

Dans la suite, nous distinguons le cas des petits angles de diffusion ($\vartheta_{sca} \lesssim \sqrt{\frac{2}{k_e \check{a}}}$) et le cas des grands angles de diffusion ($\vartheta_{sca} \gtrsim \sqrt{\frac{2}{k_e \check{a}}}$). La quantité $\check{a}$ étant une dimension caractéristique du diffuseur considéré. Cette distinction est intéressante dans la mesure où dans les cas des petits angles de diffusion, cela conduit à une simplification de la formulation intégrale. Nous verrons que l'intégrale sur le volume de la particule peut se ramener à une intégrale sur la surface projetée de la particule.

#### Amplitude de diffusion aux petits angles

Sous l'hypothèse des petits angles de diffusion ($\vartheta_{sca} \lesssim \sqrt{\frac{2}{k_e \check{a}}}$), le terme intégral du champ interne (voir Eq. III.182) fournit une contribution nulle. En effet, la position $\vec{r}_1$ se trouve dans la zone de phase stationnaire liée à la position $\vec{r}_0$, ce qui est exclue comme on

peut le constater via le second terme de Eq. III.182. Ainsi, aux petits angles, l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ (voir Eq. III.184) se réduit à :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} \exp\left[-ik_e(m_r-1)(z_0 - z_0^{in})\right] d\vec{r}_0 \quad \text{(III.185)}$$

où l'on a utilisé $\mathscr{E}_{inc}(\vec{r}_0) = \mathscr{E}_{0,inc} e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}$ dans Eq. III.182 (en tenant compte que du premier terme comme discuté ci-dessus). L'expression précédente se simplifie davantage en remarquant que, lorsque l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ est très petit (*i.e.*, $\vec{e}_s$ est proche de $\vec{e}_i$), le vecteur $\vec{e}_i - \vec{e}_s$ est proche du plan perpendiculaire à la direction incidente $\vec{e}_i$. Dans la base incidente $\mathcal{B}_i = [\vec{e}_i, \vec{e}_{\theta_i}, \vec{e}_{\varphi_i}]$, la quantité $\vec{e}_i - \vec{e}_s$ s'écrit :

$$\vec{e}_i - \vec{e}_s = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \cos\vartheta_{sca} \\ \sin\vartheta_{sca}\cos\phi_{sca} \\ \sin\vartheta_{sca}\sin\phi_{sca} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-\cos\vartheta_{sca} \\ -\sin\vartheta_{sca}\cos\phi_{sca} \\ -\sin\vartheta_{sca}\sin\phi_{sca} \end{pmatrix}$$

que l'on peut réécrire sous la forme suivante :

$$\vec{e}_i - \vec{e}_s = \begin{pmatrix} 2\sin^2\frac{\vartheta_{sca}}{2} \\ -2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\phi_{sca} \\ -2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\frac{\vartheta_{sca}}{2}\sin\phi_{sca} \end{pmatrix} \quad \text{(III.186)}$$

Or, par hypothèse, $\vartheta_{sca} \lesssim \sqrt{\frac{2}{k_e\check{a}}}$, soit $\frac{\vartheta_{sca}^2}{2} \lesssim (k_e\check{a})^{-1}$. Par ailleurs, la seconde condition de validité de l'approximation de Schiff nous permet d'écrire $k_e\check{a} \gg 1$ et par suite $\frac{\vartheta_{sca}^2}{2} \ll 1$. En effectuant un développement limité, il vient : $\cos\frac{\vartheta_{sca}}{2} \approx 1 - \frac{1}{4}\frac{\vartheta_{sca}^2}{2} \approx 1$ et $\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \approx \frac{\vartheta_{sca}}{2}$. Ceci nous permet alors de négliger la première composante ($\sin^2\frac{\vartheta_{sca}}{2} \approx 0$) et d'écrire $\vec{e}_i - \vec{e}_s$ sous la forme approchée suivante :

$$\vec{e}_i - \vec{e}_s \approx -2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}(\cos\phi_{sca}\vec{e}_{\theta_i} + \sin\phi_{sca}\vec{e}_{\varphi_i}) \quad \text{(III.187)}$$

En injectant Eq. III.187 dans Eq. III.185, puis en notant $\vec{e}_{\theta_i}\cdot\vec{r}_0 = x_0$ et $\vec{e}_{\varphi_i}\cdot\vec{r}_0 = y_0$, il vient :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r - 1) \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} e^{2i\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}(x_0\cos\phi_{sca} + y_0\sin\phi_{sca})} \times \int_{z_0^{in}}^{z_0^{out}} \exp\left[-ik_e(m_r-1)(z_0 - z_0^{in})\right] dz_0 dx_0 dy_0 \quad \text{(III.188)}$$

Après calcul de l'intégrale sur $z_0$, l'expression de l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ aux petits angles et pour une particule homogène dans le cadre de l'approximation de Schiff s'écrit :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{k_e}{2\pi} \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} e^{ik_e\vartheta_{sca}(x_0\cos\phi_{sca} + y_0\sin\phi_{sca})} \left[1 - e^{-ik_e(m_r-1)l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] d\vec{r}_0 \quad \text{(III.189)}$$

avec $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = z_0^{out} - z_0^{in}$ correspondant à la longueur de traversée au sein de la particule, c'est-à-dire à la longueur d'un rayon entre son entrée dans la particule et sa sortie intersectant la surface projetée $\mathcal{P}$ à la position $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ (voir Fig. III.14). Nous avons également considéré que l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ est suffisamment petit pour pouvoir remplacer $\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$ par son développement limité au premier ordre $\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \approx \frac{\vartheta_{sca}}{2}$.

## Amplitude de diffusion aux grands angles

Concentrons nous maintenant sur l'expression de l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ d'une particule homogène dans le cas des grands angles de diffusion $\vartheta_{sca} \gtrsim \sqrt{\frac{2}{k_e \breve{a}}}$. En injectant le champ total Eq. III.182 dans Eq. III.184, il vient :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} \exp\left[-ik_e(m_r-1)(z_0 - z_0^{in})\right] d\vec{r}_0$$
$$+ \frac{ik_e^4}{\pi}(m_r-1)^2 \iiint_{\mathcal{V}_p}\iiint_{\mathcal{V}_p} H[\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)] \frac{e^{-ik_e(\rho + \vec{e}_i\cdot\vec{r}_n - \vec{e}_s\cdot\vec{r}_0)}}{4\pi\rho} e^{-ik_e(m_r-1)(\rho + (z_n - z_n^{in}))} d\vec{r}_n d\vec{r}_0 \tag{III.190}$$

où l'on a posé , $\vec{\rho} = \vec{r}_n - \vec{r}_0$ et $\rho = \|\vec{r}_n - \vec{r}_0\|$. Nous avons également remplacé $\mathring{\rho}$ par $z_n - z_n^{in}$.

Contrairement au cas précédent, la contribution du terme intégral du champ interne (voir Eq. III.182) n'est plus négligeable dans la mesure où, aux grands angles, cette contribution fait notamment intervenir une zone de phase stationnaire distincte de $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$. Plus précisément, il existe deux zones de phases stationnaires associées au second terme de Eq. III.190. La première s'obtient en écrivant $\rho + \vec{e}_i\cdot\vec{r}_n - \vec{e}_s\cdot\vec{r}_0 = \rho + \vec{e}_i\cdot\vec{\rho} - (\vec{e}_s - \vec{e}_i)\cdot\vec{r}_0$. Cette zone de phase stationnaire correspond à $\vec{\rho}$ colinéaire à $-\vec{e}_i$ impliquant que la position $\vec{r}_n$ appartient à $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$ qui est justement exclue du domaine d'intégration puisqu'elle a déjà été prise en compte dans le premier terme de Eq. III.190. La seconde région de phase stationnaire s'obtient en écrivant $\rho + \vec{e}_i\cdot\vec{r}_n - \vec{e}_s\cdot\vec{r}_0 = \rho + \vec{e}_s\cdot\vec{\rho} - (\vec{e}_s - \vec{e}_i)\cdot\vec{r}_n$. Elle correspond cette fois-ci à $\vec{\rho}$ colinéaire à $-\vec{e}_s$ et elle est distincte de $\mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)$ dès lors que l'angle entre $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$ est suffisamment différent, c'est-à-dire pour des angles de diffusion tels que $\vartheta_{sca} \gtrsim \sqrt{\frac{2}{k_e\breve{a}}}$. En utilisant ce qui précède, nous réécrivons le second terme de $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ (voir Eq. III.190), notée $\mathcal{T}_2^S$, de sorte à faire apparaître la seconde zone de phase stationnaire :

$$\mathcal{T}_2^S = -\frac{ik_e^4}{\pi}(m_r-1)^2 \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_n} e^{-ik_e(m_r-1)(z_n - z_n^{in})}$$
$$\times \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} H[\vec{r}_n - \vec{\rho} \in \mathcal{V}_p] H[\vec{r}_n \notin \mathcal{V}^{ps}(\vec{r}_0)] \frac{e^{-ik_e(\rho + \vec{e}_s\cdot\vec{\rho})}}{4\pi\rho} e^{-ik_e(m_r-1)\rho} d\vec{\rho}}_{=\mathcal{I}_{\vec{\rho}}} d\vec{r}_n \tag{III.191}$$

où l'on a utilisé le changement de variable $d\vec{r}_0 = -d\vec{\rho}$. En appliquant les phases stationnaires (en menant un calcul similaire à celui réalisé Eqs. III.158-III.161), l'intégrale $\mathcal{I}_{\vec{\rho}}$ sur

$\vec{\rho}$, devient :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\vec{\rho}} &= \frac{2\pi i}{k_e}\frac{1}{4\pi}\int_0^{+\infty} H[\vec{r}_n - \rho\vec{e}_s \in \mathcal{V}_p]e^{-ik_e(m_r-1)\rho}d\rho \\ &= \frac{i}{2k_e}\int_0^{l^{out}(\vec{r}_n,\vec{e}_s)} e^{-ik_e(m_r-1)\rho}d\rho \\ &= \frac{1}{2k_e^2(m_r-1)}\left[1-e^{-ik_e(m_r-1)l^{out}(\vec{r}_n,\vec{e}_s)}\right]\end{aligned} \tag{III.192}$$

où $l^{out}(\vec{r}_n,\vec{e}_s)$ est la longueur du rayon partant de la position $\vec{r}_n$ et traversant la particule suivant la direction $\vec{e}_s$ jusqu'à sa sortie. En injectant Eq. III.192 dans III.191, le terme $\mathcal{T}_2^S$ s'écrit après avoir remplacé la variable muette $\vec{r}_n$ par $\vec{r}_0$ :

$$\mathcal{T}_2^S = \frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r-1)\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}e^{-ik_e(m_r-1)(z_0-z_0^{in})}\times\left[1-e^{-ik_e(m_r-1)l^{out}(\vec{r}_0,\vec{e}_s)}\right]d\vec{r}_0 \tag{III.193}$$

Enfin, en utilisant le résultat obtenu Eq. III.193, l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i,\vec{e}_s)$ (voir Eq. III.190) pour les angles de diffusion $\vartheta_{sca} \gtrsim \sqrt{\frac{2}{k_e\check{a}}}$ d'une particule homogène dans le cadre de l'approximation de Schiff s'écrit :

$$S(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r-1)\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}e^{-ik_e(m_r-1)[l^{in}(\vec{r}_0,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq})+l^{out}(\vec{r}_0,\vec{e}_s,\vec{e}_o,r_{eq}]}d\vec{r}_0 \tag{III.194}$$

où l'on a posé $l^{in}(\vec{r}_0,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) = z_0 - z_0^{in}$. Les longueurs de traversées $l^{in}$ et $l^{out}$ sont représentées dans Fig. III.14.

### III.6.3 Formulations intégrales des propriétés radiatives d'une particule isolée

À partir de l'expression de l'amplitude de diffusion que nous venons d'établir, nous allons fournir ici les formulations intégrales intégrales des propriétés radiatives pour une particule homogène isolée de taille $r_{eq}$ et d'orientation $\vec{e}_o$. D'une part, nous donnerons les sections efficaces d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$, d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ et de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$. D'autre part, nous donnerons la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ pour laquelle nous distinguerons le cas des petits et grands angles de diffusion.

**Sections efficaces.** La section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ est calculée à l'aide du théorème optique $-\frac{4\pi}{k_e}\mathfrak{R}e\, S(\vec{e}_i,\vec{e}_i)$ (voir Eq. I.29 dans Sec. I.2.4.3 en prenant $S_{11} = S_{22}$ compte tenu de l'hypothèse scalaire des champs) et en utilisant Eq. III.189 (avec $\vec{e}_s = \vec{e}_i$). L'expression ainsi obtenue est fournie par Eq. III.195. La section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ est obtenue à partir d'image physique. Chaque rayon qui traverse la particule sur une distance $l(\vec{r}_0)$ voit son amplitude décroître en $e^{-ik_e\kappa_r l(\vec{r}_0)}$ à cause du phénomène d'absorption. Par conséquent, la puissance absorbée par la particule lors de la traversée de cette

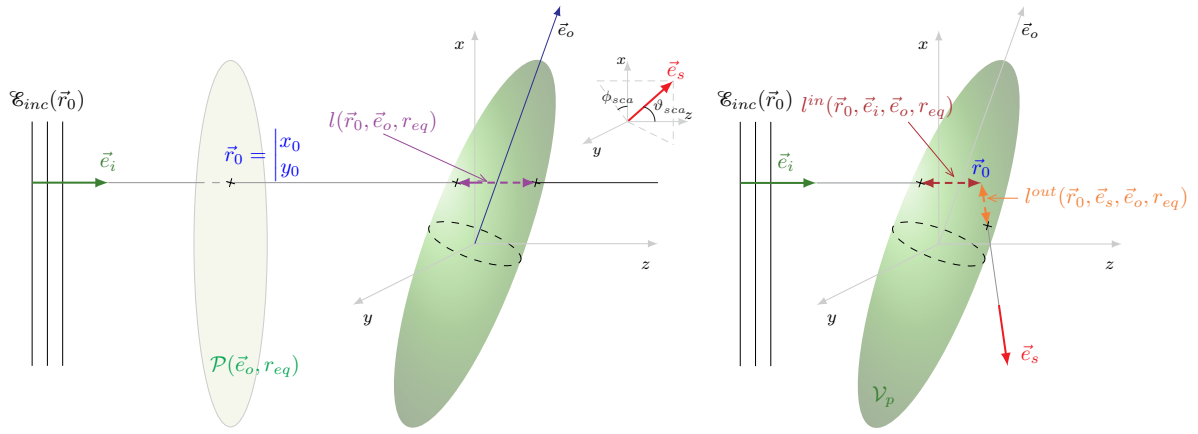



FIGURE III.14 – Représentation des quantités géométriques et notations intervenant dans le calcul de l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ dans le cadre de l'approximation de Schiff. Illustration d'une particule sphéroïdale de volume $\mathcal{V}_p$ soumise à une onde plane incidente $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ se propageant dans la direction $\vec{e}_i$. L'orientation de la particule est repérée à l'aide de la direction $\vec{e}_o$. La direction d'observation est repérée par le vecteur $\vec{e}_s$. Pour des petits angles de diffusion $\vartheta_{sca}$, on considère une position $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule dans le plan perpendiculaire à la direction $\vec{e}_i$ ($r_{eq}$ étant le rayon équivalent de la sphère en volume). $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ est la longueur de traversée de la particule, c'est-à-dire la distance entre la position pour laquelle le rayon entre dans la particule jusqu'à sa sortie (voir figure de gauche). Pour les grands angles de diffusion $\vartheta_{sca}$, on considère qu'un rayon entre dans la particule suivant la direction incidente $\vec{e}_i$, et subit une interaction en une position $\vec{r}_0$ au sein de la particule avant de poursuivre son chemin dans la direction $\vec{e}_s$. Par conséquent, $l^{in}(\vec{r}_0, \vec{e}_i, \vec{e}_o, r_{eq})$ est la distance parcourue par le rayon entre son entrée jusqu'à la position $\vec{r}_0$ et $l^{out}(\vec{r}_0, \vec{e}_s, \vec{e}_o, r_{eq})$ la distance parcourue depuis la position $\vec{r}_0$ jusqu'à sa sortie de la particule (voir figure de droite).

dernière est $1 - (e^{-ik_e\kappa_r l(\vec{r}_0)})^2$. Il ne reste plus qu'à intégrer sur l'ensemble des positions $\vec{r}_0$ de la surface projetée (voir Eq. III.196). Enfin, comme indiqué Eq. III.197, la section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ est obtenue par différence entre la section efficace d'extinction et d'absorption. En résumé, les expressions des sections efficaces sont :

$$\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) = 2 \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} \left[1 - e^{-k_e\kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right] d\vec{r}_0 \quad \text{(III.195)}$$

$$\hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} \left[1 - e^{-2k_e\kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] d\vec{r}_0 \quad \text{(III.196)}$$

$$\hat{\sigma}_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) - \hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq}) \quad \text{(III.197)}$$

**Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$.** Elle est obtenue en prenant le module carré de l'amplitude de diffusion, soit $\hat{W}_{sca} = |S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)|^2$. Ainsi, en utilisant Eq. III.189, la section efficace différentielle de diffusion pour les petits angles de diffu-

sion ($\vartheta_{sca} \lesssim \theta_l$) s'écrit :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_s,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) = \left(\frac{k_e}{2\pi}\right)^2 \left| \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} e^{ik_e\vartheta_{sca}(x_0\cos\phi_{sca}+y_0\sin\phi_{sca})} \left[1-e^{-ik_e(m_r-1)l(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq})}\right] d\vec{r}_0 \right|^2 \tag{III.198}$$

En utilisant Eq. III.194, elle s'écrit pour les grands angles de diffusion ($\vartheta_{sca} \gtrsim \theta_l$) :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_s,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) = \left(\frac{k_e^2}{2\pi}\right)^2 |m_r-1|^2 \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \times \left| \iiint_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})} e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} e^{-ik_e(m_r-1)\left[l^{in}(\vec{r}_0,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq})+l^{out}(\vec{r}_0,\vec{e}_s,\vec{e}_o,r_{eq})\right]} d\vec{r}_0 \right|^2 \tag{III.199}$$

avec $\theta_l = \sqrt{\frac{2}{k_e\breve{a}}}$, l'angle limite entre les petits et les grands angles. Eq. III.199 est une contribution majeure par rapport à l'approximation de la diffraction anomale (voir Sec. II.1.3.3) qui ne fournissait aucune expression pour les grands angles de diffusion. Toutefois, cette formulation intégrale pose des difficultés numériques, ce qui rend difficile son utilisation. Dans sa thèse, Jérémi Dauchet, a proposé une expression simplifiée de la section efficace différentielle de diffusion aux grands angles qui est tout à fait satisfaisante au regard de l'application des systèmes photoréactifs [Dauchet, 2012; Dauchet et al., 2015; Charon et al., 2016]. Elle est donnée par :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = \frac{A}{\sin^B(\vartheta_{sca}/2)} \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \tag{III.200}$$

où $A$ et $B$ sont deux paramètres du modèle dégradé aux grands angles de diffusion. Ils sont déterminés en utilisant, d'une part, la continuité de la section efficace différentielle de diffusion à l'angle limite $\theta_l$, et d'autre part, le fait que l'intégrale de la section efficace différentielle de diffusion sur l'angle solide total doit être égal à la section efficace.

## III.7 Conclusion

Ce chapitre a permis d'établir les formulations intégrales du champ électrique diffusé, de l'amplitude de diffusion et des propriétés radiatives dans le cadre de l'approximation de Born (voir Sec. III.4), du développement en série de Born (voir Sec. III.5) et de l'approximation de Schiff (voir Sec. III.6). Dans les trois chapitres suivants, en vue de résoudre ces formulations intégrales par la méthode de Monte Carlo, nous allons les réécrire sous une forme statistique permettant de concevoir les algorithmes de Monte Carlo. La question de la mise en œuvre de ces algorithmes sera également abordée. Dans la suite, pour des raisons pédagogiques, nous avons fait le choix de ne pas suivre l'ordre donné dans ce chapitre. Nous proposons plutôt de commencer avec l'approximation de Schiff pour laquelle

la conception des algorithmes de Monte Carlo est plus simple que ceux du modèle rigoureux. Nous poursuivrons avec l'approximation de Born qui ne posera pas de difficultés particulières. Enfin, nous terminerons avec le développement en série de Born qui, comme nous le verrons au chapitre VI, est plus délicat à traiter puisqu'il nous faudra notamment gérer un espace d'intégration infinie.

# CHAPITRE IV

# Approximation de Schiff

Ce chapitre est dédié à la résolution numérique de l'approximation de Schiff. Indépendamment du cadre de validité de cette approximation, nous allons mettre en place un ensemble de concepts, de techniques et d'outils liés à l'utilisation de la méthode de Monte Carlo. Nous détaillerons notamment la démarche pour concevoir un algorithme à partir de la formulation intégrale de la grandeur recherchée. Nous choisissons de présenter cette démarche sur l'approximation de Schiff car elle est plus simple que la solution exacte abordée au chapitre VI, tout en soulevant un ensemble de difficultés commune aux trois formulations étudiées dans ce manuscrit. Les solutions apportées dans ce chapitre en réponse à ces difficultés seront utilisées dans toute la suite du manuscrit. Nous mettrons aussi en avant les divers avantages de la méthode de Monte Carlo. D'une part, le formalisme intégral que nous utilisons pour concevoir nos algorithmes permet directement de traiter les distributions statistiques de taille, d'orientation et de forme des particules. D'autre part, grâce aux outils de la synthèse d'image, le traitement des géométries complexes n'est pas une difficulté lors de la mise en œuvre numérique de nos algorithmes. Ce dernier point sera présentée avec une attention toute particulière. Par ailleurs, nous montrerons comment il est possible, à partir d'un algorithme de Monte Carlo évaluant une grandeur, d'obtenir simultanément les sensibilités de cette grandeur par rapport à des paramètres. Ce type de calcul est très utile dès lors que l'on s'intéresse à l'optimisation d'un procédé [Dauchet, 2012; Farges et al., 2015] ou à la propagation de l'incertitude d'un paramètre sur une grandeur. Nous présenterons aussi l'utilisation d'une technique permettant de gérer une non-linéarité quadratique qui intervient dès lors que l'on s'intéresse aux calculs des propriétés radiatives. Une technique d'optimisation des algorithmes par réduction du domaine d'intégration sera également présentée, en vue d'améliorer la convergence numérique des calculs. Tous ces points vont être détaillés dans ce chapitre, ce qui nous permettra, d'une part, de faciliter la lecture dans les prochains chapitres, et d'autre part, de nous concentrer sur les difficultés spécifiques aux modèles qui seront étudiés. Il convient de noter que ce chapitre propose une manière d'aborder la méthode de Monte Carlo que nous retrouverons tout au long de ce manuscrit.

# IV.1 Conception des algorithmes par formulation intégrale

L'objet de cette première partie est de suivre une démarche pour construire des algorithmes à partir des formulations intégrales établies dans le chapitre précédent. Ici, la mise en œuvre pratique, c'est-à-dire la manière dont nous allons coder de tels algorithmes, n'est pas présentée. Elle fera l'objet de la seconde partie de ce chapitre (voir Sec. IV.2).

## IV.1.1 Sections efficaces

Dans cette section, nous concevons les algorithmes de Monte Carlo permettant d'évaluer la valeur des sections efficaces d'extinction, d'absorption et de diffusion. Les expressions mathématiques de ces grandeurs ont été établies au chapitre III pour une particule de forme, de taille et d'orientation données (voir Sec. III.6.3, Eqs. III.195-III.197) et sont rappelées ci-dessous :

$$\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} 2\left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right] d\vec{r}_0 \tag{IV.1}$$

$$\hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} \left[1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] d\vec{r}_0 \tag{IV.2}$$

$$\hat{\sigma}_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) - \hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.3}$$

où $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ est la surface projetée de la particule vue depuis la direction d'incidence et $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ est la longueur de traversée d'un rayon intersectant $\mathcal{P}$ au point $\vec{r}_0$ et traversant la particule en ligne droite (voir Fig IV.1). La surface projetée $\mathcal{P}$ et la longueur de traversée $l$ dépendent de la géométrie de la particule (forme, taille et orientation). La taille d'une particule est caractérisée par le rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume et son orientation par rapport à la direction d'incidence est caractérisée par le vecteur $\vec{e}_o$ contenant les trois angles d'Euler correspondants. Les algorithmes que nous développons dans la suite incluent les prises de moyennes sur les tailles, les orientations ainsi que les formes des particules au sein d'une suspension (voir hypothèse diffusion indépendante, Sec. I.2.5).

### IV.1.1.1 Section efficace d'extinction : construction détaillée d'un premier algorithme

**Particule de forme, de taille et d'orientation données.** Afin d'obtenir une description statistique de l'intégrale Eq. IV.1 qui soit compatible avec la méthode de Monte Carlo, nous introduisons une variable aléatoire position $\vec{R}_0$ dont le domaine de définition est la surface projetée $\mathcal{P}$ (le domaine d'intégration dans Eq. IV.1). $\vec{R}_0$ est une position

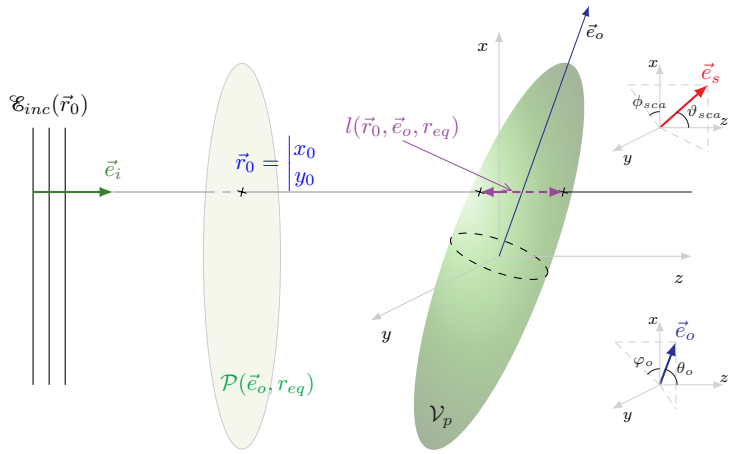



FIGURE IV.1 – Représentation des quantités géométriques et notations intervenant dans le cadre de l'approximation de Schiff. Illustration d'une particule sphéroïdale de volume $\mathcal{V}_p$ soumise à une onde plane incidente $\mathscr{E}_{inc}$ se propageant dans la direction $\vec{e}_i$. L'orientation de la particule est repérée à l'aide de la direction $\vec{e}_o$. La direction d'observation est repérée par le vecteur $\vec{e}_s$. Pour des petits angles de diffusion $\vartheta_{sca}$, on considère une position $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule dans le plan perpendiculaire à la direction $\vec{e}_i$ ($r_{eq}$ étant le rayon équivalent de la sphère en volume). $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ est la longueur de traversée de la particule, c'est-à-dire la distance entre la position pour laquelle le rayon entre dans la particule jusqu'à sa sortie.

aléatoire sur la surface projetée de la particule, distribuée selon $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. À ce stade, nous n'avons pas besoin de préciser la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ choisie pour $\vec{R}_0$ ; elle est seulement non-nulle pour toute position $\vec{r}_0 \in \mathcal{P}$. La variable aléatoire $\vec{R}_0$ va nous permettre de reformuler la section efficace d'extinction comme une espérance mathématique, ce qui est la condition pour une estimation par la méthode de Monte Carlo. Pour ce faire, cela revient à multiplier et à diviser l'intégrande dans Eq. IV.1 par la densité de probabilité arbitraire $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ :

$$\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) \frac{2\left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right]}{p_{R_0}(\vec{r}_0)} \tag{IV.4}$$

qui peut se réécrire

$$\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.5}$$

avec

$$w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = \frac{2\left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right]}{p_{R_0}(\vec{r}_0)} \tag{IV.6}$$

Nous n'avons bien évidemment pas changé la valeur de l'intégrale (nous avons simplement multiplié et divisé celle-ci par la même fonction non-nulle $p_{R_0}(\vec{r}_0)$), mais cette nouvelle formulation Eq. IV.5 s'interprète maintenant de manière statistique : $\hat{\sigma}_{ext}$ est l'espérance

mathématique de la variable aléatoire $W = w_{ext}(\vec{R}_0)$, où la fonction $w_{ext}$ (Eq. IV.6) de la variable aléatoire $\vec{R}_0$ est appelée **fonction poids** ou **poids de Monte Carlo**. La traduction de cette formulation intégrale en un algorithme de Monte Carlo évaluant $\hat{\sigma}_{ext}$ est directe (voir également l'organigramme Fig. IV.3) :

**Algorithme 1: Approximation de Schiff - Section efficace d'extinction - particule isolée**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule, selon la densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$.
- **Étape 2** : le poids pour cette réalisation de l'algorithme est calculé suivant la fonction poids $w_{ext}(\vec{r}_0)$ donnée par Eq. IV.6, après avoir évalué la longueur de traversée $l$ de la particule pour la position $\vec{r}_0$ échantillonnée à l'étape 1 ainsi que l'aire de la surface projetée $P(\vec{e}_o, r_{eq})$.

Cette procédure d'échantillonnage du poids est répétée $N$ fois : on parle de $N$ réalisations de l'algorithme. L'estimateur $\hat{\sigma}^{\star}_{ext}$ de la section efficace $\hat{\sigma}_{ext}$ est la moyenne des poids échantillonnés

$$\hat{\sigma}_{ext} \approx \hat{\sigma}^{\star}_{ext} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} w_{ext,j}$$

où l'indice $j = 1, 2, \cdots, N$ est le numéro de la réalisation, et l'estimateur $\mathrm{std}_{\hat{\sigma}^{\star}_{ext}}$ de l'erreur statistique commise est l'écart-type des poids

$$\mathrm{std}_{\hat{\sigma}^{\star}_{ext}} \approx \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} w_{ext,j}^2 - \left(\hat{\sigma}^{\star}_{ext}\right)^2} \tag{IV.7}$$

Pour un nombre de réalisations suffisamment grand, il y a $97,5\%$ de chance que la valeur de $\hat{\sigma}_{ext}$ soit située dans l'intervalle de largeur $2\mathrm{std}_{\hat{\sigma}^{\star}_{ext}}$ autour de $\hat{\sigma}^{\star}_{ext}$ (le quantile de la loi de Student est approximativement égale à 2 dès que $N = 10$). Il convient de préciser que plus le nombre de réalisations $N$ est grand, plus l'estimation de la grandeur sera précise. L'écart type associé à cette estimation diminue en $\frac{1}{\sqrt{N}}$ : multiplier $N$ par 100 conduit à diviser par 10 l'écart type. Ce comportement est représenté Fig. IV.2 où l'écart type est donné sous forme de barre d'erreur.

La manière avec laquelle nous venons de construire un algorithme évaluant $\hat{\sigma}_{ext}$ est une bonne illustration de notre pratique de la méthode de Monte Carlo. Cette pratique est à la base de l'ensemble des propositions du présent travail de thèse et nous la développerons tout au long de la suite du manuscrit. Elle se base sur l'existence d'une équivalence stricte entre tout algorithme de Monte Carlo et sa formulation intégrale. À chaque fois que nous proposerons un algorithme nous donnerons sa traduction en formulation intégrale et inversement, c'est le travail sur les formulations intégrales d'électromagnétisme

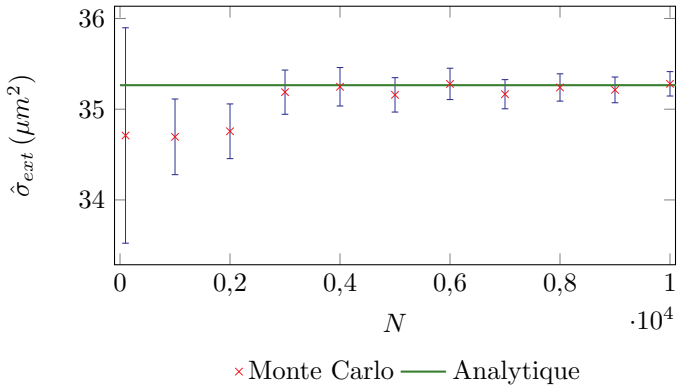



FIGURE IV.2 – Estimations de la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ et de son écart type associé (représenté avec les barres d'erreurs) en fonction du nombre de réalisations $N$, obtenues en résolvant l'approximation de Schiff par la méthode de Monte Carlo. La particule isolée considérée est de forme sphérique avec un paramètre de taille $x = 50$. L'échantillonnage de la position $\vec{r}_0$ est choisi uniforme. La solution calculée analytiquement est représentée en trait continu.

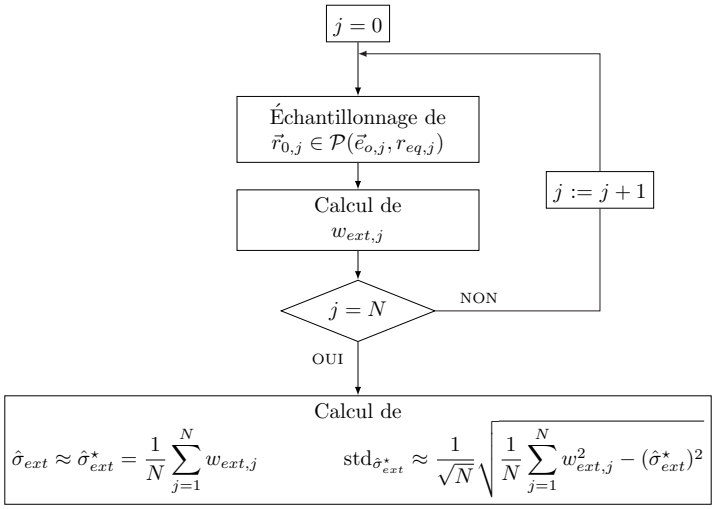



FIGURE IV.3 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ d'une particule isolée. Une position $\vec{r}_{0,j}$ est échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_{o,j}, r_{eq,j})$ de la particule. Puis, le poids de Monte Carlo $w_{ext,j}$ associé à la $j^{ème}$ réalisation est calculé. Cet algorithme est alors répété $N$ fois permettant ainsi d'obtenir une estimation $\hat{\sigma}^{\star}_{ext}$ de la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{\hat{\sigma}^{\star}_{ext}}$ de l'écart type associé.

établies au chapitre III qui nous mènera à proposer des algorithmes pour la résolution du problème de diffusion. Dans la présente section, nous nous concentrons exclusivement sur ce travail de conception des algorithmes. Lorsque l'on parle de mise en œuvre informatique, cela veut dire comment, en pratique, échantillonne-t-on des positions sur la surface projetée et calcule-t-on les longueurs de traversée. Cette mise en œuvre est reportée dans la section IV.2.

**Choix d'une fonction densité de probabilité pour la position aléatoire sur la surface projetée.** Pour l'instant, nous n'avons pas spécifié notre choix pour la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. En d'autre termes, nous n'avons pas précisé la loi statistique selon laquelle nous générons aléatoirement les positions sur la surface projetée de la particule. Ce choix n'influe pas sur la valeur de l'estimation vers laquelle l'algorithme converge puisque la valeur de l'intégrale est indépendante de $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ (voir Eq. IV.4). Il influe seulement sur la vitesse avec laquelle l'algorithme converge vers cette valeur, c'est-à-dire le nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une précision donnée (voir Fig. IV.2). La construction de la densité de probabilité optimale vis-à-vis de la convergence d'un algorithme de Monte Carlo sera détaillée au chapitre VII en se basant sur le principe de zéro-variance. Ici, nous prenons le choix le plus simple, à savoir une fonction densité de probabilité uniforme :

$$p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})} \tag{IV.8}$$

où $P(\vec{e}_o, r_{eq})$ est l'aire de la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$. Nous garderons ce choix dans l'ensemble du présent chapitre. En remplaçant $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ par son expression Eq. IV.8 dans Eq. IV.6, on obtient l'expression de la fonction poids pour un algorithme échantillonnant les positions de manière uniforme à l'**étape 1** (voir algorithme 1 ci-dessus ou Fig. IV.3) :

$$w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = 2P(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right] \tag{IV.9}$$

Nous rappelons que le comportement de l'algorithme obtenu est illustré Fig. IV.2.

**Ensemble de particules avec distributions de taille et d'orientation.** Nous venons d'écrire un algorithme de Monte Carlo évaluant la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ pour une particule de forme, de taille et d'orientation données. Au sein d'une suspension de particules, on observe généralement une statistique de taille et d'orientation des particules. Sous l'hypothèse de diffusion indépendante (voir Sec. I.2.5), la section efficace $\sigma_{ext}$ d'une telle suspension est simplement obtenue en prenant la moyenne de $\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq})$ sur la distribution $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$ des orientations $\vec{e}_o$ et sur la distribution $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ des rayons $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume (cette dernière caractérisant la taille de la particule) :

$$\sigma_{ext} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.10}$$

où les distributions $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$ et $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ sont des fonctions densités de probabilité connues [1]. Cette expression intégrale est directement une espérance mathématique : $\sigma_{ext}$ est l'espérance de la variable aléatoire $\hat{\sigma}_{ext}(\vec{E}_o, R_{eq})$ définie à partir des variables aléatoires orientation $\vec{E}_o$ et taille $R_{eq}$. Ici, nous n'avons donc pas à introduire de densités de probabilité

1. En pratique, dans le cadre de l'étude des systèmes photoréactifs, la distribution des orientations est généralement prise comme isotrope compte tenue de l'agitation nécessaire au mélange du procédé, mais notre travail ne postule aucune contrainte sur cette distribution. Toujours dans le cadre de l'étude des

arbitraires comme nous l'avions fait plus haut pour la position $\vec{R}_0$. Finalement, en injectant dans Eq. IV.10 l'expression établie pour $\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq})$ (voir Eq. IV.5), il vient :

$$\sigma_{ext} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.11}$$

Cette expression correspond à la formulation intégrale d'un algorithme de Monte Carlo estimant directement la section efficace moyennée sur les orientations et les tailles, sans passer par l'estimation de $\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq})$ pour un ensemble de tailles et d'orientations comme dans les méthodes déterministes. Nous utilisons ici une propriété de composition importante de l'opérateur espérance mathématique : l'espérance d'une espérance est une espérance. Ainsi, en prenant l'espérance de la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq})$ (elle-même formulée comme une espérance) sur l'orientation et la taille des particules, Eq. IV.11 garde la forme d'une espérance mathématique compatible avec une évaluation par la méthode de Monte Carlo. En traduisant chaque motif intégral dans Eq. IV.11 par la procédure d'échantillonnage correspondante, l'algorithme évaluant $\sigma_{ext}$ s'énonce :

**Algorithme 2: Approximation de Schiff - Section efficace d'extinction - distributions de taille et d'orientation**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ de la particule est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ (la taille de la particule est échantillonnée).
- **Étape 3** : l'orientation et la taille échantillonnées précédemment définissent la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule (voir Sec. IV.2). Une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée sur $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ selon $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ (voir Eq. IV.8).
- **Étape 4** : le poids est calculé suivant Eq. IV.6, après avoir évalué la longueur de traversée $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ et l'aire de surface projetée $P(\vec{e}_o, r_{eq})$ (voir Sec. IV.2).

systèmes photoréactifs, la distribution de taille $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ est accessible expérimentalement par analyse d'image de microscopie optique. L'ensemble de nos algorithmes peuvent être utilisés au choix,

— en travaillant directement avec l'histogramme des fréquences observé expérimentalement, dans ce cas $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ est constante par morceaux,

— ou alors à partir d'un modèle de la distribution de taille dont les paramètres sont identifiés à partir des données expérimentales. Dans ce cas, les spécialistes des systèmes photoréactifs retiennent généralement la distribution log-normale pour $p_{R_{eq}}(r_{eq})$, mais nos algorithmes sont compatibles avec toute autre distribution analytique (gaussienne, gamma, *etc.*).

La distribution à traiter n'influe que sur la manière d'échantillonner $\vec{e}_o$ et $r_{eq}$ et nous n'avons jamais rencontré de cas correspondant à une difficulté particulière jusqu'à présent.

Nous bénéficions ici d'un atout majeur de la méthode de Monte Carlo par rapport aux autres méthodes d'intégration numérique : sa convergence est indépendante de la dimension du domaine d'intégration. En effet, avec les méthodes de quadrature le nombre de nœuds sur lesquels l'intégrande doit être évaluée augmente rapidement avec la dimension du domaine (il augmente généralement selon une loi de puissance avec la dimension en exposant), ce qui mènerait ici à une augmentation significative des temps de calcul lors de l'ajout des intégrales sur les orientations (dimension 3) et sur les tailles (dimension 1). Cette difficulté est bien identifiée dans la littérature présentée au chapitre II. Avec la méthode de Monte Carlo, par contre, le nombre $N$ de réalisations nécessaires pour atteindre une précision donnée n'augmente pas avec la dimension du domaine d'intégration, puisque l'échantillonnage statistique couvre simultanément l'ensemble du domaine (dans l'algorithme ci-dessus, nous générons aléatoirement des triplets $(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{r}_0)$ qui balayent l'espace $8\pi^2\times]0,+\infty[\times\mathcal{P}$). Le nombre de réalisations nécessaires est seulement piloté par l'intégrale posant le plus de difficultés numériques : ici, l'intégrale sur la surface projetée $\mathcal{P}$, qui correspond aux oscillations les plus importantes de l'intégrande (voir la fonction cosinus dans la fonction poids Eq. IV.6 et Sec. VII.2.1 pour une analyse de l'impact des oscillations sur la convergence des algorithmes). Ainsi, l'échantillonnage statistique nécessaire à l'intégration sur $\mathcal{P}$ suffit pour couvrir la double intégration orientation/taille. L'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour intégrer numériquement les équations de l'électromagnétisme (ici sous l'approximation de Schiff) permet donc de traiter les statistiques de particules pour un coût CPU (*Central Processing Unit*) virtuellement nul. En pratique, nous observons que le temps de calcul est quasiment le même pour estimer les propriétés radiatives d'une suspension que pour estimer celles d'une particule d'orientation et de taille fixes.

**Ensemble de particules incluant une distribution de formes.** Le cas des particules homothétiques (ayant la même forme) distribuées selon une statistique de taille et d'orientation qui vient d'être traitée est celui que l'on rencontre le plus souvent dans la littérature. Toutefois, en pratique, de nombreuses suspensions (d'aérosols, d'hydrosols, ...) incluent des particules de formes différentes. Cette statistique de forme peut être :

- discrète, par exemple dans le cas d'un consortium de microorganismes, l'un sphéroïdal et l'autre cylindrique,
- ou continue, par exemple dans le cas d'une distribution de l'élongation de microorganismes cylindriques.

La prise en compte de cette distribution des formes de particules dans nos formulations intégrales, et donc dans nos algorithmes, ne pose aucune difficulté conceptuelle (la problématique de leur mise en œuvre informatique n'est quant à elle pas évidente et sera

abordée dans la section IV.2). On ajoute simplement l'intégrale correspondante en début d'expression :

$$\sigma_{ext} = \int_{\mathcal{D}_{\vec{G}}} d\vec{g}\, p_{\vec{G}}(\vec{g}) \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{g},\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_0 w_{ext}(\vec{r}_0,\vec{g},\vec{e}_o,r_{eq}) \tag{IV.12}$$

où $\vec{G}$ est la variable aléatoire caractérisant la forme des particules (par exemple, dans la section IV.2.1.2, $\vec{G}$ contiendra les paramètres d'une équation paramétrique décrivant la forme d'une particule sphéroïdale ou cylindrique), $\mathcal{D}_{\vec{G}}$ son domaine de définition et $p_{\vec{G}}(\vec{g})$ sa fonction densité de probabilité (c'est-à-dire la distribution des formes). La traduction de cette formulation intégrale donne un algorithme identique au précédent, dans lequel on rajoute simplement une étape préliminaire correspondant à l'échantillonnage d'une forme :

**Algorithme 3: Approximation de Schiff - Section efficace d'extinction - ensemble de particules avec distributions de forme, de taille et d'orientation**

- **Étape 1** : une forme $\vec{g}$ de particule est échantillonnée selon $p_{\vec{G}}(\vec{g})$.
- **Étape 2** : une orientation $\vec{e}_o$ de la particule est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 3** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0,+\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 4** : une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule.
- **Étape 5** : le poids est calculé suivant Eq. IV.6, après avoir évalué la longueur de traversée $l(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq})$ et l'aire de surface projetée $P(\vec{e}_o,r_{eq})$ (voir Sec. IV.2).

Cet algorithme a notamment été utilisé dans la thèse de Vincent Rochatte [Rochatte, 2016], qui a pu ainsi quantifier l'effet de la distribution des élongations de microalgues cylindriques sur la modélisation du fonctionnement d'un photobioréacteur (effet qui s'est avéré non-négligeable). Cet algorithme permet aussi de traiter le cas d'une distribution discrète. La densité de probabilité est alors une somme de distributions de Dirac et l'intégrale $\int_{\mathcal{D}_{\vec{G}}} d\vec{g}\, p_{\vec{G}}(\vec{g})$ devient une somme pondérée par les probabilités respectives $P_{\vec{g}_k}$ des $N_{\vec{G}}$ formes $\vec{g}_k$ présentes dans la suspension, où $k = 1, 2, \cdots N_{\vec{G}}$ et $\sum_{k=1}^{N_{\vec{G}}} P_{\vec{g}_k} = 1$ :

$$\sigma_{ext} = \sum_{k=1}^{N_{\vec{G}}} P_{\vec{g}_k} \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{g}_k,\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_0 w_{ext}(\vec{r}_0,\vec{g}_k,\vec{e}_o,r_{eq}) \tag{IV.13}$$

Lors de l'**étape 1** de l'algorithme, en pratique, on tirera aléatoirement une des $N_{\vec{G}}$ formes selon le jeu de probabilités $P_{\vec{g}_k}$.

Par souci de simplification de la présentation qui suit, nous ne considérons pas nécessairement la prise de moyenne sur une statistique de forme des particules. Mais comme ici, les algorithmes présentés dans la suite sont directement applicables aux suspensions avec distribution de forme : il suffira de leur ajouter une étape préliminaire correspondant à l'échantillonnage d'une forme.

#### IV.1.1.2 Un algorithme évaluant simultanément les sections efficaces d'extinction, d'absorption et de diffusion

La démarche qui vient d'être présentée dans la section précédente est directement appliquée aux deux autres sections efficaces.

**Formulation intégrale de la section efficace d'absorption.** La variable aléatoire position $\vec{R}_0$ est introduite en multipliant et en divisant l'intégrande dans Eq. IV.2 par la densité de probabilité uniforme $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P(\vec{e}_o, r_{eq})}$. Il vient

$$\hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.14}$$

avec la fonction poids

$$w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = P(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] \tag{IV.15}$$

Puis, la prise de moyenne sur les tailles et les orientations des particules donne :

$$\sigma_{abs} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.16}$$

**Formulation intégrale de la section efficace de diffusion.** Dans le cadre de l'approximation de Schiff, la section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ est obtenue en prenant la différence entre la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ et la section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ (voir Eq. IV.3) :

$$\hat{\sigma}_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) - \hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.17}$$

En remplaçant $\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq})$ et $\hat{\sigma}_{abs}(\vec{e}_o, r_{eq})$ par leurs formulations intégrales respectives Eqs. IV.5 et IV.14 dans l'expression ci-dessus, il vient

$$\hat{\sigma}_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) - \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.18}$$

Les deux intégrales dans cette équation portant sur le même domaine d'intégration (la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule) nous pouvons réécrire cette différence d'intégrales comme l'intégrale d'une différence :

$$\hat{\sigma}_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) w_{sca}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.19}$$

avec la fonction poids

$$w_{sca}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) - w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.20}$$

Puis, la prise de moyenne sur les tailles et les orientations des particules donne :

$$\sigma_{sca} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_{sca}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.21}$$

**L'algorithme.** Si l'on fait le point sur les formulations obtenues pour les trois sections efficaces Eqs. IV.11, IV.16 et IV.21, on remarque que celles-ci sont identiques ; seules les fonctions poids diffèrent. On peut alors écrire :

$$\sigma_k = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_k(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.22}$$

où l'indice $k$ fait référence soit à l'extinction ($ext$), à l'absorption ($abs$) ou à la diffusion ($sca$) et où les trois fonctions poids $w_k$ Eqs. IV.6, IV.15 et IV.20 sont rappelées ici :

$$w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = 2P(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right] \tag{IV.23}$$

$$w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = P(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] \tag{IV.24}$$

$$w_{sca}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) - w_{abs}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.25}$$

Nous avons vu que lors de la traduction d'une formulation intégrale en un algorithme de Monte Carlo, chaque motif intégral correspond à l'échantillonnage d'une variable aléatoire. Le fait que les formulations pour les trois sections efficaces soient ici identiques signifie que nous avons une même procédure d'échantillonnage permettant d'évaluer simultanément $\sigma_{ext}$, $\sigma_{abs}$ et $\sigma_{sca}$. Lors de l'étape finale de l'algorithme, il suffira de calculer trois fonctions poids (plutôt qu'une dans le cas de la section efficace d'extinction seule traitée à la section IV.1.1.1). Cet algorithme de Monte Carlo qui évalue simultanément les trois sections efficaces s'énonce de la manière suivante (voir également l'organigramme Fig. IV.4) :

**Algorithme 4: Approximation de Schiff - Sections efficaces**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ de la particule est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 3** : une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule.
- **Étape 4** : les fonctions poids $w_{ext}, w_{abs}$ et $w_{sca}$ sont calculées suivant les équations Eqs. IV.23, IV.24 et IV.25, après avoir évalué la longueur de traversée $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$.

Après avoir répété $N$ fois cet algorithme, les sections efficaces sont estimées par les trois moyennes $\sigma_k \approx \sigma_k^\star = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} w_{k,j}$ et les erreurs statistiques correspondantes sont évaluées par les trois écart-types $\mathrm{std}^\star_{\sigma_k} \approx \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} w_{k,j}^2 - (\sigma_k^\star)^2}$ (où $k = ext$, $k = abs$, $k = sca$). Le temps de calcul pour exécuter un algorithme de Monte Carlo est généralement principalement dédié à la procédure d'échantillonnage, tandis que le calcul du poids est peu chronophage. Ainsi, nous observons en pratique que le temps de calcul pour évaluer les trois sections efficaces avec l'algorithme ci-dessus est quasiment identique à celui pour évaluer l'extinction seule à la section IV.1.1.1.

Comme pour l'algorithme de la section efficace d'extinction (voir Sec. IV.1.1.1), l'algorithme ci-dessus peut directement être utilisé pour traiter les suspensions avec distribution des formes de particules. Pour cela, il suffit simplement d'ajouter une étape préliminaire correspondant à l'échantillonnage d'une forme.

### IV.1.2 Amplitude de diffusion aux petits angles de diffusion : un premier algorithme évaluant une grandeur complexe

Dans cette section nous concevons un algorithme de Monte Carlo évaluant l'amplitude de diffusion $S$ (qui est un nombre complexe dans le cadre de l'approximation de Schiff) pour les directions de diffusion $\vec{e}_s$ proches de la direction d'incidence $\vec{e}_i$. Son expression a été établie au chapitre III (voir Sec. III.6.2, Eq. III.189) :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} \frac{-k_e}{2\pi} e^{ik_e \vartheta_{sca}(x_0 \cos\varphi_{sca} + y_0 \sin\varphi_{sca})} \left[1 - e^{-ik_e(m_r - 1)l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] d\vec{r}_0 \quad \text{(IV.26)}$$

où les notations et définitions géométriques sont données Fig. IV.1. Cette expression a été établie pour une particule de forme, de taille et d'orientation données et nous n'avons

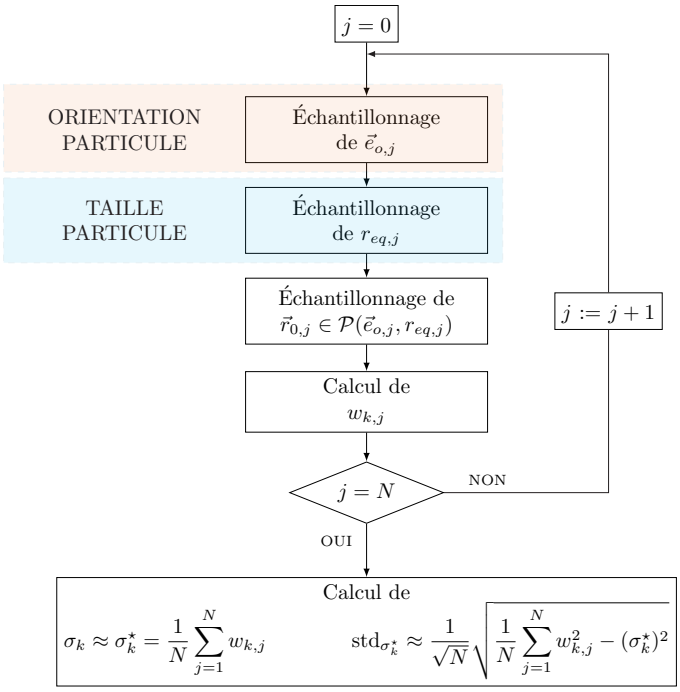



FIGURE IV.4 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, les sections efficaces $\sigma_k$ d'une suspension de particules homothétiques en tenant compte des prises de moyennes sur les orientations et les tailles des particules. L'indice $k$ fait référence à *ext* (extinction), à *abs* (absorption) ou à *sca* (diffusion). Une orientation $\vec{e}_{o,j}$ est échantillonnée, puis une taille $r_{eq,j}$ correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume est échantillonnée. Par la suite, une position $\vec{r}_{0,j}$ est échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_{o,j}, r_{eq,j})$ de la particule. Puis, les poids de Monte Carlo $w_{k,j}$ associés à la $j^{ème}$ réalisation sont calculés. Cet algorithme est alors répété $N$ fois permettant ainsi d'obtenir une estimation $\sigma_k^\star$ des sections efficaces ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{\sigma_k^\star}$ de l'écart type associé.

pas d'intérêt à évaluer la moyenne de $S$ sur ces paramètres ici, puisque l'amplitude de diffusion représente le champ électrique (voir Sec. I.2.5).

Comme dans Sec. IV.1.1.1, afin d'obtenir une formulation compatible avec la méthode de Monte Carlo, nous introduisons une variable aléatoire position $\vec{R}_0$ dont le domaine de définition est la surface projetée $\mathcal{P}$ et dont la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ est choisie uniforme ($p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = 1/P$, voir Eq. IV.8). Pour ce faire, nous multiplions et nous divisons l'intégrande dans Eq. IV.26 par $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ et il vient :

$$S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \iint_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) d\vec{r}_0 \tag{IV.27}$$

avec la fonction poids :

$$w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) = -\frac{k_e P}{2\pi} e^{ik_e \vartheta_{sca}(x_0 \cos\varphi_{sca} + y_0 \sin\varphi_{sca})} \left[1 - e^{-ik_e(m_r - 1)l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})}\right] d\vec{r}_0 \tag{IV.28}$$

L'algorithme de Monte Carlo évaluant Eq. IV.27 s'énonce (voir également Fig. IV.5) :

**Algorithme 5: Approximation de Schiff - Amplitude de diffusion $S$**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule.
- **Étape 2** : la fonction poids $w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$, donnée par Eq. IV.28, est calculée après avoir évalué la longueur de traversée $l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$.

Cet algorithme est identique au premier algorithme de la section IV.1.1.1 ; seule la fonction poids change. Par contre, l'originalité par rapport à ce que nous avons fait jusqu'à présent (et par rapport à ce que notre équipe de recherche avait rencontré avant cette thèse) est que la fonction poids est ici un nombre complexe. En effet, $S$ est une grandeur complexe (voir Introduction Sec. I.2.4). Si cela aura une influence significative sur l'optimisation des algorithmes à partir du principe de zéro-variance (voir Chap. VII), cette particularité ne pose néanmoins pas de difficulté pour évaluer cette grandeur complexe. En effet, de la même façon que l'algorithme présenté dans Sec. IV.1.1.2 évaluant simultanément les trois sections efficaces, l'algorithme ci-dessus évalue simplement deux grandeurs simultanément : la partie réelle $\mathfrak{Re}\, S$ et la partie imaginaire $\mathfrak{Im}\, S$ de la grandeur $S$. À chaque réalisation de l'algorithme, les deux fonctions poids $\mathfrak{Re}\, w_S(\vec{r}_0)$ et $\mathfrak{Im}\, w_S(\vec{r}_0)$ sont calculées. La moyenne et l'écart-type sur le premier ensemble de poids donne l'estimation $(\mathfrak{Re}\, S)^\star$ de $\mathfrak{Re}\, S$ ; la moyenne et l'écart-type sur le deuxième ensemble donne l'estimation $(\mathfrak{Im}\, S)^\star$ de $\mathfrak{Im}\, S$. Dans la suite du présent manuscrit, cette procédure sera implicite à chaque fois que nous énoncerons un algorithme de Monte Carlo évaluant une grandeur complexe.

### IV.1.3 Section efficace différentielle de diffusion : traitement des non-linéarités

Nous concevons ici un algorithme de Monte Carlo permettant d'évaluer la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ aux petits angles de diffusion (aux grands angles, les chercheurs du génie des systèmes photoréactifs utilisent une formule simplifiée analytique qui ne nécessite pas d'évaluation par Monte Carlo, voir Sec. III.6.2 dans Chap. III). La section efficace différentielle $\hat{W}_{sca}$ d'une particule isolée est définie comme le module carré de l'amplitude de diffusion $S$ :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = |S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)|^2 \tag{IV.29}$$

En injectant la formulation intégrale Eq. IV.27 de $S$ dans cette expression, nous obtenons :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \left| \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \right|^2 \tag{IV.30}$$

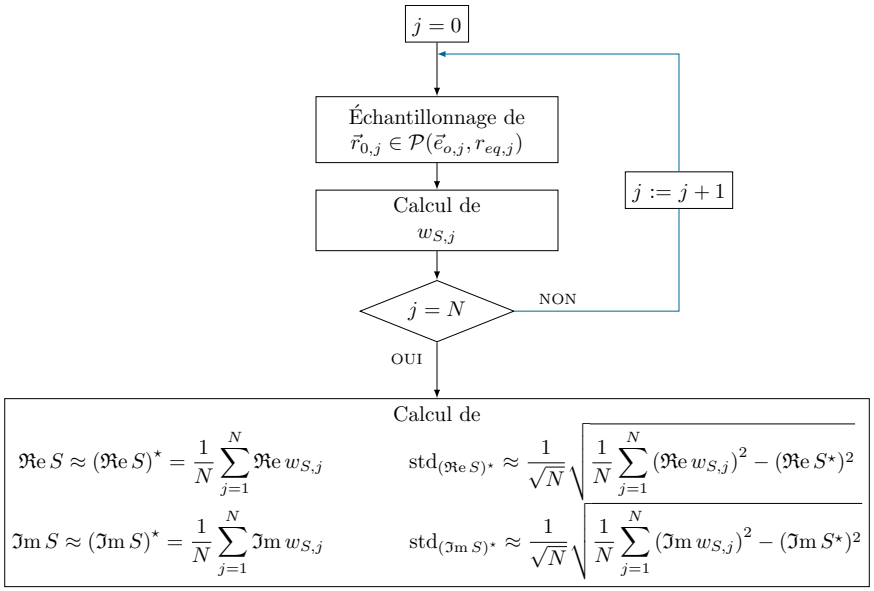



FIGURE IV.5 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, l'amplitude de diffusion $S$ (ou plus précisément, sa partie réelle $\mathfrak{Re}\, S$ et sa partie imaginaire $\mathfrak{Im}\, S$). Une position $\vec{r}_{0,j}$ est échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_{o,j}, r_{eq,j})$ de la particule. Puis, le poids de Monte Carlo $w_{S,j}$ associé à la $j^{ème}$ réalisation est calculé. Cet algorithme est alors répété $N$ fois permettant ainsi d'obtenir les estimations des parties réelle $(\mathfrak{Re}\, S)^\star$ et imaginaire $(\mathfrak{Im}\, S)^\star$ de l'amplitude de diffusion $S$ ainsi que les estimations $\mathrm{std}_{(\mathfrak{Re}\, S)^\star}$ et $\mathrm{std}_{(\mathfrak{Im}\, S)^\star}$ des écarts types associés.

où la quantité $w_S$ est donnée par Eq. IV.28. En tenant compte des prises de moyennes sur les statistiques des tailles et des orientations de particules, il vient :

$$W_{sca}(\vartheta_{sca}) = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \left| \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \right|^2 \tag{IV.31}$$

Dans le cas des sections efficaces d'extinction, d'absorption et de diffusion, nous avions bénéficié d'un avantage conséquent de la méthode de Monte Carlo lors de l'ajout des moyennes sur les distributions de taille et d'orientation. L'ajout de ces statistiques ce traduisait simplement par l'ajout de deux procédures d'échantillonnages en début d'algorithme (l'échantillonnage d'une taille et celle d'une orientation) et le temps de calcul n'augmentait pas en comparaison avec celui pour une particule de taille et d'orientation fixées. Nous avions combiné les espaces d'intégration sur l'orientation, la taille et la position de la surface projetée, afin de les balayer simultanément au sein d'une seule procédure d'échantillonnage (l'algorithme évaluant $\sigma_{ext}$ consiste à générer aléatoirement des triplets $(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{r}_0)$). Mais cette propriété est limitée aux combinaisons linéaires d'espaces d'intégration, comme dans Eq. IV.11. Par conséquent, elle ne s'applique pas directement ici à cause de la non linéarité quadratique du module carré. En effet, dans le cas de la section efficace d'extinction nous avons utilisé le fait que l'espérance d'une espérance est

elle même une espérance. Ici, Eq. IV.31 n'est pas une espérance mathématique compatible avec une évaluation directe par Monte Carlo : l'espérance du module carré d'une espérance n'est pas une espérance. Sans un travail supplémentaire sur cette formulation intégrale, l'évaluation de $W_{sca}(\vartheta_{sca})$ demanderait :

1. d'échantillonner $M$ configurations taille/orientation de la particule (disons un million),
2. d'évaluer l'amplitude de diffusion $S$ pour chacune de ces configurations en lançant $N$ réalisations de l'algorithme présenté à la section IV.1.2 (disons un million de réalisations pour chaque configuration),
3. de prendre le module carré de $S$ pour chacune des configurations,
4. et enfin d'évaluer $W_{sca}(\vartheta_{sca})$ comme la moyenne des modules carré de $S$.

En procédant de la sorte, $M \times N$ réalisations seraient nécessaires, ce qui entraînerait un temps de calcul $M$ fois plus élevé pour évaluer $W_{sca}(\vartheta_{sca})$ que celui pour évaluer $S$. De plus, le résultat serait biaisé à cause de l'incertitude sur $S$ pour chaque configuration. Nous perdrions ainsi les avantages de la méthode de Monte Carlo présentés à la section IV.1.1.2 pour le calcul des sections efficaces.

Comme annoncé dans Sec. II.2, nous utilisons dans ce travail de thèse une technique qui est présentée dans [Dauchet et al., 2016a; Dauchet, 2012] afin de traiter la non linéarité quadratique (module carré) qui intervient en électromagnétisme dans les grandeurs énergétiques et donc dans les propriétés radiatives. Ici, cette technique consiste à réécrire le module carré de l'intégrale sur la surface projetée $\mathcal{P}$ comme :

$$
\begin{aligned}
&\left| \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \right|^2 \\
&\quad = \mathfrak{Re}^{\,2} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) + \mathfrak{Im}^{\,2} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \\
&= \mathfrak{Re} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \mathfrak{Re} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}) \\
&\qquad + \mathfrak{Im} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \mathfrak{Im} \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}) \\
&\quad = \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 \Big[ \mathfrak{Re}\left(p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})\right) \mathfrak{Re}\left(p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})\right) \\
&\qquad\qquad + \mathfrak{Im}\left(p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})\right) \mathfrak{Im}\left(p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})\right) \Big]
\end{aligned}
\tag{IV.32}
$$

Lors du passage de la première égalité à la seconde, nous avons introduit deux variables aléatoires positions $\vec{R}_1$ et $\vec{R}_2$ indépendantes et identiquement distribuées, parentes de la variables aléatoire $\vec{R}_0$ : les fonctions densités de probabilité $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)$ et $p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)$ pour les positions $\vec{R}_1$ et $\vec{R}_2$ sont identiques à $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Ces dernières étant toujours purement réelles,

elles peuvent sortir des signes $\mathfrak{Re}$ et $\mathfrak{Im}$ de sorte que Eq. IV.32 s'écrive :

$$\begin{aligned}\left| \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_S(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \right|^2 \\ = \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \Big[ \mathfrak{Re}\, w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \mathfrak{Re}\, w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}) \\ + \mathfrak{Im}\, w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \mathfrak{Im}\, w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}) \Big]\end{aligned} \tag{IV.33}$$

Ainsi, en injectant Eq. IV.33 dans Eq. IV.31, la formulation intégrale de Monte Carlo de la section efficace différentielle $W_{sca}$ est donnée par :

$$\begin{aligned}W_{sca}(\vec{e}_s, \vec{e}_i, \vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\end{aligned} \tag{IV.34}$$

avec le poids de Monte Carlo donné par :

$$\begin{aligned}w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \mathfrak{Re}\, w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \mathfrak{Re}\, w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}) \\ + \mathfrak{Im}\, w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \mathfrak{Im}\, w_S(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})\end{aligned} \tag{IV.35}$$

Nous avons donc contourné le verrou de la non linéarité en augmentant la dimension du domaine d'intégration, ce qui ne pose pas de difficulté conceptuelle puisque le convergence de la méthode de Monte Carlo est indépendante de cette dimension. Au lieu d'intégrer sur $\mathcal{P}$, on intègre sur $\mathcal{P} \times \mathcal{P}$. Algorithmiquement, là où nous échantillonnions une position $\vec{r}_0$, nous aurons à échantillonner deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$. L'algorithme de Monte Carlo correspondant à la formulation intégrale Eq. IV.34 est (voir également Fig. IV.6) :

**Algorithme 6: Approximation de Schiff - Section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 3** : une première position $\vec{r}_1$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule.

- **Étape 4** : une seconde position $\vec{r}_2$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule.
- **Étape 5** : le poids de Monte Carlo $w$ est calculé suivant Eq. IV.35 (où Eqs. IV.37 et IV.39), et après avoir évalué les longueurs de traversées $l(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})$ et $l(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})$.

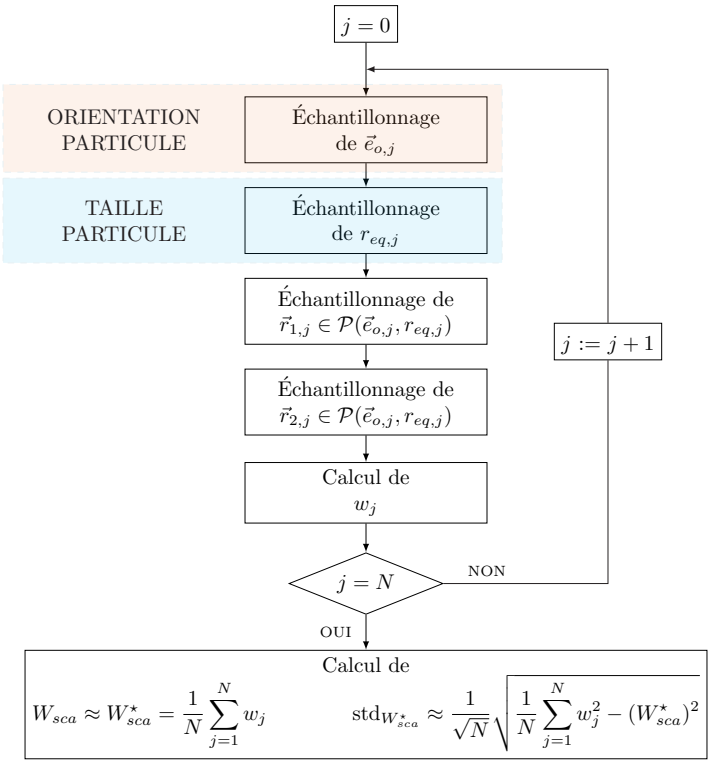



FIGURE IV.6 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ d'une suspension de particules homothétiques en tenant compte des prises de moyennes sur les orientations et les tailles des particules. Une orientation $\vec{e}_{o,j}$ est échantillonnée, puis une taille $r_{eq,j}$ correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume est échantillonnée. Par la suite, une première position $\vec{r}_{1,j}$, puis une seconde position $\vec{r}_{2,j}$ sont échantillonnées sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_{o,j}, r_{eq,j})$ de la particule. Puis, le poids de Monte Carlo $w_j$ associé à la $j^{ème}$ réalisation est calculé. Cet algorithme est alors répété $N$ fois permettant ainsi d'obtenir une estimation $W^{\star}_{sca}$ de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{W^{\star}_{sca}}$ de l'écart type associé.

Afin de travailler par la suite avec la formulation intégrale de $W_{sca}$, il est intéressant de réécrire la fonction poids Eq. IV.35. En injectant Eq. IV.28 de $w_S$ dans Eq. IV.35 et en posant la fonction

$$\begin{aligned} y(\vec{r}_1) \equiv y(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) &= \frac{w_S(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})}{P(\vec{e}_o, r_{eq})} \frac{2\pi}{k_e} \\ &= -e^{ik_e \vartheta_{sca}(x_0 \cos\varphi_{sca} + y_0 \sin\varphi_{sca})} \left[1 - e^{-ik_e(m_r-1)l(\vec{r}_0)}\right] \end{aligned} \tag{IV.36}$$

on obtient :

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 \left[\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2)\right] \tag{IV.37}$$

Puis en introduisant les fonctions

$$\begin{aligned} \Gamma(\vec{r}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) &= k_e \vartheta_{sca}(x \cos\phi_{sca} + y \cos\phi_{sca}) \\ \beta_r(\vec{r}) &= k_e(n_r - 1) l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq}) \\ \beta_i(\vec{r}) &= k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq}) \end{aligned} \tag{IV.38}$$

il vient :

$$\begin{aligned} &\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2) = \\ &\quad \cos\left(\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\right) \left[1 + e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \cos(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2))\right. \\ &\qquad \left. - e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \cos\beta_r(\vec{r}_1) - e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \cos\beta_r(\vec{r}_2)\right] \\ &\quad + \sin\left(\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\right) \left[e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \sin(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2))\right. \\ &\qquad \left. - e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \sin\beta_r(\vec{r}_1) + e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \sin\beta_r(\vec{r}_2)\right] \end{aligned} \tag{IV.39}$$

### IV.1.4 Optimisation d'un algorithme par réduction du domaine d'intégration

Lorsque nous mettons en œuvre un algorithme de Monte Carlo évaluant la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ (voir Eq. IV.34), nous sommes confrontés à des difficultés de convergence numérique. Ces difficultés, dues à d'importantes oscillations de la fonction poids Eq. IV.37, sont principalement liées à la prise de moyenne sur l'orientation des particules. Pour améliorer la convergence de l'algorithme, nous proposons d'utiliser une technique de réduction de variance qui consiste à réduire le domaine d'intégration en cherchant à extraire une solution analytique de l'intégrale qui est la principale source de variance (ici celle liée à l'orientation des particules) [Dunn and Shultis, 2012].

**Orientation d'une particule.** De manière générale, l'orientation $\vec{e}_o$ d'une particule est donnée à l'aide des trois angles d'Euler, notés $\theta_o, \varphi_o, \gamma_o$ et respectivement définis sur $[0, \pi]$, $[0, 2\pi]$ et $[0, 2\pi]$ (voir Fig. IV.7). En pratique, échantillonner une orientation revient

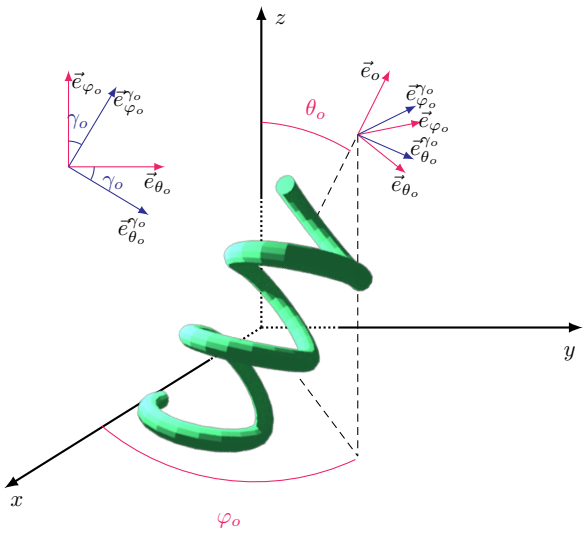



FIGURE IV.7 – Définition des angles d'Euler $(\theta_o, \varphi_o, \gamma_o)$ pour l'orientation d'une particule.

à échantillonner une direction $\vec{\omega}_o$ définie par les angles $\theta_o$ et $\varphi_o$ ainsi qu'un troisième angle $\gamma_o$ correspondant à la rotation de la particule autour de $\vec{\omega}_o$. De façon très courante (et ce sera le cas ici), l'échantillonnage de la direction $\vec{\omega}_o$ est prise isotrope. Dans ce cas, la distribution des directions s'écrit $p_{\vec{\Omega}_o}(\vec{\omega}_o) = \frac{1}{4\pi}$ et nous avons la relation :

$$\begin{aligned} p_{\vec{\Omega}_o}(\vec{\omega}_o) d\vec{\omega}_o &= p_{\vec{\Omega}_o}(\vec{\omega}_o) \sin\theta_o d\theta_o d\varphi_o \\ &= \frac{\sin\theta_o}{4\pi} d\theta_o d\varphi_o \\ &= \underbrace{\frac{1}{2\pi}}_{p_{\Phi_o}(\varphi_o)} \underbrace{\frac{\sin\theta_o}{2}}_{p_{\Theta_o}(\theta_o)} d\theta_o d\varphi_o \end{aligned}$$

Ainsi pour une distribution isotrope, nous avons :

$$p_{\Theta_o}(\theta_o) = \frac{\sin\theta_o}{2} \tag{IV.40}$$

$$p_{\Phi_o}(\varphi_o) = \frac{1}{2\pi} \tag{IV.41}$$

où le terme $\sin\theta_o$ provient de l'élément différentiel en coordonnées sphériques. Puisque la particule n'est pas nécessairement à symétrie de révolution, il est nécessaire d'introduire une distribution des angles $\gamma_o$ que l'on choisit uniforme sur $[0, 2\pi]$, soit

$$p_{\Gamma_o}(\gamma_o) = \frac{1}{2\pi} \tag{IV.42}$$

C'est d'ailleurs avec ce troisième angle (et avec ce choix de distribution) que nous sommes en mesure d'écrire $8\pi^2$ pour le domaine d'intégration de l'intégrale sur les orientations.

En résumé, l'intégration sur les orientations se fait de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) &\equiv \int_0^{2\pi} d\gamma_o p_{\Gamma_o}(\gamma_o) \int_{4\pi} d\vec{\omega}_o p_{\vec{\Omega}_o}(\vec{\omega}_o) \\ &\equiv \int_0^{2\pi} d\gamma_o p_{\Gamma_o}(\gamma_o) \int_0^{\pi} d\theta_o p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{2\pi} d\varphi_o p_{\Phi_o}(\varphi_o)\end{aligned} \tag{IV.43}$$

Dans notre étude, on constate que prendre la moyenne sur l'angle $\varphi_o$ de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ est équivalent à prendre la moyenne sur l'angle [2] $\phi_{sca}$. Par conséquent, l'intégration sur les orientations d'une particule se fait plutôt de la façon suivante :

$$\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \equiv \int_0^{\pi} d\theta_o p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{2\pi} d\gamma_o p_{\Gamma_o}(\gamma_o) \int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \tag{IV.44}$$

où la fonction densité de probabilité $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca})$ est choisie uniforme :

$$p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = \frac{1}{2\pi} \tag{IV.45}$$

Le fait d'avoir choisi une intégration sur l'angle $\phi_{sca}$ plutôt que $\varphi_o$ n'est pas anodin. En effet, sous l'hypothèse que $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca})$ soit uniforme (ce sera le cas), l'intégrale sur les $\phi_{sca}$ est analytique. C'est l'objet du paragraphe suivant.

**Solution analytique de l'intégration sur $\phi_{sca}$ de $W_{sca}$.** En observant Eqs. IV.37 à IV.39, on constate que la dépendance de $W_{sca}$ à l'angle $\phi_{sca}$ n'intervient que dans le terme $\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ :

$$\begin{aligned}\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s) &= k_e \vartheta_{sca} \left[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}\right] \\ &= k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\| \sin(\phi_{sca} - \phi_0)\end{aligned} \tag{IV.46}$$

où l'on a posé, pour des raisons de lisibilité, $\|\Delta\vec{r}\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$ et $\phi_0 = \text{atan}\left(-\frac{x_1 - x_2}{y_1 - y_2}\right)[\pi]$.

Dans la suite, nous allons voir que l'intégrale sur l'angle $\phi_{sca}$ de la grandeur $W_{sca}$ est analytique, permettant ainsi de réduire la dimension du domaine d'intégration. Pour ce faire, notons $\mathcal{I}_{\phi_{sca}}$ l'intégrale sur les $\phi_{sca}$ qui intervient lors du calcul de l'intégrale $W_{sca}$ :

$$\mathcal{I}_{\phi_{sca}} = \int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \left[\Re\mathrm{e}\, y(\vec{r}_1)\Re\mathrm{e}\, y(\vec{r}_2) + \Im\mathrm{m}\, y(\vec{r}_1)\Im\mathrm{m}\, y(\vec{r}_2)\right] \tag{IV.47}$$

où la quantité $\Re\mathrm{e}\, y(\vec{r}_1)\Re\mathrm{e}\, y(\vec{r}_2) + \Im\mathrm{m}\, y(\vec{r}_1)\Im\mathrm{m}\, y(\vec{r}_2)$ est donnée par Eq. IV.39. En particulier, ce terme fait intervenir les fonctions sinus et cosinus de la quantité $\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) -$

2. $\phi_{sca}$ représente l'angle ente le plan formé par $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_z$ et celui formé par $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$. Pour simplifier, supposons que $\vec{e}_i = \vec{e}_z$. Ainsi, $\phi_{sca} = \varphi_s$ où $\varphi_s$ est l'angle entre $\vec{e}_x$ et le projetée de $\vec{e}_s$ sur le plan $xy$. On constate alors que prendre la moyenne sur $\varphi_o$ est équivalent à prendre celle sur $\varphi_s = \phi_{sca}$.

$\Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ explicitée par Eq. IV.46. Par conséquent, l'intégrale sur les $\phi_{sca}$ nécessite de calculer d'une part

$$\int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \sin\left[\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\right]$$

et d'autre part

$$\int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \cos\left[\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\right].$$

Ces intégrales sont analytiques si l'on prend $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = \frac{1}{2\pi}$ (ce que nous faisons dans la suite). En utilisant ce qui précède et Eq. IV.46, puis en effectuant le changement de variable $\mathring{\phi}_{sca} = \phi_{sca} - \phi_0$, ces intégrales s'écrivent

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) &\sin\left[\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\right] \\ &= \int_0^{2\pi} d\mathring{\phi}_{sca} \frac{1}{2\pi} \sin\left[k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\| \sin\mathring{\phi}_{sca}\right] \\ &= 0\end{aligned} \tag{IV.48}$$

et

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) &\cos\left[\Gamma(\vec{r}_1, \vec{e}_i, \vec{e}_s) - \Gamma(\vec{r}_2, \vec{e}_i, \vec{e}_s)\right] \\ &= \int_0^{2\pi} d\mathring{\phi}_{sca} \frac{1}{2\pi} \cos\left[k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\| \sin\mathring{\phi}_{sca}\right] \\ &= J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|)\end{aligned} \tag{IV.49}$$

où $J_0()$ est la fonction de Bessel cylindrique régulière d'ordre 0. Ainsi, en utilisant Eqs. IV.48, IV.49 et IV.39, l'intégrale $\mathcal{I}_{\phi_{sca}}$ (Eq. IV.47) est analytique et s'écrit :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\phi_{sca}} = J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \big[1 &+ e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \cos(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &- e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \cos\beta_r(\vec{r}_1) - e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \cos\beta_r(\vec{r}_2)\big]\end{aligned} \tag{IV.50}$$

Nous venons d'obtenir une expression analytique de l'intégrale sur $\phi_{sca}$, ce qui a été possible en prenant $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = \frac{1}{2\pi}$. Autrement dit, nous venons de réduire la dimension du domaine d'intégration (l'intégrale sur $\phi_{sca}$ disparaît). Cela est un réel avantage : nous venons d'éliminer le domaine d'intégration responsable de la principale source de variance. Par conséquent, la convergence de l'algorithme est améliorée.

**Formulation intégrale.** En tenant compte de ce qui précède, la formulation intégrale de Monte Carlo de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ s'écrit maintenant :

$$\begin{aligned}W_{sca}(\vartheta_{sca}) = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \breve{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vartheta_{sca})\end{aligned} \tag{IV.51}$$

avec $\check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, \gamma_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ la fonction poids donnée par (l'accent $\check{}$ signifie qu'il s'agit de la fonction poids obtenue après la réduction du domaine d'intégration) :

$$\check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vartheta_{sca}) = \left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \times \left[1 + e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \cos(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) - e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \cos\beta_r(\vec{r}_1) - e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \cos\beta_r(\vec{r}_2)\right] \tag{IV.52}$$

Il convient de remarquer que nous continuons à écrire l'intégrale sur l'orientation $\vec{e}_o$ comme $\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$ même si la fonction poids $\check{w}$ ne dépend plus de l'angle $\phi_{sca}$. Cette écriture est toujours possible dans la mesure où une fonction densité de probabilité est normalisée : $\int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = 1$. Ainsi, que cette intégrale ($\int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca})$) soit présente ou non, cela ne change en aucun cas le résultat final. D'un point de vue algorithmique, cela revient à échantillonner les trois angles $(\theta_o, \phi_{sca}, \gamma_o)$, même si $\phi_{sca}$ ne sert pas (on affinera cette discussion lors de la mise en œuvre de l'algorithme Sec. IV.2) .

### IV.1.5 Fonction cumulée de la section efficace différentielle de diffusion

Lorsque l'on cherche à résoudre l'équation de transfert radiatif par la méthode de Monte Carlo, il est souvent utilisé la cumulée de la section efficace différentielle de diffusion $CW_{sca}$ plutôt que $W_{sca}$ elle même [Dauchet et al., 2013]. Elle est définie par :

$$CW_{sca}(\vartheta_{sca}) = 2\pi \int_0^{\vartheta_{sca}} \sin\theta W_{sca}(\theta) d\theta \tag{IV.53}$$

D'un point de vue algorithmique, l'algorithme évaluant la cumulée $CW_{sca}$ revient seulement à rajouter un échantillonnage sur un angle $\theta$ à celui évaluant $W_{sca}$. On pourrait se contenter d'un tel algorithme. Cependant, en suivant la même logique que ce qui a été fait dans la section précédente (sous l'hypothèse $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = \frac{1}{2\pi}$), on constate que l'angle de diffusion $\theta$ intervient seulement dans l'expression de la fonction poids $\check{w}$ de $W_{sca}(\theta)$ (voir Eq. IV.52). De plus, l'intégrale sur les angles $\theta$ est analytique si l'on prend $p_\Theta(\theta) = \frac{\sin\theta}{2}$. En injectant la formulation intégrale de $W_{sca}$ (voir Eq. IV.51) dans Eq. IV.53, il vient :

$$CW_{sca}(\vartheta_{sca}) = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \times \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \underbrace{\int_0^{\vartheta_{sca}} 2\pi \sin\theta \check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \theta) d\theta}_{=\check{w}_C(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vartheta_{sca})} \tag{IV.54}$$

avec la fonction poids $\check{w}_C$ donnée par

$$\check{w}_C(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vartheta_{sca}) = 2\pi \int_0^{\vartheta_{sca}} \sin\theta \check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \theta) d\theta \tag{IV.55}$$

où $\check{w}$ est donnée par Eq. IV.52. La formulation intégrale ainsi obtenue est identique à celle de $W_{sca}$. Par conséquent, la procédure d'échantillonnage pour évaluer la cumulée $CW_{sca}$ est identique à celle pour évaluer $W_{sca}$. Il ne nous reste plus qu'à établir l'expression analytique de la fonction poids $\check{w}_C$.

Dans $\check{w}_C$, la dépendance à l'angle de diffusion $\theta$ se fait par l'intermédiaire de la fonction de Bessel $J_0(k_e\theta\|\Delta\vec{r}\|)$ présente dans $\check{w}$ (Eq. IV.52). Nous allons donc nous concentrer sur le calcul analytique de l'intégrale $\int_0^{\vartheta_{sca}} \sin\theta J_0(k_e\theta\|\Delta\vec{r}\|)d\theta$. Pour cela, nous devons revenir sur l'hypothèse $2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \approx \vartheta_{sca}$ qui avait été utilisée lors des dérivations mathématiques de l'approximation de Schiff dans le cadre des petits angles de diffusion (voir Sec. III.6.2). Les angles considérés étant petits, il n'y a aucun impact sur le résultat à utiliser l'une ou l'autre expression. Toutefois, en supprimant cette approximation (du moins dans un premier temps), puis en effectuant le changement de variable $u = 2\sin\frac{\theta}{2}$, il vient :

$$\begin{aligned}\int_0^{\vartheta_{sca}} \sin\theta J_0(k_e\theta\|\Delta\vec{r}\|)d\theta &\approx \int_0^{\vartheta_{sca}} \sin\theta J_0\left(2k_e\sin(\theta/2)\|\Delta\vec{r}\|\right)d\theta \\ &= \int_0^{2\sin(\vartheta_{sca}/2)} uJ_0\left(k_eu\|\Delta\vec{r}\|\right)du \\ &= 2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\frac{J_1(2k_e\sin(\vartheta_{sca}/2)\|\Delta\vec{r}\|)}{k_e\|\Delta\vec{r}\|}\end{aligned}$$

Enfin, en reprenant le développement limité $2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \approx \vartheta_{sca}$, on obtient

$$\int_0^{\vartheta_{sca}} \sin\theta J_0(k_e\theta\|\Delta\vec{r}\|)d\theta \approx \vartheta_{sca}\frac{J_1(k_e\vartheta_{sca}\|\Delta\vec{r}\|)}{k_e\|\Delta\vec{r}\|} \tag{IV.56}$$

où $J_1$ est la fonction de Bessel d'ordre 1. Ainsi, en utilisant le résultat obtenu Eq. IV.56, la fonction poids $\check{w}_C$ (Eq. IV.55) devient :

$$\begin{aligned}\check{w}_C(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},\vartheta_{sca}) = 2\pi\left(\frac{k_eP(\vec{e}_o,r_{eq})}{2\pi}\right)^2\vartheta_{sca}\frac{J_1(k_e\vartheta_{sca}\|\Delta\vec{r}\|)}{k_e\|\Delta\vec{r}\|} \\ \times\left[1+e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))}\cos(\beta_r(\vec{r}_1)-\beta_r(\vec{r}_2)) - e^{-\beta_i(\vec{r}_1)}\cos\beta_r(\vec{r}_1) - e^{-\beta_i(\vec{r}_2)}\cos\beta_r(\vec{r}_2)\right]\end{aligned} \tag{IV.57}$$

### IV.1.6 Calcul systématique de sensibilités

Comme nous l'avons déjà mentionné Sec. II.2.3.2, lorsqu'une grandeur est estimée par un algorithme de Monte Carlo, il est possible de réaliser simultanément une analyse de sensibilité afin d'étudier l'influence d'un paramètre sur la grandeur. Par définition, on appelle sensibilité d'une grandeur $G$ par rapport à un paramètre $\pi$, notée $\partial_\pi G$, la dérivée de $G$ par rapport à $\pi$. La connaissance des sensibilités d'une grandeur est indispensable dès lors qu'il est question d'optimiser un procédé [Dauchet, 2012; Farges et al., 2015] ou de faire de la propagation d'incertitude d'un paramètre $\pi$ sur la valeur de la grandeur

considérée (voir Sec. IV.3.3). Dans ce qui va suivre, nous proposons d'appliquer le calcul de sensibilités par la méthode de Monte Carlo au cas des propriétés radiatives. Nous nous concentrerons sur le cas des sensibilités paramétriques que nous allons expliquer ci-après.

#### IV.1.6.1 Calcul de sensibilités des sections efficaces

Tout d'abord, rappelons la formulation intégrale de la section efficace $\sigma_k$ donnée par Eq. IV.22 :

$$\sigma_k = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_k(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.58}$$

La sensibilité de la section efficace $\sigma_k$ (Eq. IV.108) par rapport au paramètre $\pi$, notée $\partial_\pi \sigma_k$, est la dérivée de $\sigma_k$ par rapport à $\pi$ :

$$\partial_\pi \sigma_k = \frac{\partial \sigma_k}{\partial \pi} = \frac{\partial}{\partial \pi} \left[ \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_k(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \right] \tag{IV.59}$$

Il convient de se poser la question suivante : comment le paramètre $\pi$ intervient-il dans la formulation intégrale ? En toute généralité, $\pi$ peut intervenir dans [Delatorre et al., 2014] :

1. les bornes du domaine d'intégration
2. les fonctions densités de probabilité
3. les tests algorithmiques (s'il y en a, ce qui n'est pas le cas ici)
4. le poids de Monte Carlo

En pratique, cette question n'est pas anodine puisque mener une étude de sensibilité peut s'avérer parfois une difficulté suivant la façon dont le paramètre $\pi$ intervient dans la formulation intégrale. C'est, en particulier, le cas lorsque le paramètre $\pi$ intervient dans les bornes du domaine d'intégration (cas 1) : on parle de **sensibilité à la déformation du domaine** [Roger et al., 2005; Roger, 2006; Dauchet, 2012; Delatorre et al., 2014; Farges et al., 2015]. Pour les trois autres cas (cas 2, 3 et 4), on parle de **sensibilité paramétrique** [de Lataillade et al., 2002; Delatorre et al., 2014].

Dans le cadre de notre étude, il s'avère qu'il y a une sensibilité à la déformation (cas le plus difficile) du domaine qui se ramène au calcul d'une sensibilité paramétrique. Plus précisément, calculer la sensibilité suivant la taille $r_{eq}$ est à première vue une difficulté puisque ce paramètre intervient dans les bornes du domaine d'intégration (voir l'intégrale sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ dans Eq. IV.59). Cette difficulté peut-être contournée en utilisant la relation $\lambda_e = \frac{2\pi}{x} r_{eq}$. En effet, la sensibilité de la section efficace $\sigma_k$ (par exemple) par rapport à $r_{eq}$ peut s'écrire :

$$\partial_{r_{eq}} \sigma_k = \frac{\partial \sigma_k}{\partial r_{eq}} = \frac{\partial \sigma_k}{\lambda_e} \frac{\partial \lambda_e}{\partial r_{eq}} = \frac{\partial \sigma_k}{\lambda_e} \frac{2\pi}{x} = \frac{2\pi}{x} \partial_{\lambda_e} \sigma_k \tag{IV.60}$$

On est donc ramené au calcul de la sensibilité $\partial_{\lambda_e}\sigma_k$ par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$. Cela est beaucoup plus simple que de chercher à calculer directement la sensibilité $\partial_{r_{eq}}\sigma_k$, ce qui nécessiterait de changer les bornes du domaine d'intégration. Hormis ce cas très particulier pour lequel on s'en sort sans difficulté, nous n'aborderons pas dans ce manuscrit cette famille de sensibilités ni d'ailleurs celle concernant les cas 2 et 3. Le lecteur intéressé est invité à se reporter à l'article [Delatorre et al., 2014] ainsi qu'aux travaux cités précédemment.

Dans la suite, nous nous intéressons uniquement aux sensibilités paramétriques, et plus précisément aux sensibilités suivant la partie réelle $n_r$ ou la partie imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfraction relatif, ou encore à la longueur d'onde $\lambda_e$. Sous une forme plus compacte, nous notons $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ l'ensemble des paramètres que peut prendre le paramètre $\pi$. On vérifie bien que ces trois paramètres n'interviennent que dans l'expression de la fonction poids (cas 4) donnée dans Eq. IV.52. Afin de faire apparaître clairement la dépendance du paramètre $\pi$, réécrivons Eq. IV.59 :

$$\partial_\pi\sigma_k = \frac{\partial\sigma_k}{\partial\pi} = \frac{\partial}{\partial\pi}\left[\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)\int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq})\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{r}_0}(\vec{r}_0) w_k(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi)\right] \tag{IV.61}$$

où les trois fonctions poids $w_k$, données par Eqs. IV.23, IV.24 et IV.25, sont rappelées ci-dessous en mettant en évidence les dépendances à $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ :

$$w_{ext}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi) = 2P(\vec{e}_o,r_{eq})\left[1 - e^{-k_e\kappa_r l(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq})}\cos(k_e(n_r-1)l(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq}))\right] \tag{IV.62}$$

$$w_{abs}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi) = P(\vec{e}_o,r_{eq})\left[1 - e^{-2k_e\kappa_r l(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq})}\right] \tag{IV.63}$$

$$w_{sca}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi) = w_{ext}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi) - w_{abs}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi) \tag{IV.64}$$

À noter que la dépendance à $\lambda_e$ se fait par l'intermédiaire du paramètre $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$ que nous choisissons de laisser sous cette forme pour ne pas alourdir la lisibilité des expressions. Puisque $\pi$ n'intervient ni dans les bornes d'intégration ni dans les fonctions densités de probabilité, l'opérateur dérivée peut passer sous les intégrales de sorte que :

$$\partial_\pi\sigma_k = \frac{\partial\sigma_k}{\partial\pi} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)\int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq})\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\underbrace{\frac{\partial w_k(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi)}{\partial\pi}}_{w_{k,\pi}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi)} \tag{IV.65}$$

Nous venons donc d'établir la formulation intégrale de la sensibilité de la section efficace $\sigma_k$ par rapport au paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$. Le poids de Monte Carlo correspondant, noté $w_{k,\pi}$, est donné par :

$$w_{k,\pi}(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi) = \frac{\partial w_k(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq},\pi)}{\partial\pi} \tag{IV.66}$$

Avant d'expliciter les expressions des fonctions poids, remarquons que la formulation intégrale de la sensibilité $\partial_\pi\sigma_k$ est identique à celle de la grandeur initiale $\sigma_k$. De ce fait, les

mêmes procédures d'échantillonnages sont utilisées pour évaluer $\sigma_k$ et $\partial_\pi \sigma_k$. Autrement dit, le même algorithme de Monte Carlo évalue simultanément les trois sections efficaces et les neuf sensibilités. Au total, le même algorithme évalue les douze fonctions poids correspondantes : les trois des sections efficaces données par Eqs. IV.62, IV.63 et IV.64, et les neuf autres concernant les sensibilités qui sont explicitées dans la suite.

En utilisant Eqs. IV.62, IV.63, IV.64 et IV.66, on en déduit les expressions des fonctions poids $w_{k,\pi}$ pour les trois paramètres $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ considérés (on omettra les diverses dépendances des quantités afin d'alléger l'écriture des expressions).

**Fonctions poids correspondant aux sensibilités des sections efficaces par rapport à $n_r$ :**

$$w_{ext,n_r} = -2Pk_e l e^{-k_e\kappa_r l}\sin(k_e(n_r-1)l) \tag{IV.67}$$

$$w_{abs,n_r} = 0 \tag{IV.68}$$

$$w_{sca,n_r} = w_{ext,n_r} - w_{abs,n_r} = w_{ext,n_r} \tag{IV.69}$$

avec $l \equiv l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})$ la longueur de traversée au sein de la particule et $P \equiv P(\vec{e}_o, r_{eq})$ l'aire de la surface projetée.

**Fonctions poids correspondant aux sensibilités des sections efficaces par rapport à $\kappa_r$ :**

$$w_{ext,\kappa_r} = 2Pk_e l\, e^{-k_e\kappa_r l}\cos(k_e(n_r-1)l) \tag{IV.70}$$

$$w_{abs,\kappa_r} = 2Pk_e l\, e^{-2k_e\kappa_r l} \tag{IV.71}$$

$$w_{sca,\kappa_r} = w_{ext,\kappa_r} - w_{abs,\kappa_r} \tag{IV.72}$$

**Fonctions poids correspondant aux sensibilités des sections efficaces par rapport à $\lambda_e$ :** Pour mener les calculs, il est pratique ici de remarquer que :

$$w_{k,\lambda_e} = \frac{\partial w_k}{\partial \lambda_e} = \frac{\partial w_k}{\partial k_e}\frac{\partial k_e}{\partial \lambda_e} = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\frac{\partial w_k}{\partial k_e} \tag{IV.73}$$

Une fois les calculs faits, on obtient :

$$\begin{aligned} w_{ext,\lambda_e} &= -2P\frac{1}{\lambda_e^2}e^{-\frac{\gamma}{\lambda_e}}\left[\gamma\cos\frac{\delta}{\lambda_e} + \delta\sin\frac{\delta}{\lambda_e}\right] \\ &= -\frac{4\pi l}{\lambda_e^2}Pe^{-k_e\kappa_r l}\left[\kappa_r\cos(k_e(n_r-1)l) + (n_r-1)\sin(k_e(n_r-1)l)\right] \\ w_{abs,\lambda_e} &= -P\frac{\alpha}{\lambda_e^2}e^{-\frac{\alpha}{\lambda_e}} = -P\frac{2\pi\kappa_r l}{\lambda_e^2}e^{-k_e\kappa_r l} \\ w_{sca,\lambda_e} &= w_{ext,\lambda_e} - w_{abs,\lambda_e} \end{aligned} \tag{IV.74}$$

avec $\alpha = 4\pi\kappa_r l$, $\gamma = 2\pi\kappa_r l$ et $\delta = 2\pi(n_r-1)l$.

#### IV.1.6.2 Calcul des sensibilités $n^{ème}$ des sections efficaces

**Intérêt du calcul de sensibilités $n^{ème}$.** La démarche, qui vient d'être présentée, peut-être généralisée aux calculs des sensibilités $n^{ème}$, c'est-à-dire aux calculs des dérivées $n^{ème}$ de la grandeur considérée. L'intérêt de connaître les sensibilités $n^{ème}$ par rapport à un paramètre $\pi$ est qu'elles peuvent être utilisées pour déterminer la valeur d'une grandeur évaluée en ce paramètre de façon plus précise qu'avec seulement la dérivée première. Pour plus de clarté, supposons que l'on dispose d'une base de donnée où figurent les valeurs des sections efficaces (par exemple) et de leurs sensibilités $n^{ème}$ pour certaines valeurs du paramètre $\pi$. Considérons maintenant que l'on souhaite obtenir la valeur d'une section efficace en un paramètre $\mathring{\pi}$ qui n'est pas dans la base de donnée. Un développement en série de Taylor permet d'obtenir cette valeur :

$$\sigma_k(\mathring{\pi}) = \sigma_k(\pi) + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\partial_\pi^n \sigma_k(\pi)}{n!} (\mathring{\pi} - \pi)^n \tag{IV.75}$$

avec $\partial_\pi^n \sigma_k(\pi)$ désignant la sensibilité $n^{ème}$ de la section efficace $\sigma_k$ évaluée en $\pi$ ($\pi$ étant la valeur contenue dans la base de donnée la plus proche de $\mathring{\pi}$). Par conséquent, la valeur de la section efficace recherchée sera plus précise en tenant compte des dérivées successives plutôt qu'en ne tenant compte que de la dérivée première. Dans la suite, nous donnons les sensibilités des sections efficaces par rapport aux indices $n_r$ et $\kappa_r$ ainsi qu'à la longueur d'onde $\lambda_e$. Comme précédemment nous noterons de manière compacte $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ désignant l'un des trois paramètres.

**Formulation intégrale.** En reprenant le cas d'étude précédent, la formulation intégrale de la sensibilité $n^{ème}$ de la section efficace $\sigma_k$ par rapport au paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ s'écrit :

$$\partial_\pi^n \sigma_k = \frac{\partial^n \sigma_k}{\partial \pi^n} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 \underbrace{\frac{\partial^n w_k(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi^n}}_{w_{k,\pi,n}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)} \tag{IV.76}$$

avec $w_{k,\pi,n}$ le poids de Monte Carlo :

$$w_{k,\pi,n}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi) = \frac{\partial^n w_k(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi^n} \tag{IV.77}$$

où $w_k$ est donné par Eqs. IV.62, IV.63 ou IV.64. Dans la suite, nous donnons explicitement les expressions des fonctions poids $w_{k,\pi,n}$ pour les trois paramètres $(n_r, \kappa_r, \lambda_e)$ considérés ici.

**Fonctions poids correspondant aux sensibilités des sections efficaces par rapport à $n_r$ :**

$$\begin{aligned} w_{ext,n_r,n} &= 2P(k_e l)^n e^{-k_e\kappa_r l} \times \begin{cases} (-1)^{\frac{n}{2}+1}\cos(k_e(n_r-1)l) & \text{si } n \text{ pair} \\ (-1)^{\frac{n-1}{2}}\sin(k_e(n_r-1)l) & \text{si } n \text{ impair} \end{cases} \\ w_{abs,n_r,n} &= 0 \\ w_{sca,n_r,n} &= w_{ext,n_r,n} - w_{abs,n_r,n} \end{aligned} \tag{IV.78}$$

avec $l \equiv l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})$ la longueur de traversée au sein de la particule et $P \equiv P(\vec{e}_o, r_{eq})$ l'aire de la surface projetée.

**Fonctions poids correspondant aux sensibilités des sections efficaces par rapport à $\kappa_r$ :**

$$\begin{aligned} w_{ext,\kappa_r,n} &= 2P(-1)^{n+1}(k_e l)^n e^{-k_e\kappa_r l}\cos(k_e(n_r-1)l) \\ w_{abs,\kappa_r,n} &= P(-1)^{n+1}(2k_e l)^n e^{-2k_e\kappa_r l} \\ w_{sca,\kappa_r,n} &= w_{ext,\kappa_r,n} - w_{abs,\kappa_r,n} \end{aligned} \tag{IV.79}$$

**Fonctions poids correspondant aux sensibilités des sections efficaces par rapport à $\lambda_e$ :**

$$\begin{aligned} w_{ext,\lambda_e,n} &= 2P(-1)^n \frac{1}{\lambda_e^{2n}} e^{-\frac{\gamma}{\lambda_e}} \left[ U_n(\lambda_e)\cos\frac{\delta}{\lambda_e} + V_n(\lambda_e)\sin\frac{\delta}{\lambda_e} \right] \\ w_{abs,\lambda_e,n} &= Pe^{-\frac{\alpha}{\lambda_e}} \sum_{i=1}^{n} \frac{\beta_{n,i}}{\lambda_e^{n+i}} \alpha^i \\ w_{sca,\lambda_e,n} &= w_{ext,\lambda_e,n} - w_{abs,\lambda_e,n} \end{aligned} \tag{IV.80}$$

avec $\gamma = 2\pi\kappa_r l$, $\delta = 2\pi(n_r-1)l$ et $\alpha = 4\pi\kappa_r l$. La quantité $\beta_{n,i}$ est définie par :

$$\forall n \in \mathbb{N}^* \begin{cases} \beta_{n,n} = -1 \\ \beta_{n,1} = (-1)^n n! \\ \beta_{n,i} = -(i+n-1)\beta_{n-1,i} + \beta_{n-1,i-1} \qquad \forall i \in [2, n-1] \end{cases}$$

Les quantités $U_n$ et $V_n$ sont définies par les suites polynomiales suivantes :

$$\begin{cases} \forall n \geqslant 2 & \begin{cases} U_n(\lambda_e) = (2(n-1)\lambda_e - \gamma))U_{n-1}(\lambda_e) - \lambda_e^2 U'_{n-1}(\lambda_e) + \delta V_{n-1}(\lambda_e) \\ V_n(\lambda_e) = (2(n-1)\lambda_e - \gamma))V_{n-1}(\lambda_e) - \lambda_e^2 V'_{n-1}(\lambda_e) - \delta U_{n-1}(\lambda_e) \end{cases} \\ n = 1 & \begin{cases} U_1(\lambda_e) = \gamma \\ V_1(\lambda_e) = \delta \end{cases} \end{cases}$$

où $U'_{n-1}$ et $V'_{n-1}$ désignent les dérivées de $U_{n-1}$ et $V_{n-1}$ par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$.

#### IV.1.6.3 Calcul des sensibilités de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$

En suivant la même démarche présentée dans Sec. IV.1.6.1, la formulation intégrale de la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à un paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\partial_\pi W_{sca} = \frac{\partial W_{sca}}{\partial \pi} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{2\pi} d\gamma_o p_{\Gamma_o}(\gamma_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \underbrace{\frac{\partial \check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi}}_{\check{w}_\pi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}\end{aligned} \tag{IV.81}$$

où la fonction poids $\check{w}_\pi$ est donnée par

$$\check{w}_\pi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi) = \frac{\partial \check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi} \tag{IV.82}$$

avec $\check{w}$ la fonction poids donnée par Eq. IV.52 que l'on rappelle ci-dessous en explicitant les quantités $\beta_r$ et $\beta_i$ (voir Eq. IV.38) afin de mettre en évidence les dépendances à $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ :

$$\begin{aligned}\check{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi) = \left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\ \times \Big[1 + e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2))} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\ - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right] \Big]\end{aligned} \tag{IV.83}$$

avec $l(\vec{r}_1) \equiv l(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})$ et $l(\vec{r}_2) \equiv l(\vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})$ les longueurs de traversées au sein de la particule. Dans la suite, nous donnons les expressions des différentes fonctions poids $\check{w}_\pi$.

**Fonction poids $\check{w}_{n_r}$ correspondant à la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à $n_r$**

La dépendance à la partie réelle $n_r$ de l'indice de réfraction relatif $m_r$ intervient seulement dans les fonctions cosinus de l'expression de la fonction poids $\check{w}$ (Eq. IV.83). Ainsi,

$$\begin{aligned}
\check{w}_{n_r} = \frac{\partial \check{w}}{\partial n_r} = &\left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\
&\times \Big[ e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \frac{\partial}{\partial n_r} \{\cos[k_e(n_r-1)(l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2))]\} \\
&- e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \frac{\partial}{\partial n_r} \{\cos[k_e(n_r-1) l(\vec{r}_1)]\} \\
&- e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \frac{\partial}{\partial n_r} \{\cos[k_e(n_r-1) l(\vec{r}_2)]\} \Big]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
= &\left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\
&\times \Big[ - e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} k_e (l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2)) \sin[k_e(n_r-1)(l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2))] \\
&+ e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} k_e l(\vec{r}_1) \sin[k_e(n_r-1) l(\vec{r}_1)] \\
&+ e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} k_e l(\vec{r}_2) \sin[k_e(n_r-1) l(\vec{r}_2)] \Big]
\end{aligned}$$

soit en réarrangeant les termes :

$$\begin{aligned}
\check{w}_{n_r} = &\frac{k_e^3 P^2(\vec{e}_o, r_{eq})}{4\pi^2} J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\
&\times \Big[ - (l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2)) e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \sin[k_e(n_r-1)(l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2))] \\
&+ l(\vec{r}_1) e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \sin[k_e(n_r-1) l(\vec{r}_1)] \\
&+ l(\vec{r}_2) e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \sin[k_e(n_r-1) l(\vec{r}_2)] \Big]
\end{aligned} \tag{IV.84}$$

**Fonction poids $\check{w}_{\kappa_r}$ correspondant à la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à $\kappa_r$**

La dépendance à la partie imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfaction relatif $m_r$ intervient seulement dans les fonctions exponentielles de l'expression de la fonction poids $\check{w}$ (Eq. IV.83). Ainsi,

$$\begin{aligned}
\check{w}_{\kappa_r} = \frac{\partial \check{w}}{\partial \kappa_r} = &\left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\
&\times \Big[\frac{\partial}{\partial \kappa_r}\left\{e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))}\right\} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\
&- \frac{\partial}{\partial \kappa_r}\left\{e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)}\right\} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] \\
&- \frac{\partial}{\partial \kappa_r}\left\{e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)}\right\} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right]\Big] \\
= &\left(\frac{k_e P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\
&\times \Big[ - k_e (l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2)) e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\
&+ k_e l(\vec{r}_1) e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] \\
&+ k_e l(\vec{r}_2) e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right]\Big]
\end{aligned} \tag{IV.85}$$

soit en réarrangeant les termes :

$$\begin{aligned}
\check{w}_{\kappa_r} = &\frac{k_e^3 P^2(\vec{e}_o, r_{eq})}{4\pi^2} J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \\
&\times \Big[ - (l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2)) e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\
&+ l(\vec{r}_1) e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] \\
&+ l(\vec{r}_2) e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right]\Big]
\end{aligned} \tag{IV.86}$$

**Fonction poids $\check{w}_{\lambda_e}$ correspondant à la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à $\lambda_e$**

$$\begin{aligned}
\check{w}_{\lambda_e} = \frac{\partial w}{\partial \lambda_e} = &\left(\frac{P(\vec{e}_o, r_{eq})}{2\pi}\right)^2 \Big[\frac{\partial k_e^2}{\partial \lambda_e} J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) \\
&+ k_e^2 \frac{\partial J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|)}{\partial \lambda_e} f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) + k_e^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \frac{\partial f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial \lambda_e}\Big]
\end{aligned} \tag{IV.87}$$

où l'on a introduit la fonction $f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)$ définie par :

$$\begin{aligned} f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) = 1 &+ e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\ &- e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right] \end{aligned} \tag{IV.88}$$

Pour calculer les dérivées par rapport à $\lambda_e$, il est pratique de remarquer que :

$$\frac{\partial \bullet}{\partial \lambda_e} = \frac{\partial \bullet}{\partial k_e} \frac{\partial k_e}{\partial \lambda_e} = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2} \frac{\partial \bullet}{\partial k_e} \tag{IV.89}$$

Ainsi, calculer la dérivée par rapport à $\lambda_e$ revient à calculer la dérivée par rapport à $k_e$, ce qui s'avère plus simple. En utilisant ceci, Eq. IV.87, s'écrit :

$$\begin{aligned} \check{w}_{\lambda_e} = \frac{\partial w}{\partial \lambda_e} &= -\frac{1}{2\pi} \left( \frac{P(\vec{e}_o, r_{eq})}{\lambda_e} \right)^2 \left[ \frac{\partial k_e^2}{\partial k_e} J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) \right. \\ &\left. + k_e^2 \frac{\partial J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|)}{\partial k_e} f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) + k_e^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \frac{\partial f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial k_e} \right] \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left( \frac{P(\vec{e}_o, r_{eq})}{\lambda_e} \right)^2 \left[ 2k_e J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) \right. \\ &\left. - k_e^3 \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) J_1(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) + k_e^2 J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \frac{\partial f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial k_e} \right] \end{aligned}$$

En réarrangeant les termes, il vient :

$$\begin{aligned} \check{w}_{\lambda_e} = -\frac{P^2(\vec{e}_o, r_{eq})}{\lambda_e^3} &\left[ \left[ 2J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) - k_e^2 \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\| J_1(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \right] f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) \right. \\ &\left. + k_e J_0(k_e \vartheta_{sca} \|\Delta\vec{r}\|) \frac{\partial f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial k_e} \right] \end{aligned} \tag{IV.90}$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial k_e} =& \kappa_r \Big[ - \left[ l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2) \right] e^{-[\beta_i(\vec{r}_1) + \beta_i(\vec{r}_2)]} \cos(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &+ l(\vec{r}_1) e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \cos \beta_r(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2) e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \cos \beta_r(\vec{r}_2) \Big] \\ &+ (n_r - 1) \Big[ - \left[ l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2) \right] e^{-[\beta_i(\vec{r}_1) + \beta_i(\vec{r}_2)]} \sin(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &+ l(\vec{r}_1) e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \sin \beta_r(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2) e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \sin \beta_r(\vec{r}_2) \Big] \end{aligned} \tag{IV.91}$$

où $\beta_r(\vec{r}) = k_e(n_r - 1) l(\vec{r})$ et $\beta_i(\vec{r}) = k_e \kappa_r l(\vec{r})$ (voir Eq. IV.38).

#### IV.1.6.4 Calcul des sensibilités de la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ dans le cas d'une particule de taille et d'orientation fixées

Dans cette section, on s'intéresse aux sensibilités de la section efficace différentielle de diffusion pour une particule isolée (*i.e.* de taille et d'orientation fixées). Nous les utiliserons dans Sec. IV.3.3 pour propager l'incertitude liée à un paramètre sur la valeur d'une grandeur. Ce qui diffère par rapport à la sous-section précédente est qu'ici nous travaillons avec une particule isolée. Dans ce cas, il n'y a pas l'intégrale sur les orientations qui avait permis d'extraire une solution analytique (voir Sec. IV.1.4). Ainsi la fonction poids à utiliser ici est donnée par Eq. IV.37 et non par Eq. IV.52. En suivant la même démarche présentée dans Sec. IV.1.6.1, la formulation intégrale de la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion [3] $\hat{W}_{sca}$ par rapport à un paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ s'écrit :

$$\partial_\pi \hat{W}_{sca} = \frac{\partial \hat{W}_{sca}}{\partial \pi} = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \underbrace{\frac{\partial w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi}}_{w_\pi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)} \tag{IV.92}$$

où la fonction poids $w \equiv w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ est donnée par Eq. IV.37 (en utilisant Eqs. IV.38 et IV.39) que l'on rappelle ci-dessous en mettant en évidence les dépendances :

$$\begin{aligned} w = \left(\frac{k_e P}{2\pi}\right)^2 \Bigg[ & \cos\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right) \\ & \times \Big[1 + e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2))} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2)\right] \\ & \quad - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \cos[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)] - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \cos[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)]\Big] \\ & \quad + \sin\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right) \\ & \times \Big[e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2))} \sin\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\ & \quad - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \sin\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] + e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \sin\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right] \Big] \Bigg] \end{aligned} \tag{IV.93}$$

Dans la suite, nous donnons les trois fonctions poids de la sensibilité à $\hat{W}_{sca}$. Pour alléger les étapes intermédiaires de calculs nous réutiliserons les notations introduites

3. La formulation intégrale de $\hat{W}_{sca}$ est obtenue en partant de Eq. IV.30, puis en traitant le module carré comme cela a été fait pour $W_{sca}$ (voir Sec. IV.1.3). Ceci conduit à écrire :

$$\hat{W}_{sca} = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)$$

Eq. IV.38 et qui sont rappelées ci-dessous :

$$\begin{aligned}\Gamma(\vec{r}) &= k_e \vartheta_{sca}(x\cos\phi_{sca} + y\cos\phi_{sca}) \\ \beta_r(\vec{r}) &= k_e(n_r - 1)l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq}) \\ \beta_i(\vec{r}) &= k_e \kappa_r l(\vec{r}, \vec{e}_o, r_{eq})\end{aligned} \tag{IV.94}$$

**Fonction poids $w_{n_r}$ de la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à $n_r$.** La dépendance à $n_r$ provient uniquement des fonctions sinus et cosinus. Ainsi, la fonction poids $w_{n_r}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}w_{n_r} &= \frac{\partial w}{\partial n_r} \\ &= \left(\frac{k_e P}{2\pi}\right)^2 \Bigg[ \cos\left(\Gamma(\vec{r}_1) - (\Gamma(\vec{r}_2)\right) \left[ e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \frac{\partial}{\partial n_r} \left\{\cos\left[k_e(n_r-1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right]\right\} \right. \\ &\qquad \left. - e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \frac{\partial}{\partial n_r} \left\{\cos\left[k_e(n_r-1)l(\vec{r}_1)\right]\right\} - e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \frac{\partial}{\partial n_r} \left\{\cos\left[k_e(n_r-1)l(\vec{r}_2)\right]\right\} \right] \\ &\qquad + \sin\left(\Gamma(\vec{r}_1) - (\Gamma(\vec{r}_2)\right) \left[ e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \frac{\partial}{\partial n_r} \left\{\sin\left[k_e(n_r-1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right]\right\} \right. \\ &\qquad \left. \left. - e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \frac{\partial}{\partial n_r} \left\{\sin\left[k_e(n_r-1)l(\vec{r}_1)\right]\right\} + e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \frac{\partial}{\partial n_r} \left\{\sin\left[k_e(n_r-1)l(\vec{r}_2)\right]\right\} \right] \right]\end{aligned}$$

En calculant les dérivées des fonctions cosinus et sinus, puis en utilisant les relations Eq. IV.94, il vient :

$$\begin{aligned}w_{n_r} &= k_e^3 \left(\frac{P}{2\pi}\right)^2 \\ &\times \Bigg[ \cos(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \Big\{ - (l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\, e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \sin(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &\qquad + l(\vec{r}_1) e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \sin\beta_r(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2) e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \sin\beta_r(\vec{r}_2) \Big\} \\ &\quad + \sin(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \Big\{ (l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\, e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \cos(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &\qquad - l(\vec{r}_1) e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \cos\beta_r(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2) e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \cos\beta_r(\vec{r}_2) \Big\} \Bigg]\end{aligned} \tag{IV.95}$$

**Fonction poids $w_{\kappa_r}$ de la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à $\kappa_r$.** La dépendance à $\kappa_r$ provient uniquement des fonctions exponentielles. Ainsi, la fonction poids $w_{\kappa_r}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} w_{\kappa_r} &= \frac{\partial w}{\partial \kappa_r} \\ &= \left(\frac{k_e P}{2\pi}\right)^2 \Bigg[ \cos\left(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)\right) \Big[ \frac{\partial}{\partial \kappa_r} \left\{ e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \right\} \cos\left(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)\right) \\ &\qquad - \frac{\partial}{\partial \kappa_r} \left\{ e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \right\} \cos \beta_r(\vec{r}_1) - \frac{\partial}{\partial \kappa_r} \left\{ e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \right\} \cos \beta_r(\vec{r}_2) \Big] \\ &\qquad + \sin\left(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)\right) \Big[ \frac{\partial}{\partial \kappa_r} \left\{ e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \right\} \sin\left(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)\right) \\ &\qquad - \frac{\partial}{\partial \kappa_r} \left\{ e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \right\} \sin \beta_r(\vec{r}_1) + \frac{\partial}{\partial \kappa_r} \left\{ e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \right\} \sin \beta_r(\vec{r}_2) \Big] \end{aligned} \tag{IV.96}$$

En calculant les dérivées des fonctions exponentielles, puis en utilisant les relations Eq. IV.94, il vient :

$$\begin{aligned} w_{\kappa_r} &= k_e^3 \left(\frac{P}{2\pi}\right)^2 \\ &\times \Bigg[ \cos(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \Big\{ - \left(l(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2)\right) e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \cos(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &\qquad + l(\vec{r}_1) e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \cos \beta_r(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2) e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \cos \beta_r(\vec{r}_2) \Big\} \\ &\quad + \sin(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \Big\{ - \left(l(\vec{r}_1) + l(\vec{r}_2)\right) e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))} \sin(\beta_r(\vec{r}_1) - \beta_r(\vec{r}_2)) \\ &\qquad + l(\vec{r}_1) e^{-\beta_i(\vec{r}_1)} \sin \beta_r(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2) e^{-\beta_i(\vec{r}_2)} \sin \beta_r(\vec{r}_2) \Big\} \Bigg] \end{aligned} \tag{IV.97}$$

**Fonction poids $w_{\lambda_e}$ de la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à $\lambda_e$.** La dépendance au paramètre longueur d'onde $\lambda_e$ intervient un peu partout, par l'intermédiaire de $k_e$, dans l'expression de $w$ (voir Eq. IV.93). Pour alléger les expressions que nous allons obtenir, nous introduisons les deux fonctions $f_c$ et $f_s$ suivantes :

$$\begin{aligned} f_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) &= 1 + e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \cos\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\ &\qquad - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \cos\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right] \\ f_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) &= e^{-k_e \kappa_r (l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))} \sin\left[k_e (n_r - 1)(l(\vec{r}_1) - l(\vec{r}_2))\right] \\ &\qquad - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_1)} \sin\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_1)\right] + e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_2)} \sin\left[k_e (n_r - 1) l(\vec{r}_2)\right] \end{aligned} \tag{IV.98}$$

La fonction poids $w_{\lambda_e}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} w_{\lambda_e} = \left(\frac{P}{2\pi}\right)^2 \frac{\partial k_e^2}{\partial \lambda_e}\Big[ & \cos(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) f_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) + \sin(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) f_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)\Big] \\ + \left(\frac{k_e P}{2\pi}\right)^2 \Bigg[ & \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left\{\cos\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right)\right\} f_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) \\ & + \cos(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \frac{\partial f_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial \lambda_e} \\ & + \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left\{\sin\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right)\right\} f_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e) \\ & + \sin(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \frac{\partial f_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, k_e)}{\partial \lambda_e}\Bigg] \end{aligned} \tag{IV.99}$$

Comme nous l'avons déjà mentionné, il est pratique d'utiliser la relation $\frac{\partial}{\partial \lambda_e} = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\frac{\partial}{\partial k_e}$ (voir Eq. IV.89). En utilisant cette relation puis en calculant les dérivées, il vient :

$$\frac{\partial k_e^2}{\partial \lambda_e} = 2k_e \tag{IV.100}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left\{\cos\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right)\right\} \\ & \quad = \frac{2\pi}{\lambda_e^2}\vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}] \\ & \qquad \times \sin\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right) \\ & \quad = \frac{2\pi}{\lambda_e^2}\vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\sin(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \end{aligned} \tag{IV.101}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left\{\sin\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right)\right\} \\ & \quad = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}] \\ & \qquad \times \cos\left(k_e \vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\right) \\ & \quad = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\vartheta_{sca}[(x_1 - x_2)\cos\phi_{sca} + (y_1 - y_2)\sin\phi_{sca}]\cos(\Gamma(\vec{r}_1) - \Gamma(\vec{r}_2)) \end{aligned} \tag{IV.102}$$

Afin de calculer les dérivées des fonctions $f_c$ et $f_s$ par rapport à $k_e$, nous introduisons les deux relations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_e}\left\{e^{-k_e u}\cos(k_e v)\right\} &= -\left[u\cos(k_e v) + v\sin(k_e v)\right]e^{-k_e u} \\ \frac{\partial}{\partial k_e}\left\{e^{-k_e u}\sin(k_e v)\right\} &= \left[-u\sin(k_e v) + v\cos(k_e v)\right]e^{-k_e u} \end{aligned} \tag{IV.103}$$

où $u$ et $v$ sont deux fonctions indépendantes de $k_e$. En utilisant Eq. IV.103 ainsi que Eq. IV.94 (pour alléger un peu l'écriture), il vient

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_c(\vec{r}_1,\vec{r}_2,k_e)}{\partial \lambda_e} &= -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\frac{\partial f_c(\vec{r}_1,\vec{r}_2,k_e)}{\partial k_e}\\ &= -\Big[\kappa_r(l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))\cos(\beta_r(\vec{r}_1)-\beta_r(\vec{r}_2))\\ &\qquad +(n_r-1)(l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2))\sin(\beta_r(\vec{r}_1)-\beta_r(\vec{r}_2))\Big]e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))}\\ &\quad +\Big[\kappa_r l(\vec{r}_1)\cos\beta_r(\vec{r}_1)+(n_r-1)l(\vec{r}_1)\sin\beta_r(\vec{r}_1)\Big]e^{-\beta_i(\vec{r}_1)}\\ &\quad +\Big[\kappa_r l(\vec{r}_2)\cos\beta_r(\vec{r}_2)+(n_r-1)l(\vec{r}_2)\sin\beta_r(\vec{r}_2)\Big]e^{-\beta_i(\vec{r}_2)}\end{aligned} \tag{IV.104}$$

et

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2,k_e)}{\partial \lambda_e} &= -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\frac{\partial f_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2,k_e)}{\partial k_e}\\ &= \Big[-\kappa_r(l(\vec{r}_1)+l(\vec{r}_2))\sin(\beta_r(\vec{r}_1)-\beta_r(\vec{r}_2))\\ &\qquad +(n_r-1)(l(\vec{r}_1)-l(\vec{r}_2))\cos(\beta_r(\vec{r}_1)-\beta_r(\vec{r}_2))\Big]e^{-(\beta_i(\vec{r}_1)+\beta_i(\vec{r}_2))}\\ &\quad -\Big[-\kappa_r l(\vec{r}_1)\sin\beta_r(\vec{r}_1)+(n_r-1)l(\vec{r}_1)\cos\beta_r(\vec{r}_1)\Big]e^{-\beta_i(\vec{r}_1)}\\ &\quad +\Big[-\kappa_r l(\vec{r}_2)\sin\beta_r(\vec{r}_2)+(n_r-1)l(\vec{r}_2)\cos\beta_r(\vec{r}_2)\Big]e^{-\beta_i(\vec{r}_2)}\end{aligned} \tag{IV.105}$$

D'une part, en regroupant les termes ayant $n_r-1$ en préfacteur et d'autre part ceux ayant $\kappa_r$ en préfacteur (voir Eqs. IV.104 et IV.105), on remarque que l'on peut écrire :

$$\begin{aligned}&\left(\frac{k_e^2 P}{2\pi}\right)^2\Big[\cos(\Gamma(\vec{r}_1)-\Gamma(\vec{r}_2))\frac{\partial f_c(\vec{r}_1,\vec{r}_2,k_e)}{\partial\lambda_e}+\sin(\Gamma(\vec{r}_1)-\Gamma(\vec{r}_2))\frac{\partial f_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2,k_e)}{\partial\lambda_e}\Big]\\ &\qquad=\frac{1}{k_e}\left[(n_r-1)w_{n_r}+\kappa_r w_{\kappa_r}\right]\end{aligned} \tag{IV.106}$$

Ainsi, en injectant Eqs. IV.100, IV.101, IV.102 et IV.106 dans Eq. IV.99, l'expression de la fonction poids de la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion d'une particule isolée s'écrit :

$$\begin{aligned}w_{\lambda_e} = \frac{2}{k_e}w+\frac{1}{k_e}\left[(n_r-1)w_{n_r}+\kappa_r w_{\kappa_r}\right]+\left(\frac{k_e P}{2\pi}\right)^2\vartheta_{sca}(x\cos\phi_{sca}+y\sin\phi_{sca})\\ \times\left[\cos(\Gamma(\vec{r}_1)-\Gamma(\vec{r}_2))f_c(\vec{r}_1,\vec{r}_2)+\sin(\Gamma(\vec{r}_1)-\Gamma(\vec{r}_2))f_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\right]\end{aligned} \tag{IV.107}$$

avec $w$ la fonction poids donnée par Eq. IV.93, et où $w_{n_r}$ et $w_{\kappa_r}$ sont les fonctions poids données respectivement par Eq. IV.95 et Eq. IV.97.

### IV.1.7 Construction d'un algorithme évaluant simultanément toutes les propriétés radiatives d'une suspension de particules et leurs sensibilités

Jusqu'ici, nous avons associé à chaque formulation intégrale d'une grandeur un algorithme. Ceci peut s'avérer couteux en temps de calcul dès lors que l'on souhaite, par exemple, calculer la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ pour un grand nombre d'angles de diffusion, ce qui est très souvent le cas en transfert radiatif. Pour la résolution de l'équation de transfert radiatif, il est plus commode de disposer directement des résultats tabulés de $W_{sca}$ et $CW_{sca}$ pour économiser du temps de calcul. En particulier, dans le cadre des micro-organismes photosynthétiques, il est nécessaire d'avoir ces valeurs pour un grand nombre d'angles $\vartheta_{sca}$ afin de saisir les variations de $W_{sca}$ (et $CW_{sca}$) qui sont importantes pour les petits angles de diffusion $\vartheta_{sca}$. Si l'on exécutait un algorithme pour chaque angle, les temps de calcul seraient beaucoup trop importants pour pouvoir être vraiment utilisables, notamment dans la communauté des photo-procédés. Pour contourner cela, il suffit de remarquer que l'angle $\vartheta_{sca}$ intervient seulement dans la fonction poids, et non pas dans les intégrales. Par conséquent, la formulation intégrale est identique quelque soit l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ considéré : seule la valeur du poids est modifiée. Autrement dit, les mêmes procédures d'échantillonnages peuvent être utilisées. Nous avons alors besoin que d'un seul algorithme pour évaluer $W_{sca}$ et sa cumulée $CW_{sca}$ (puisqu'elle a la même formulation intégrale, voir Sec. IV.1.5) pour l'ensemble des angles de diffusion souhaités. Plus précisément, l'algorithme calcule simultanément les $2N_{\vartheta_{sca}}$ fonctions poids (où $N_{\vartheta_{sca}}$ désigne le nombre d'angles de diffusion $\vartheta_{sca}$ souhaité). En procédant ainsi, on rentabilise la procédure d'échantillonnage puisque l'on a $2N_{\vartheta_{sca}}$ fois moins d'échantillonnages qu'en exécutant $2N_{\vartheta_{sca}}$ algorithmes (un algorithme pour chaque grandeur et chaque angle).

Comme nous allons le voir, il est possible de rentabiliser davantage les procédures d'échantillonnages puisque l'algorithme précédent peut également évaluer les sections efficaces et leurs sensibilités. Il suffit seulement de s'assurer que les formulations intégrales de ces grandeurs peuvent se mettre sous la même forme que celle de $W_{sca}$. Pour ce faire, partons de la formulation intégrale des sections efficaces $\sigma_k$ donnée par (voir Eq. IV.16 en remplaçant $\vec{r}_0$ par $\vec{r}_1$ pour des raisons de commodités de notations) :

$$\sigma_k = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) w_k(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq}) \qquad \text{(IV.108)}$$

Si l'on compare les formulations intégrales Eqs. IV.108 et Eq. IV.51, on constate que l'intégrale $\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)$ n'est pas présente dans la formulation intégrale de $\sigma_k$. Or, puisque $p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)$ est une fonction densité de probabilité, elle est normalisée (par définition),

c'est-à-dire que :

$$\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) = 1 \tag{IV.109}$$

Par conséquent, rien ne nous empêche d'introduire cette intégrale dans l'expression de $\sigma_k$ (Eq. IV.108) de sorte que :

$$\sigma_k = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \underbrace{\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)}_{=1} w_k(\vec{r}_1,\vec{e}_o,r_{eq}) \tag{IV.110}$$

Bien évidemment, puisque le poids $w_k$ est indépendant de la position $\vec{r}_2$, l'échantillonnage de cette position ne servira pas pour évaluer la grandeur $\sigma_k$. Par contre ce qui est intéressant, c'est que nous pouvons utiliser une seule et même procédure d'échantillonnage pour évaluer simultanément les sections efficaces $\sigma_k$, la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ et sa cumulée $CW_{sca}$ pour $N_{\vartheta_{sca}}$ angles de diffusion. Il est également possible de faire exactement la même chose pour la formulation intégrale des sensibilités des sections efficaces. Au final, nous avons la même formulation intégrale pour les propriétés radiatives et leurs sensibilités exceptée dans l'expression des fonctions poids :

$$\left.\begin{array}{l}\sigma_k\\ \partial_\pi^n \sigma_k\\ W_{sca}\\ \partial_\pi W_k\\ CW_{sca}\end{array}\right\} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \left\{\begin{array}{l} w_k(\vec{r}_1,\vec{e}_o,r_{eq})\\ w_{k,\pi,n}(\vec{r}_1,\vec{e}_o,r_{eq})\\ \breve{w}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq})\\ \breve{w}_\pi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq})\\ \breve{w}_C(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq})\end{array}\right. \tag{IV.111}$$

D'un point de vue algorithmique, nous allons donc échantillonner les quatre variables $(\vec{E}_o, R_{eq}, \vec{R}_1, \vec{R}_2)$ et calculer les fonctions poids. Pour les sections efficaces et leurs sensibilités, l'échantillonnage de la position $\vec{r}_2$ ne sert pas, on utilise seulement $\vec{r}_1$. L'algorithme s'énonce de la façon suivante :

**Algorithme 7: Approximation de Schiff - Toutes les propriétés radiatives et leurs sensibilités**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.

- **Étape 3** : une première position $\vec{r}_1$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule.
- **Étape 4** : une seconde position $\vec{r}_2$ est uniformément échantillonnée sur la surface projetée de la particule.
- **Étape 5** : **tous** les poids de Monte Carlo sont calculés : les sections efficaces $w_k(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})$ (Eqs. IV.23, IV.24 et IV.25) et leurs sensibilités $w_{k,\pi,n}(\vec{r}_1, \vec{e}_o, r_{eq})$ (Eqs. IV.78, IV.79 et IV.80) utilisent seulement l'échantillonnage d'une position (celle sur $\vec{r}_1$, par exemple). Les autres poids utilisent l'échantillonnage des deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ : $\breve{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})$ (Eq. IV.52), $\breve{w}_\pi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})$ (Eqs. IV.84, IV.86 et IV.90) et $\breve{w}_C(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq})$ (Eq. IV.55).

De manière générale, le temps de calcul pour évaluer une grandeur avec un algorithme de Monte Carlo est principalement dédié à la procédure d'échantillonnage des variables aléatoires, alors que le calcul des fonctions poids est peu couteux. Ainsi, en pratique, nous observons des temps de calculs significativement plus faibles avec l'algorithme ci-dessus plutôt qu'en exécutant $N_{\vartheta_{sca}}$ algorithmes distincts évaluant respectivement $W_{sca}$ et ses sensibilités pour un angle de diffusion $\vartheta_{sca}$, plus $N_{\vartheta_{sca}}$ algorithmes distincts évaluant $CW_{sca}$, plus un algorithme pour chacune des sections efficaces et de leur sensibilités. Au total, il faudrait

$$\underbrace{3 \times 3}_{\sigma_k} + \underbrace{9 \times 3}_{\partial_\pi \sigma_k} + \underbrace{1 \times 4 \times N_{\vartheta_{sca}}}_{W_{sca}} + \underbrace{3 \times 4 \times N_{\vartheta_{sca}}}_{\partial_\pi W_{sca}} + \underbrace{1 \times 4 \times N_{\vartheta_{sca}}}_{CW_{sca}}$$

procédures d'échantillonnages (le premier chiffre désigne le nombre de grandeurs à évaluer (en rouge) et le second désigne le nombre d'échantillonnages nécessaires (en vert)) pour évaluer toutes les propriétés radiatives ($\sigma_k$, $W_{sca}$, $CW_{sca}$) et leurs sensibilités ($\partial_\pi \sigma_k$, $\partial_\pi W_{sca}$) avec des algorithmes distincts, tandis qu'avec l'algorithme présenté ci-dessous, il suffit seulement de quatre procédures d'échantillonnages (celles pour $\vec{E}_o, R_{eq}, \vec{R}_1, \vec{R}_2$) . On voit bien l'intérêt d'un tel algorithme dès lors que l'on considère $N_{\vartheta_{sca}} = 1000$ (ce qui sera le cas dans Sec. IV.3.1.1). Dans une telle situation, c'est le calcul des fonctions poids qui devient le plus coûteux puisque le temps de calcul dédié à la procédure d'échantillonnage reste le même quelque soit le nombre d'angles de diffusion souhaité.

## IV.2 Mise en œuvre pratique

Nous venons de détailler la démarche qui nous a permis de construire un algorithme évaluant toutes les propriétés radiatives et leurs sensibilités. Dans cette section, nous allons aborder la question de la mise en œuvre pratique de cet algorithme.

### IV.2.1 Géométries simples définies par des équations paramétriques quadratiques à symétrie de révolution : application aux cylindres et sphéroïdes

Dans cette section, nous nous intéressons aux particules dont les formes sont définies à partir d'équations paramétriques quadratiques (sphère, cylindre, sphéroïde, ...). Pour cette famille de formes, les calculs de géométrie nécessaires à la mise en œuvre de nos algorithmes (surface projetée et longueurs de traversées, voir Sec. IV.1) sont connus et possèdent une solution analytique. En pratique, ceci se traduit par l'obtention d'une expression explicite de la longueur de traversée $l(\vec{r},\vec{e}_o,r_{eq})$ ainsi que de l'aire de la surface projetée $P(\vec{e}_o,r_{eq})$. Ces deux quantités seront alors facilement évaluées lors du calcul du poids de Monte Carlo correspondant à la dernière étape de nos algorithmes. Toutefois, même si l'équation paramétrique de la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})$ est entièrement connue, il est indispensable de proposer une procédure d'échantillonnage d'une position $\vec{r}$ sur celle-ci (ceci correspond aux étapes de nos algorithmes où il est indiqué que la position est uniformément échantillonnée, voir Sec. IV.1). Nous reviendrons sur ce point, un peu plus tard dans cette section. Pour le moment, nous allons exploiter la symétrie de révolution de ces formes dites axi-symétriques, afin de préciser complètement la procédure d'échantillonnage concernant les orientations $\vec{e}_o$ des particules. D'une part, nous avons déjà vu que la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ est indépendante de $\varphi_o \equiv \phi_{sca}$ (voir Sec. IV.1.4) dès lors que l'on tient compte de la distribution sur les orientations des particules. D'autre part, on constate, indépendamment de la forme de la particule, que les sections efficaces $\sigma_k$ ne dépendent pas de cet angle $\varphi_o$ (ou de manière équivalente à $\phi_{sca}$). De plus, si les particules sont axi-symétriques alors les propriétés radiatives ($\sigma_k$ et $W_{sca}$) sont également indépendantes de l'angle $\gamma_o$ (correspondant à l'angle de rotation autour de l'axe de symétrie de la particule). Par conséquent, dans le cas de particules axi-symétriques, la prise de moyenne sur les orientations $\vec{e}_o$ se résume à prendre la moyenne sur le seul angle restant, à savoir l'angle $\theta_o$ :

$$\begin{aligned}\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) &\equiv \int_0^{\pi} d\theta_o p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{2\pi} d\gamma_o p_{\Gamma_o}(\gamma_o) \int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \\ &\equiv \int_0^{\pi} d\theta_o p_{\Theta_o}(\theta_o) \qquad \text{(particules axi-symétriques)}\end{aligned} \tag{IV.112}$$

Autrement dit, la procédure d'échantillonnage de l'orientation $\vec{e}_o$ d'une particule se réduit à échantillonner un angle $\theta_o$ sur $[0, \pi]$.

Dans la suite, nous allons nous concentrer sur l'étude d'une suspension de particules homothétiques, homogènes et de formes sphéroïdales (voir Sec. IV.2.1.1) d'une part, et cylindriques (voir Sec. IV.2.1.2) d'autre part.

### IV.2.1.1 Étude d'une suspension de particules sphéroïdales homogènes

**Données géométriques - particules sphéroïdales.** Ici, nous considérons une suspension de particules sphéroïdales homogènes. On note $R = \frac{a}{b}$ le rapport d'élongation d'une particule, où $a$ et $b$ sont respectivement les demi-petit axe et demi-grand axe du sphéroïde considéré. Pour une particule sphéroïdale, la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ est une ellipse de demi-axe $a$ suivant l'axe $y$ et de demi-axe $a\alpha(\theta_o)$ suivant l'axe $x$ avec :

$$\alpha(\theta_o) = \sqrt{\cos^2\theta_o + \frac{1}{R^2}\sin^2\theta_o} \tag{IV.113}$$

L'aire $P(\theta_o, r_{eq})$ correspondant à cette surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ est

$$P(\theta_o, r_{eq}) = \pi a^2 \alpha(\theta_o) = \pi r_{eq}^2 R^{\frac{2}{3}} \alpha(\theta_o) \tag{IV.114}$$

où $r_{eq}$ est le rayon équivalent de la sphère en volume définissant la taille de la particule. Enfin, la longueur de traversée $l(x_0, y_0, \theta_o, r_{eq})$ est donnée par :

$$l(x_0, y_0, \theta_o, r_{eq}) = \frac{2a}{R\alpha(\theta_o)}\sqrt{1 - \frac{x_0^2}{a^2\alpha^2(\theta_o)} - \frac{y_0^2}{a^2}} \tag{IV.115}$$

où $(x_0, y_0)$ sont les coordonnées de la position $\vec{r}_0$ appartenant à la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ (voir Fig. IV.8).

**Procédure d'échantillonnage d'une orientation $\theta_o$.** L'angle $\theta_o$ définissant l'orientation de la particule, dans le cas isotrope (c'est ce qui est fait dans la plupart des cas), est échantillonné suivant la fonction densité de probabilité (PDF) :

$$p_{\Theta_o}(\theta_o) = \frac{\sin\theta_o}{2} \tag{IV.116}$$

Maintenant que la PDF est explicitée, nous allons pouvoir fournir une expression explicite du nombre aléatoire $\theta_o$. On aura alors échantillonné l'angle $\theta_o$ suivant ladite PDF. Pour ce faire, on applique la méthode de la cumulée inverse (voir Encart 5). En suivant la même démarche que dans l'encart, il vient :

$$\begin{aligned} c_{\Theta_o}(\theta_o) = \text{rand} &\Leftrightarrow \int_0^{\theta_o} d\mathring{\theta}_o p_{\mathring{\Theta}_o}(\mathring{\theta}_o) = \text{rand} \\ &\Leftrightarrow \int_0^{\theta_o} d\mathring{\theta}_o \frac{\sin\mathring{\theta}_o}{2} = \text{rand} \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{2}(1 - \cos\theta_o) = \text{rand} \end{aligned} \tag{IV.117}$$

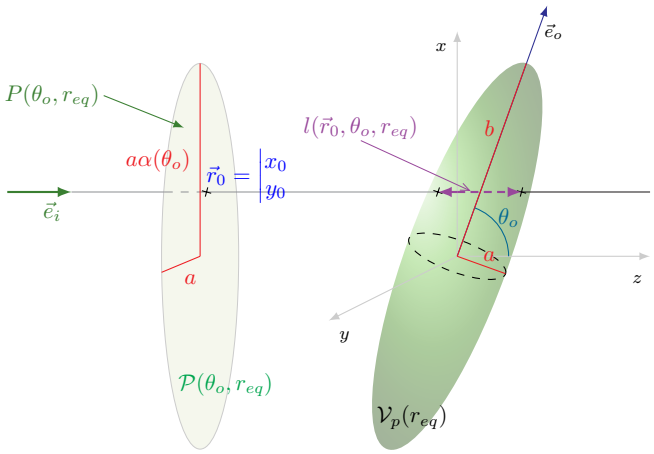



FIGURE IV.8 – Représentation des quantités géométriques d'une particule sphéroïdale de domaine volumique $\mathcal{V}_p$. L'orientation de la particule est repérée à l'aide de la direction $\vec{e}_o$, et plus précisément de l'angle $\theta_o$. $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ est une position sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ de la particule contenue dans le plan $(x, y)$ (plan perpendiculaire à la direction incidente $\vec{e}_i$). Cette surface projetée est une ellipse de demi-axe $a$ suivant l'axe des $y$, et de demi-axe $a\alpha(\theta_o)$ suivant l'axe des $x$. Son aire est notée $P(\theta_o, r_{eq})$ (voir Eq. IV.114). $r_{eq}$ correspond au rayon équivalent de la sphère en volume. $l(\vec{r}_0, \theta_o, r_{eq})$ est la longueur de traversée de la particule (voir Eq. IV.115), c'est-à-dire la distance entre la position pour laquelle le rayon entre dans la particule jusqu'à sa sortie.

où rand désigne un nombre aléatoire généré uniformément entre 0 et 1 à partir d'un générateur de nombres aléatoires disponible dans les librairies de calcul scientifique que nous utilisons. De ce calcul, on en déduit la valeur du nombre aléatoire $\theta_o$ (qui sera utilisé dans le code) :

$$\theta_o = \arccos\left(1 - 2\,\text{rand}\right) \tag{IV.118}$$

**Encart 5: Échantillonnage de nombre aléatoire : méthode de la cumulée inverse**

Considérons une variable aléatoire $X$ ayant $p_X(x)$ pour fonction densité de probabilité. Notons $c_X(x)$ sa fonction de répartition, aussi appelée cumulée, définie par :

$$c_X(x) = \int_a^x p_X(\mathring{x}) d\mathring{x} \tag{IV.119}$$

On cherche une valeur $x$ de la variable aléatoire $X$. Pour ce faire, on utilise la **méthode de la cumulée inverse** qui consiste à choisir uniformément un nombre aléatoire rand sur l'intervalle $[0, 1]$ de sorte que $c_X(x) = \text{rand}$ (nous disposons des librairies de calcul scientifique pour nous fournir un tel nombre aléatoire rand). En prenant l'inverse de la cumulée, nous obtenons l'unique valeur de $x$ (puisque $c_X(x)$ est une

fonction monotone), soit

$$x = c_X^{-1}(\text{rand}) \tag{IV.120}$$

Dans la suite, nous illustrons cette méthode dans le cas d'un échantillonnage uniforme. Considérons une fonction densité de probabilité uniforme $p_X(x) = \frac{1}{b-a}$. À partir de la définition de la fonction de répartition Eq. IV.119, il vient

$$c_X(x) = \int_a^x \frac{1}{b-a} d\mathring{x} = \frac{x-a}{b-a} = \text{rand} \tag{IV.121}$$

En appliquant la méthode de la cumulée inverse, la valeur du nombre $x$ échantillonné s'écrit :

$$x = a + \text{rand}(b-a) \tag{IV.122}$$

**Procédure d'échantillonnage d'une taille $r_{eq}$.** Nous avons vu dans Sec. IV.1.6.1 que la taille $r_{eq}$ (correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume) peut-être distribuée selon une fonction densité de probabilité $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ connue analytiquement (log-normal, gaussienne, gamma, histogramme ....). Ainsi, pour obtenir une valeur du nombre aléatoire $r_{eq}$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$, il suffit d'utiliser la méthode de la cumulée inverse. En pratique, les cumulées inverses des fonctions densité de probabilité usuelles sont disponibles dans les libraires de calcul scientifique telles que la GSL [4] (GNU Scientific Library) que nous utilisons. En résumé, nous avons tout ce qu'il nous faut pour générer un nombre aléatoire $r_{eq}$.

**Procédure d'échantillonnage d'une élongation $R$.** La plupart du temps (et ce sera le cas ici), le rapport d'élongation est fixé. Si ce n'est pas le cas, alors il suffit d'échantillonner suivant une distribution statistique des élongations fournie par l'utilisateur (par exemple l'ingénieur en photo-procédé). Une fois que cette élongation $R$ et la taille $r_{eq}$ sont connues, les dimensions $a$ et $b = \frac{a}{R}$ du sphéroïde sont entièrement connues. Pour les applications numériques, le demi-petit axe $a$ est donné par :

$$a = r_{eq} R^{\frac{1}{3}} \tag{IV.123}$$

**Procédure d'échantillonnage d'une position $\vec{r}_0$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$.** Nous avons vu dans Sec. IV.1 que nous avons fait le choix d'un échantillonnage uniforme de la position $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$. L'objet de ce paragraphe est de montrer comment nous faisons, en pratique, pour justement échantillonner cette position $\vec{r}_0$. Autrement dit, l'objectif est d'obtenir les valeurs de deux nombres aléatoires

4. `https://www.gnu.org/software/gsl/`

$(x_0, y_0)$ afin de localiser la position $\vec{r}_0$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$. Pour ce faire, nous allons retravailler, dans un premier temps, l'intégrale $\int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Introduisons les coordonnées polaires $\rho_0 \in [0,1]$ et $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$ associées au disque de rayon 1 contenu dans le plan $(x_0, y_0)$ telles que

$$\begin{aligned} x_0 &= a\alpha(\theta_o)\rho_0 \cos\varphi_0 \\ y_0 &= a\rho_0 \sin\varphi_0 \end{aligned} \tag{IV.124}$$

En utilisant ce changement de variable, la longueur de traversée Eq. IV.115 devient

$$l(\rho_0, \theta_o, r_{eq}) = \frac{2a}{R\alpha(\theta_o)}\sqrt{1-\rho_0^2} \tag{IV.125}$$

et l'intégration sur la surface projetée $\mathcal{P}$ devient :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{P}(\theta_o,r_{eq})} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) &\equiv \int_0^{a\alpha(\theta_o)} dx_0 \int_0^a dy_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \\ &\equiv \int_0^{2\pi} d\varphi_0 \int_0^1 d\rho_0\, \rho_0 a^2 \alpha(\theta_o) p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \end{aligned} \tag{IV.126}$$

Introduisons maintenant les fonctions densités de probabilité $p_{\Phi_0}(\varphi_0)$ et $p_{P_0}(\rho_0)$ (en multipliant et divisant l'intégrande pour ne pas modifier l'intégrale initiale) de sorte que Eq. IV.126 s'écrive :

$$\int_{\mathcal{P}(\theta_o,r_{eq})} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi_0\, p_{\Phi_0}(\varphi_0) \int_0^1 d\rho_0\, p_{P_0}(\rho_0)\, \rho_0 \frac{a^2\alpha(\theta_o) p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}{p_{\Phi_0}(\varphi_0) p_{P_0}(\rho_0)} \tag{IV.127}$$

Ainsi, échantillonner une position $\vec{r}_0$ sur la surface projetée $\mathcal{P}$ revient à échantillonner un angle $\varphi_0 \in [0, 2\pi]$ et une distance $\rho_0 \in [0, 1]$ sur le disque unité. Dans la mesure où l'on a choisi un échantillonnage uniforme de $\vec{r}_0$ sur $\mathcal{P}$ (nous avons $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P(\theta_o,r_{eq})}$), il convient désormais d'échantillonner uniformément la position sur le disque unité. C'est le cas en prenant les fonctions densités de probabilité suivantes [Dunn and Shultis, 2012] :

$$p_{\Phi_0}(\varphi_0) = \frac{1}{2\pi} \tag{IV.128}$$

$$p_{P_0}(\rho_0) = 2\rho_0 \tag{IV.129}$$

En utilisant les relations précédentes et $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P(\theta_o,r_{eq})}$, Eq. IV.127 devient :

$$\int_{\mathcal{P}(\theta_o,r_{eq})} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi_0\, p_{\Phi_0}(\varphi_0) \int_0^1 d\rho_0\, p_{P_0}(\rho_0) \tag{IV.130}$$

où l'on a utilisé le fait que $\rho_0 \frac{a^2\alpha(\theta_o) p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}{p_{\Phi_0}(\varphi_0) p_{P_0}(\rho_0)} = 1$. La reformulation intégrale étant faite, nous pouvons désormais utiliser la méthode de la cumulée inverse (voir Encart 5) pour obtenir les expressions des nombres aléatoires $\phi_0$ et $\rho_0$ (qui seront utilisées dans le code) :

$$\begin{aligned} \phi_0 &= 2\pi \text{rand} \\ \rho_0 &= \sqrt{\text{rand}} \end{aligned} \tag{IV.131}$$

où rand est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1. La position $\vec{r}_0$ est donc entièrement spécifiée : on injecte Eq. IV.131 dans Eq. IV.124 pour obtenir les coordonnées $x_0$ et $y_0$.

À l'issue de ces trois procédures d'échantillonnage $(\theta_o, r_{eq}, \vec{r}_0)$, nous sommes en mesure de calculer l'aire de la surface projetée $P(\theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.114) et la longueur de traversée $l(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{r}_0)$ (Eq. IV.115 ou IV.125) qui interviennent dans le calcul des fonctions poids.

**Retour sur les formulations intégrales des propriétés radiatives.** Les formulations intégrales ont été établies dans Secs. IV.1.1.2 et IV.1.4. Pour plus de clarté, nous choisissons de réécrire ces formulations intégrales avec les éléments que nous venons de voir dans le cas d'une suspension de particules sphéroïdales. Ceci permet au lecteur qui souhaiterait programmer d'avoir la formulation intégrale précise de cet exemple.

**Sections efficaces $\sigma_k$.** Tout d'abord, nous constatons que la formulation intégrale de la section efficace $\sigma_k$ est indépendante de la variable $\varphi_0$. En effet, les fonctions poids (voir Eqs. IV.23, IV.24 et IV.25) qui dépendent de l'aire de la surface projetée $P(\theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.114) et de la longueur de traversée $l(\rho_0, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.125) sont indépendantes de $\phi_0$. Ainsi, en tenant compte de cette remarque, puis en utilisant Eqs. IV.112 et Eq. IV.130 (avec $\int_0^{2\pi} d\varphi_0 p_{\Phi_0}(\varphi_0) = 1$), la formulation intégrale des sections efficaces $\sigma_k$ devient :

$$\sigma_k = \int_0^{\pi} d\theta_o \, p_{\theta_o}(\theta_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} \, p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_0^1 d\rho_0 \, p_{P_0}(\rho_0) \, w_k(\vec{r}_0, \theta_o, r_{eq}) \tag{IV.132}$$

où les fonctions poids $w_k$ sont données par Eqs. IV.23, IV.24 et IV.25.

**Section efficace différentielle de diffusion.** Contrairement à la formulation intégrale des sections efficaces, nous constatons que le poids de Monte Carlo (Eq. IV.52) correspondant à la formulation intégrale de la section efficace différentielle $W_{sca}$ (Eq. IV.51) dépend de l'angle $\varphi_0$ (plus précisément de $\varphi_1$ et $\varphi_2$ suite à la gestion du module carré). En effet, $\varphi_1$ et $\varphi_2$ interviennent dans la quantité $\|\Delta\vec{r}\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$ faisant intervenir les coordonnées $(x_1, y_1)$ et $(x_2, y_2)$ des positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ de la surface projetée $\mathcal{P}$, qui sont données en coordonnées polaires Eq. IV.124 (en adaptant les indices). Ainsi, en injectant Eqs. IV.112 et IV.130 dans Eq. IV.51, la formulation intégrale de $W_{sca}$ devient :

$$\begin{aligned} W_{sca}(\vartheta_{sca}) = \int_0^{\pi} d\theta_o \, p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} \, p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \, p_{\Phi_1}(\varphi_1) \int_0^1 d\rho_1 \, p_{P_1}(\rho_1) \\ \times \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \, p_{\Phi_2}(\varphi_2) \int_0^1 d\rho_2 \, p_{P_2}(\rho_2) \, \check{w}(\rho_1, \varphi_1, \rho_2, \varphi_2, \theta_o, r_{eq}, \vartheta_{sca}) \end{aligned} \tag{IV.133}$$

**Regroupement en une seule formulation intégrale.** Tout comme nous l'avions fait dans Sec. IV.1.7, nous pouvons écrire une seule formulation intégrale pour l'ensemble

des propriétés radiatives et leurs sensibilités. En particulier, nous pouvons tout réécrire en utilisant la formulation intégrale de $W_{sca}$ (Eq. IV.133) de sorte que :

$$\left.\begin{array}{l}\sigma_k\\ \partial_\pi^n\sigma_k\\ W_{sca}\\ \partial_\pi W_k\\ CW_{sca}\end{array}\right\} = \int_0^\pi d\theta_o\, p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq}\, p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_0^{2\pi} d\varphi_1\, p_{\Phi_1}(\varphi_1) \int_0^1 d\rho_1\, p_{P_1}(\rho_1)$$

$$\times \int_0^{2\pi} d\varphi_2\, p_{\Phi_2}(\varphi_2) \int_0^1 d\rho_2\, p_{P_2}(\rho_2) \left\{\begin{array}{l} w_k(\rho_1,\theta_o,r_{eq})\\ w_{k,\pi,n}(\rho_1,\theta_o,r_{eq})\\ \check{w}(\rho_1,\varphi_1,\rho_2,\varphi_2,\theta_o,r_{eq})\\ \check{w}_\pi(\rho_1,\varphi_1,\rho_2,\varphi_2,\theta_o,r_{eq})\\ \check{w}_C(\rho_1,\varphi_1,\rho_2,\varphi_2,\theta_o,r_{eq})\end{array}\right. \tag{IV.134}$$

Les intégrales marquées en rouge indiquent que les formulations intégrales des sections efficaces $\sigma_k$ et $\partial_\pi^n\sigma_k$ ne dépendent pas des variables $\varphi_1, \varphi_2$ et $\rho_2$. Les échantillonnages de ces variables ne seront donc pas utilisés lors du calcul des fonctions poids correspondantes. Elles seront seulement nécessaires au calcul des fonctions poids en lien avec la section efficace différentielle de diffusion ($W_{sca}$, $\partial_\pi W_{sca}$ et $CW_{sca}$).

**Algorithme.** L'algorithme correspondant à la formulation intégrale précédente permettant de calculer toutes les propriétés radiatives et leurs sensibilités pour une suspension de particules sphéroïdales est donné par :

**Algorithme 8: Approximation de Schiff - Propriétés radiatives - Particules sphéroïdales**

- **Étape 1** : une orientation $\theta_o$ est échantillonnée sur $[0,\pi]$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\theta_o}(\theta_o)$ (Eq. IV.116).
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0,+\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ définissant la taille du sphéroïde (voir Eq. IV.123).
- **Étape 3** : un angle $\varphi_1$ est uniformément échantillonné sur $[0,2\pi]$ selon $p_{\Phi_1}(\varphi_1) = \frac{1}{2\pi}$ et une distance $\rho_1$ est échantillonnée sur $[0,1]$ selon $p_P(\rho_1) = 2\rho_1$.

Ceci permet de définir la première position $\vec{r}_1$ de coordonnées $(x_1, y_1)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$.

- **Étape 4** : un angle $\varphi_2$ est uniformément échantillonné sur $[0, 2\pi]$ selon $p_{\Phi_2}(\varphi_2) = \frac{1}{2\pi}$ et une distance $\rho_2$ est échantillonnée sur $[0, 1]$ selon $p_P(\rho_2) = 2\rho_2$. Ceci permet de définir la seconde position $\vec{r}_2$ de coordonnées $(x_2, y_2)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$.
- **Étape 5** : tous les poids de Monte Carlo sont calculés en utilisant les expressions de l'aire de la surface projetée (Eq. IV.114) et de la longueur de traversée (Eq. IV.125). Parmi ces poids, ceux concernant les sections efficaces $w_k(\rho_1, \theta_o, r_{eq})$ (Eqs. IV.23, IV.24 et IV.25) et leurs sensibilités $w_{k,\pi,n}(\rho_1, \theta_o, r_{eq})$ (Eqs. IV.78, IV.79 et IV.80) utilisent seulement les nombres aléatoires $\theta_o, r_{eq}$ et $\rho_1$. Les autres fonctions poids utilisent tous les échantillonnages : $\check{w}(\rho_1, \varphi_1, \rho_2, \varphi_2, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.52), $\check{w}_\pi(\rho_1, \varphi_1, \rho_2, \varphi_2, \theta_o, r_{eq})$ (Eqs. IV.84, IV.86 et IV.90) et $\check{w}_C(\rho_1, \varphi_1, \rho_2, \varphi_2, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.55).

Les résultats des simulations numériques obtenus à partir de l'algorithme précédent, qui permet de calculer simultanément les propriétés radiatives (et leurs sensibilités) d'une suspension de particules sphéroïdales homogènes de rapport d'élongation $R$ fixé, sont fournis dans Sec. IV.3.1.1. À noter que la prise en compte d'une distribution sur les élongations $R$ des particules sphéroïdales ne pose pas de difficulté : il suffit d'ajouter un échantillonnage supplémentaire sur l'élongation $R$ au tout début de l'algorithme. En pratique, ceci se traduit par l'ajout d'une ligne de code.

#### IV.2.1.2 Étude d'une suspension de particules cylindriques homogènes

**Données géométriques - particules cylindriques.** Ici, nous changeons de forme et considérons une suspension de particules cylindriques homogènes. On désigne par $R = \frac{a}{b}$ le rapport d'élongation d'un cylindre où $a$ est son rayon et $b$ sa demi-hauteur. Pour une particule cylindrique, la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ est constituée d'un rectangle ($x_0 \in [-\frac{a}{R}\sin\theta_o, \frac{a}{R}\sin\theta_o]$, et $y_0 \in [-a, a]$) et de deux demi-ellipses centrées en $(x_0 = -\frac{a}{R}\sin\theta_o, y_0 = 0)$ et $(x_0 = \frac{a}{R}\sin\theta_o, y_0 = 0)$ avec pour demi-axe $a$ suivant $y_0$ et $a\cos\theta_o$ suivant $x_0$ (voir Fig. IV.9). L'aire $P(\theta_o, r_{eq})$ de cette surface projetée est donnée par :

$$P(\theta_o, r_{eq}) = 4a^2 \cos\theta_o \left(\beta(\theta_o) + \frac{\pi}{4}\right) \tag{IV.135}$$

avec $\beta(\theta_o) = \tan\theta_o / R$.

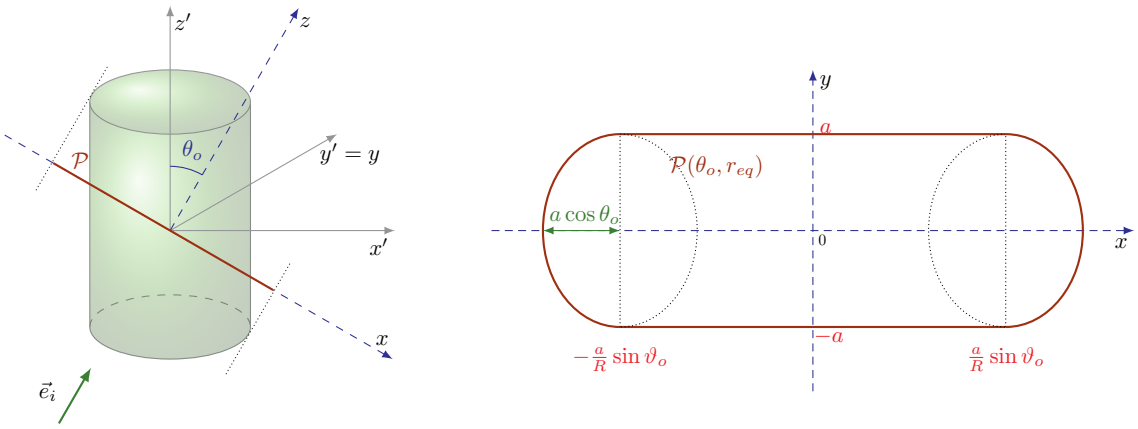



FIGURE IV.9 – Surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ d'un cylindre définie comme étant la surface projetée de la particule sur le plan passant par le centre du cylindre et perpendiculaire à la direction incidente $\vec{e}_i$. Cette surface projetée est constituée d'un rectangle de largeur $2a$ et de longueur $2\frac{a}{R}\sin\theta_o$ et de deux demi-ellipses de demi-axes $a\cos\theta_o$ et $a$ centrées respectivement en $(-\frac{a}{R}\sin\theta_o, 0)$ et $(\frac{a}{R}\sin\theta_o, 0)$. $\theta_o$ est l'orientation de la particule (angle entre la direction de $\vec{e}_i$ et l'axe de révolution $z'$). La quantité $r_{eq}$ est la taille caractéristique du cylindre correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume.

En introduisant les variables réduites $\xi_0 = x_0/(a\cos\theta_o)$ et $\eta_0 = y_0/a$, la longueur de traversée $l \equiv l(\vec{r}_0, \theta_o, r_{eq})$ [Xu and Katz, 2008] s'écrit pour $\beta \geq \sqrt{1-\eta_0^2}$,

$$l/a = \begin{cases} \dfrac{\xi_0 + \beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\sin\theta_o} & \text{si } |\xi_0 + \beta| \leq \sqrt{1-\eta_0^2} \\ \dfrac{-\xi_0 + \beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\sin\theta_o} & \text{si } |\xi_0 - \beta| \leq \sqrt{1-\eta_0^2} \\ \dfrac{2\sqrt{1-\eta_0^2}}{\sin\theta_o} & \text{sinon} \end{cases} \tag{IV.136}$$

et pour $\beta < \sqrt{1-\eta_0^2}$,

$$l/a = \begin{cases} \dfrac{\xi_0 + \beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\sin\theta_o} & \text{si } -\sqrt{1-\eta_0^2} - \beta \leq \xi_0 \leq -\sqrt{1-\eta_0^2} + \beta \\ \dfrac{2}{R\cos\theta_o} & \text{si } -\sqrt{1-\eta_0^2} + \beta \leq \xi_0 \leq \sqrt{1-\eta_0^2} - \beta \\ \dfrac{-\xi_0 + \beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\sin\theta_o} & \text{si } \sqrt{1-\eta_0^2} - \beta \leq \xi_0 \leq \sqrt{1-\eta_0^2} + \beta \\ \dfrac{2\sqrt{1-\eta_0^2}}{\sin\theta_o} & \text{sinon} \end{cases} \tag{IV.137}$$

**Procédures d'échantillonnages d'une orientation $\theta_0$, d'une taille $r_{eq}$ et d'une élongation.** Ces trois procédures d'échantillonnage sont identiques à celles décrites dans le cas de particules sphéroïdales et nous invitons le lecteur à se reporter, si nécessaire, aux paragraphes correspondants écrits dans Sec. IV.2.1.1.

En particulier, une fois que les quantités $R$ et $r_{eq}$ sont connues, le rayon $a$ et la demi-hauteur $b = \frac{a}{R}$ du cylindre sont entièrement déterminés. En particulier, le rayon $a$ est

donné par :

$$a = r_{eq}\left(\frac{2R}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{IV.138}$$

**Procédure d'échantillonnage d'une position $\vec{r}_0$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$.** Nous avons vu dans Sec. IV.1 que nous avions fait le choix d'un échantillonnage uniforme de la position $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$. L'objet de ce paragraphe est de détailler l'échantillonnage de la position $\vec{r}_0$. Ceci revient à générer deux nombres aléatoires $(x_0, y_0)$ afin de localiser la position $\vec{r}_0$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$. Pour ce faire, nous allons reformuler, dans un premier temps, l'intégrale $\int_{\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Effectuons le changement de variable :

$$\begin{aligned} x_0 &= a\xi_0 \cos\theta_o \\ y_0 &= a\eta_0 \end{aligned} \tag{IV.139}$$

où $(\xi_0, \eta_0)$ sont les coordonnées réduites pour la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ : $\eta_0 \in [-1, 1]$ et $\xi_0 \in [-\beta - \sqrt{1-\eta_0^2}, \beta + \sqrt{1-\eta_0^2}]$ (voir Fig. IV.10 et [Xu and Katz, 2008]). Ainsi

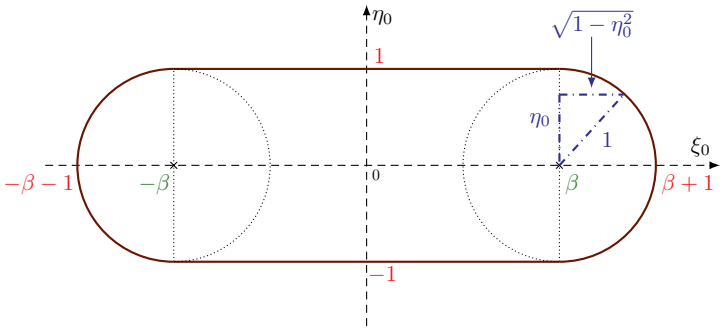



FIGURE IV.10 – Surface projetée d'un cylindre avec les variables réduites $\xi_0$ et $\eta_0$.

l'intégration sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ devient :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) &\equiv \int_{-a}^{a} dy_0 \int_{-a\cos\theta_o(1+\beta)}^{a\cos\theta_o(1+\beta)} dx_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) H[(x_0, y_0) \in \mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})] \\ &\equiv \int_{-1}^{1} d\eta_0 \int_{-(1+\beta)}^{1+\beta} d\xi_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\, a^2 \cos\theta_o H[(\xi_0 \pm \beta)^2 + \eta_0^2 \leq 1] \end{aligned} \tag{IV.140}$$

Introduisons maintenant les variables aléatoires $\Xi_0$ et $H_0$ respectivement distribuées selon $p_{\Xi_0}(\xi_0)$ et $p_{H_0}(\eta_0)$ de sorte que Eq. IV.140 s'écrive :

$$\int_{\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \equiv \int_{-1}^{1} d\eta_0\, p_{H_0}(\eta_0) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_0^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_0^2}} d\xi_0\, p_{\Xi_0}(\xi_0|\eta_0) \frac{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) a^2 \cos\theta_o}{p_{H_0}(\eta_0) p_{\Xi_0}(\xi_0|\eta_0)} \tag{IV.141}$$

Ainsi, pour échantillonner une position $\vec{r}_0$ sur la surface projetée $\mathcal{P}$, il convient d'échantillonner deux nombres $\eta_0 \in [-1, 1]$ et $\xi_0 \in [-\beta - \sqrt{1-\eta_0^2}, \beta + \sqrt{1-\eta_0^2}]$. Puisque nous

avons choisi un échantillonnage uniforme de la position $\vec{r}_0$, nous avons $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P(\theta_o, r_{eq})}$. Pour respecter ce choix, nous introduisons les fonctions de probabilité uniformes suivantes :

$$p_{H_0}(\eta_0) = \frac{1}{2} \tag{IV.142}$$

$$p_{\Xi_0}(\xi_0|\eta_0) = \frac{1}{2(\beta + \sqrt{1-\eta_0^2})} \tag{IV.143}$$

En utilisant les relations précédentes et $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P(\theta_o, r_{eq})}$, Eq. IV.141 devient :

$$\int_{\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \equiv \int_{-1}^{1} d\eta_0\, p_{H_0}(\eta_0) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_0^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_0^2}} d\xi_0\, p_{\Xi_0}(\xi_0|\eta_0)\, \frac{\beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\beta + \pi/4} \tag{IV.144}$$

où l'on a utilisé le fait que $\frac{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) a^2 \cos\theta_o}{p_{H_0}(\eta_0) p_{\Xi_0}(\xi_0|\eta_0)} = \frac{\beta+\sqrt{1-\eta_0^2}}{\beta+\pi/4}$.

Le calcul de la cumulée inverse (voir Encart 5) revient à exprimer les nombres aléatoires $\eta_0$ et $\xi_0$ qui sont données par :

$$\begin{aligned} \eta_0 &= 2\text{rand} - 1 \\ \xi_0 &= 2\left(\beta(\theta_o) + \sqrt{1-\eta_0^2}\right)\text{rand} - \left(\beta(\theta_o) + \sqrt{1-\eta_0^2}\right) \end{aligned} \tag{IV.145}$$

**Retour sur les formulations intégrales des propriétés radiatives.** Les formulations intégrales ont été établies dans Secs. IV.1.1.2 et IV.1.4. Pour plus de clarté, nous choisissons de réécrire ces formulations intégrales avec les éléments que nous venons de voir dans le cas d'une suspension de particules cylindriques.

**Sections efficaces $\sigma_k$.** En injectant Eqs. IV.112 et IV.144 dans Eq. IV.22, la formulation intégrale de la section efficace $\sigma_k$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \sigma_k = \int_0^{\pi} d\theta_o\, p_{\theta_o}(\theta_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq}\, p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{-1}^{1} d\eta_0\, p_{H_0}(\eta_0) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_0^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_0^2}} d\xi_0\, p_{\Xi_0}(\xi_0|\eta_0)\, \underbrace{w_k(\vec{r}_0, \theta_o, r_{eq}) \frac{\beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\beta + \pi/4}}_{w_k^{cyl}} \end{aligned} \tag{IV.146}$$

En observant Eq. IV.146, on remarque que la procédure d'échantillonnage de la position sur $\mathcal{P}$ décrite précédemment implique de multiplier le poids de Monte Carlo $w_k$ par le facteur $\frac{\beta+\sqrt{1-\eta_0^2}}{\beta+\pi/4}$. Ainsi, pour les sections efficaces d'une suspension constituée de particules cylindriques homogènes de rapport d'élongation $R$ fixé, le poids de Monte Carlo, noté $w_k^{cyl}$, est donné par :

$$w_k^{cyl} = w_k \frac{\beta + \sqrt{1-\eta_0^2}}{\beta + \pi/4} \tag{IV.147}$$

où les fonctions poids $w_k$ sont données par Eqs. IV.23, IV.24 ou IV.25, pour respectivement l'extinction, l'absorption et la diffusion.

**Section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$.** En procédant de même pour la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ (on utilise Eqs. IV.112 et IV.144 dans Eq. IV.51), la formulation intégrale s'écrit :

$$W_{sca} = \int_0^{\pi} d\theta_o p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{-1}^{1} d\eta_1 p_{H_1}(\eta_1) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_1^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_1^2}} d\xi_1 p_{\Xi_1}(\xi_1|\eta_1) \times \int_{-1}^{1} d\eta_2 p_{H_2}(\eta_2) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_2^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_2^2}} d\xi_2 p_{\Xi_2}(\xi_2|\eta_2) \breve{w}^{cyl} \tag{IV.148}$$

où l'on a posé d'une part $x_1 = a\xi_1 \cos\theta_o$, $y_1 = a\eta_1$ et d'autre part $x_2 = a\xi_2 \cos\theta_o$, $y_2 = a\eta_2$. $\breve{w}^{cyl}$ est le poids de Monte Carlo donnée par :

$$\breve{w}^{cyl} = \breve{w} \frac{(\beta + \sqrt{1-\eta_1^2})(\beta + \sqrt{1-\eta_2^2})}{(\beta + \pi/4)^2} \tag{IV.149}$$

avec la quantité $\breve{w}$ donnée par Eq. IV.83.

**Regroupement en une seule formulation intégrale.** Tout comme nous l'avions fait dans Secs. IV.1.7 et IV.2.1.1, nous pouvons écrire une seule formulation intégrale pour l'ensemble des propriétés radiatives et leurs sensibilités. En particulier, nous pouvons tout réécrire en utilisant la formulation intégrale de $W_{sca}$ (Eq. IV.148) de sorte que :

$$\left.\begin{array}{l} \sigma_k \\ \partial_\pi^n \sigma_k \\ W_{sca} \\ \partial_\pi W_k \\ CW_{sca} \end{array}\right\} = \int_0^{\pi} d\theta_o p_{\Theta_o}(\theta_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{-1}^{1} d\eta_1 p_{H_1}(\eta_1) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_1^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_1^2}} d\xi_1 p_{\Xi_1}(\xi_1|\eta_1)$$

$$\times \int_{-1}^{1} d\eta_2 p_{H_2}(\eta_2) \int_{-(\beta+\sqrt{1-\eta_2^2})}^{\beta+\sqrt{1-\eta_2^2}} d\xi_2 p_{\Xi_2}(\xi_2|\eta_2) \left\{\begin{array}{l} w_k^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \theta_o, r_{eq}) \\ w_{k,\pi,n}^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \theta_o, r_{eq}) \\ \breve{w}^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \theta_o, r_{eq}) \\ \breve{w}_\pi^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \theta_o, r_{eq}) \\ \breve{w}_C^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \theta_o, r_{eq}) \end{array}\right. \tag{IV.150}$$

avec les fonctions poids $w_k^{cyl}$, $\check{w}^{cyl}$, $w_{k,\pi,n}^{cyl}$, $\check{w}_\pi^{cyl}$ et $\check{w}_C^{cyl}$ données respectivement par Eqs. IV.147, IV.149 et

$$w_{k,\pi,n}^{cyl} = w_{k,\pi,n}\frac{\beta+\sqrt{1-\eta_0^2}}{\beta+\pi/4} \tag{IV.151}$$

$$\check{w}_\pi^{cyl} = \check{w}_\pi\frac{(\beta+\sqrt{1-\eta_1^2})(\beta+\sqrt{1-\eta_2^2})}{(\beta+\pi/4)^2} \tag{IV.152}$$

$$\check{w}_C^{cyl} = \check{w}_C\frac{(\beta+\sqrt{1-\eta_1^2})(\beta+\sqrt{1-\eta_2^2})}{(\beta+\pi/4)^2} \tag{IV.153}$$

avec les fonctions poids $w_{k,\pi,n}$ données par Eqs. IV.78, IV.79 et IV.80, $\check{w}_\pi$ donnée Eqs. IV.84, IV.86 et IV.90 et $\check{w}_C$ fournie par Eq. IV.55. Les intégrales marquées en rouge indiquent que les formulations intégrales des sections efficaces $\sigma_k$ et $\partial_\pi^n\sigma_k$ ne dépendent pas des variables $\eta_2$ et $\xi_2$. Les échantillonnages de ces variables ne seront donc pas utilisés lors de l'évaluation des fonctions poids correspondantes. Elles seront seulement nécessaires pour les fonctions poids en lien avec la section efficace différentielle de diffusion ($W_{sca}$, $\partial_\pi W_{sca}$ et $CW_{sca}$).

**Algorithme.** L'algorithme correspondant à la formulation intégrale précédente permettant de calculer toutes les propriétés radiatives et leurs sensibilités pour une suspension de particules cylindriques est donné par :

**Algorithme 9: Approximation de Schiff - Propriétés radiatives - Particules cylindriques**

- **Étape 1** : une orientation $\theta_o$ est échantillonnée sur $[0,\pi]$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\theta_o}(\theta_o)$ (Eq. IV.116).
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0,+\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$ définissant la taille du cylindre (voir Eq. IV.138).
- **Étape 3** : $\eta_1$ est uniformément échantillonné sur $[-1,1]$ selon $p_{H_1}(\eta_1)=\frac{1}{2}$ et $\xi_1$ est uniformément échantillonné sur $[-\beta(\theta_o)-\sqrt{1-\eta_1^2},\beta(\theta_o)+\sqrt{1-\eta_1^2}]$ selon $p_{\Xi_1}(\xi_1)=\frac{1}{2(\beta+\sqrt{1-\eta_1^2})}$. Ceci permet de définir une première position $(x_1,y_1)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o,r_{eq})$.
- **Étape 4** : $\eta_2$ est uniformément échantillonné sur $[-1,1]$ selon $p_{H_2}(\eta_2)=\frac{1}{2}$ et $\xi_2$ est uniformément échantillonné sur $[-\beta(\theta_o)-\sqrt{1-\eta_2^2},\beta(\theta_o)+\sqrt{1-\eta_2^2}]$ selon $p_{\Xi_2}(\xi_2)=\frac{1}{2(\beta+\sqrt{1-\eta_2^2})}$. Ceci permet de définir une seconde position $(x_2,y_2)$ sur la surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o,r_{eq})$.

- **Étape 5** : tous les poids de Monte Carlo sont calculés en utilisant les expressions de l'aire de la surface projetée (Eq. IV.135) et de la longueur de traversée (Eqs. IV.136 et IV.137). Parmi ces poids, ceux concernant les sections efficaces $w_k^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.147) et leurs sensibilités $w_{k,\pi,n}^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.151) utilisent seulement les nombres aléatoires $\theta_o, r_{eq}$ et $\rho_1$. Les autres fonctions poids utilisent tout les échantillonnages : $\breve{w}^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.149), $\breve{w}_\pi^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.152) et $\breve{w}_C^{cyl}(\eta_1, \xi_1, \eta_2, \xi_2, \theta_o, r_{eq})$ (Eq. IV.153).

Les résultats des simulations numériques obtenues à partir de l'algorithme précédent, qui permet de calculer simultanément les propriétés radiatives (et leurs sensibilités) d'une suspension de particules cylindriques homogènes de rapport d'élongation $R$ fixé, sont fournis à la section Sec. IV.3.1.1. À noter que la prise en compte d'une distribution sur les élongations $R$ des particules cylindriques ne pose pas de difficulté : il suffit d'ajouter un échantillonnage supplémentaire sur l'élongation $R$ au tout début de l'algorithme. En pratique, ceci se traduit par l'ajout d'une ligne de code.

### IV.2.2 Géométries complexes

Nous nous intéressons ici à la mise en œuvre de nos algorithmes pour toutes les géométries de particule dont les surfaces projetées et les longueurs de traversées ne sont pas connues analytiquement. Cela concerne les équations paramétriques non quadratiques (par exemple le super-sphéroïde [Gielis, 2003] ou l'hélice circulaire, qui ont un intérêt particulier en génie des systèmes photoréactifs) ou toutes autres géométries qui ne seraient pas définie par une équation paramétrique (dessin, données directement obtenues par imagerie, *etc.*). Contrairement à la section précédente, il nous faut donc évaluer numériquement un ensemble de calculs géométriques. Pour ce faire, nous utilisons des librairies de calcul scientifique issues de la recherche en synthèse d'image ainsi que quelques développements algorithmiques spécifiques. Le travail qui suit a été mené dans le cadre du projet Algue en collaboration avec Sebastian Weitz, qui a mené un post-doctorat sur la prise en compte des distributions de forme au sein des suspensions. Nous avons également travaillé avec la PME Méso-Star, qui dans le cadre du projet Algue, a pris en charge le développement d'un logiciel abouti reprenant nos codes (Financement : projet ATS « Algue » de l'Idex de Toulouse).

**Données géométriques.** Les librairies de calcul pour le suivi de rayon en géométrie complexe reposent sur une description de la géométrie de la particule dans un fichier CAO

(Conception Assistée par Ordinateur). Le domaine géométrique de la particule y est décrit par une surface fermée triangulée, c'est-à-dire une surface polyédrique dont les faces sont toutes triangulaires. Dans le cas d'une particule dont le modèle géométrique initial n'est pas un polyèdre (par exemple dans le cas de *Arthrospira platensis* (spiruline)) se pose alors la question de la triangulation de sa surface. De nombreuses librairies de calcul sont disponibles pour mener à bien ce travail de représentation des données géométriques. Cette question n'a pas été adressée dans le présent travail de thèse (elle a fait l'objet d'une partie de la prestation réalisée par Méso-Star). Nous supposons ici que ce travail a été fait en amont et nous partons d'un fichier CAO fourni par l'utilisateur. Nous faisons ce choix pour deux raisons. Premièrement, la question de la représentation géométrique est complètement indépendante de la physique que nous résolvons (l'approximation de Schiff sera résolue exactement pour toute géométrie spécifiée dans le fichier CAO). Deuxièmement, les outils de la synthèse d'image que nous utilisons permettent aujourd'hui de manipuler sans problème des données géométriques extrêmement raffinées contenant des millions de triangles. La question du maillage (à l'aide de surfaces triangulées) se résume donc à celle de la modélisation de la géométrie de la particule, qui est à la charge de l'utilisateur de nos algorithmes (par exemple le spécialiste en génie des systèmes photoréactifs).

**Fonctionnalités importantes des librairies de calcul scientifique pour le suivi de rayon en géométrie complexe.** Dès lors que l'on s'intéresse à des particules à géométrie complexe, on est amené à utiliser dans nos algorithmes certaines fonctionnalités disponibles dans les libraires de calcul scientifique. Parmi elles, on distingue le calcul de la première intersection entre une demi-droite et la géométrie, ainsi que l'échantillonnage uniforme sur les surfaces. Grâce aux deux fonctionnalités mentionnées ci-dessus, nous sommes en mesure de concevoir des algorithmes qui sont indépendants de la géométrie : ils contiennent seulement la physique du problème. On parle alors d'orthogonalité entre la donnée géométrique et la physique du problème. Cette notion d'orthogonalité est très utile puisqu'elle signifie que nous n'avons pas besoin de recoder la physique à chaque changement de géométrie. Par conséquent, nos algorithmes sont capables de résoudre l'approximation de Schiff pour n'importe quelle géométrie de particule spécifiée à partir d'un fichier CAO. Par contre, cela implique de construire des algorithmes sous certaines contraintes, en particulier, celle d'utiliser seulement les fonctions disponibles dans la librairie de calcul. Cela fait l'objet des paragraphes suivants.

**Longueur de traversée $l(\vec{r}_0)$.** La longueur de traversée $l$ d'un chemin en ligne droite intersectant la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule au point $\vec{r}_0$ (voir Fig. IV.11) est ici évaluée en utilisant la fonction `Intersect` de la librairie que nous utilisons pour le suivi de rayon

en géométrie complexe. Cette fonction prend en entrée une demi-droite, définie par son origine et un vecteur direction, et elle renvoie la position de la première intersection de cette demi-droite avec la surface de la particule. Pour toutes positions $\vec{r}_0$ de $\mathcal{P}$, l'algorithme donnant la longueur de traversée est le suivant :

**Algorithme 10: Longueur de traversée**

- **Étape 1** : la longueur de traversée $l$ est initialisée à 0.
- **Étape 2** : la position d'entrée $\vec{y}_{in}$ du chemin dans la particule est obtenue en appelant la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{r}_0$ et de direction $\vec{e}_i$ (la direction d'incidence).
- **Étape 3** : la position de sortie $\vec{y}_{out}$ du chemin est obtenue en appelant la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{y}_{in}$ et de direction $\vec{e}_i$.
- **Étape 4** : la distance $|\vec{y}_{out} - \vec{y}_{in}|$ est ajoutée à $l$.
- **Étape 5** : dans le cas des particules à géométrie concave, le chemin peut à nouveau intersecter la particule (voir Fig. IV.11). On appelle donc la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{y}_{out}$ et de direction $\vec{e}_i$ :
  - si aucune intersection avec la particule n'est trouvée, le chemin est définitivement sortie de la particule et l'algorithme s'arrête,
  - sinon l'algorithme boucle à l'**Étape 2** en remplaçant $\vec{r}_0$ par $\vec{y}_{out}$.

**Échantillonnage sur la surface projetée $\mathcal{P}$.** L'obtention de la surface projetée d'une géométrie tridimensionnelle triangulée (y compris son aire) est une problématique à part entière que nous allons ici contourner. Plutôt que d'échantillonner une position directement sur la surface projetée $\mathcal{P}$ comme dans le cas d'un cylindre ou d'un sphéroïde (voir Sec. IV.2.1), nous échantillonnons ici une position $\vec{r}_0$ sur une surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ contenant $\mathcal{P}$. Puis, nous testons si cette position $\vec{r}_0$ appartient à $\mathcal{P}$ en appelant la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{r}_0$ et de direction $\vec{e}_i$ : si une intersection est trouvée, alors $\vec{r}_0 \in \mathcal{P}$ et les fonctions poids sont calculées selon les équations données dans Sec. IV.1 dans lesquelles l'aire $P$ de $\mathcal{P}$ est remplacée par l'aire $P^{eng}$ de $\mathcal{P}^{eng}$ ; sinon $\vec{r}_0 \notin \mathcal{P}$ et les fonctions poids sont prises égales à zéro.

Pour illustrer ce qui vient d'être dit, nous allons détailler cette procédure sur la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ d'une particule isolée. Nous avons vu dans Sec. IV.1.1.1 que la formulation intégrale correspondante est donnée par Eq. IV.5, que nous rappelons ci-dessous :

$$\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) \tag{IV.154}$$

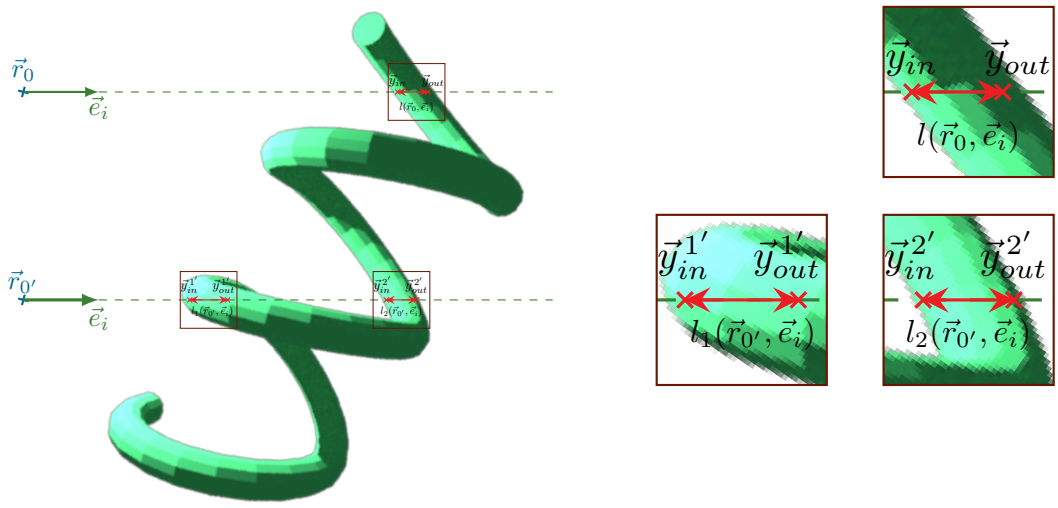



FIGURE IV.11 – Illustration du calcul de la longueur de traversée d'une particule à géométrie complexe (ici spiruline). Un premier cas est représenté : un chemin traversant une seule fois la particule sur une distance $l(\vec{r}_0, \vec{e}_i)$ est obtenu suite au calcul d'intersection entre la frontière de la particule et la demi-droite d'origine $\vec{r}_0$ (appartenant à la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule (non représentée ici)) et dirigée suivant la direction d'incidence $\vec{e}_i$. Indépendamment du premier cas, un second cas est également représenté. Cette fois-ci le chemin traversant la particule est obtenu en faisant la somme des deux chemins de longueurs $l_1(\vec{r}_{0'}, \vec{e}_i)$ et $l_2(\vec{r}_{0'}, \vec{e}_i)$ obtenus suite aux calculs des intersections entre la frontière de la particule et la demi-droite d'origine $\vec{r}_{0'} \in \mathcal{P}$ et dirigée suivant la direction d'incidence $\vec{e}_i$.

Cette formulation fait intervenir une intégrale sur la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule. Comme nous l'avons déjà mentionné, dès lors que la particule est à géométrie complexe, l'échantillonnage d'une position sur $\mathcal{P}$ est une difficulté. Afin d'utiliser la démarche proposée au début de ce paragraphe, nous reformulons l'intégrale Eq. IV.154 de sorte à intégrer sur une surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ connue contenant $\mathcal{P}$. Pour ce faire, nous augmentons le domaine d'intégration en introduisant une fonction de Heaviside $H(\vec{r}_0 \in \mathcal{P})$ :

$$\hat{\sigma}_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{\mathcal{P}^{eng}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_0 p_{R_0}(\vec{r}_0) \Big[ H(\vec{r}_0 \in \mathcal{P}) \times w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}) + H(\vec{r}_0 \notin \mathcal{P}) \times 0 \Big] \tag{IV.155}$$

où $w_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ est donné par Eq. IV.23. Cette écriture est bien équivalente à celle donnée par Eq. IV.154 puisque la fonction de Heaviside permet de conserver seulement les positions qui appartiennent à la surface projetée $\mathcal{P}$. Ensuite, on choisit d'échantillonner uniformément une position $\vec{r}_0$ sur la surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$, ce qui conduit à définir une fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ donnée par :

$$p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{P^{eng}(\vec{e}_o, r_{eq})} \tag{IV.156}$$

où $P^{eng}(\vec{e}_o, r_{eq})$ est l'aire de la surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ qui est entièrement connue. Compte tenu de la formulation intégrale (Eq. IV.155) et de la relation précédente, la fonction poids,

notée $\mathring{w}_{ext} \equiv \mathring{w}_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$, s'écrit :

$$\mathring{w}_{ext} = \begin{cases} w_{ext} = 2P^{eng}(\vec{e}_o, r_{eq}) \left[1 - e^{-k_e \kappa_r l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})} \cos(k_e(n_r - 1) l(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq}))\right] & \text{si } \vec{r}_0 \in \mathcal{P} \\ 0 & \text{si } \vec{r}_0 \notin \mathcal{P} \end{cases} \tag{IV.157}$$

L'algorithme de Monte Carlo s'énonce de la façon suivante :

**Algorithme 11: Section efficace d'extinction - particule isolée - géométrie complexe**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est échantillonnée sur la surface englobante $\mathcal{P}^{eng}(\vec{e}_o, r_{eq})$ contenant la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule, selon la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ (Eq. IV.156).
- **Étape 2** : la fonction poids $\mathring{w}_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ pour cette réalisation de l'algorithme est calculée via Eq. IV.157. Plus précisément :
  - si $\vec{r}_0 \in \mathcal{P}$, alors $\mathring{w}_{ext} = w_{ext}$
  - si $\vec{r}_0 \notin \mathcal{P}$, alors $\mathring{w}_{ext} = 0$

La démarche qui vient d'être présentée est applicable aux autres grandeurs étudiées dans ce manuscrit. En particulier, les fonctions poids sont égales à celles obtenues initialement à condition de remplacer l'aire $P$ de la surface projetée $\mathcal{P}$ par l'aire $P^{eng}$ de la surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ lorsque la condition d'appartenance à $\mathcal{P}$ est vérifiée et sont prises égales à 0 dans le cas échéant. À noter que dans le cas de la section efficace différentielle de diffusion, il faut que les deux positions échantillonnées se trouvent dans la surface projetée $\mathcal{P}$ pour que la fonction poids soit non nulle.

L'utilisation d'une surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ nous a permis de contourner une difficulté majeure puisque nous n'avons pas besoin de connaître la surface projetée de la particule. Toutefois, l'utilisation d'une telle surface $\mathcal{P}^{eng}$ est une source de variance dès lors qu'elle devient grande devant la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule. En pratique, ceci se traduit par une augmentation significative de l'écart type : la fonction poids est égale à zéro la plupart du temps et non nulle seulement de temps en temps. Par conséquent, il est nécessaire de choisir une surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ qui soit une *bonne approximation* de la surface projetée $\mathcal{P}$. Notre choix pour $\mathcal{P}^{eng}$ est donné dans le paragraphe suivant et pour les géométries que nous avons traitées jusqu'à présent nous n'avons pas détecté de difficultés de convergence particulières liées à ce choix.

**Échantillonnage de l'orientation de la particule.** Redéfinir la représentation de la géométrie mise en mémoire vive[5] à chaque nouvelle orientation de la particule (*i.e.* à

5. RAM *Random Access Memory* en anglais.

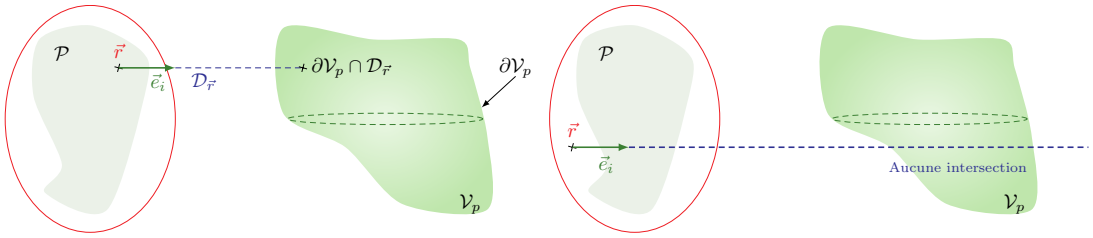



FIGURE IV.12 – Illustration de l'échantillonnage d'une position sur la surface projetée $\mathcal{P}$. Une position $\vec{r}$ est uniformément échantillonnée sur une surface englobante $\mathcal{P}^{eng}$ contenant la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule. Puis, on cherche l'intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{r}}$ d'origine $\vec{r}$ et dirigée suivant la direction incidente $\vec{e}_i$. Si une intersection est trouvée, alors la position $\vec{r}$ appartient à la surface projetée $\mathcal{P}$ (figure de gauche) ; sinon $\vec{r} \notin \mathcal{P}$ (figure de droite).

chaque réalisation de l'algorithme) est très couteux en temps de calcul. Or nous avons vu dans Sec. IV.1.4 que les expressions des fonctions poids sont indépendantes de l'angle d'orientation $\phi_{sca}$. On constate alors qu'échantillonner une orientation $\vec{e}_o$ est strictement équivalent à échantillonner une direction d'incidence $\vec{e}_i$. Par conséquent, pour tenir compte de la distribution des orientations, il n'y a plus besoin d'aller modifier le fichier contenant la géométrie de la particule : l'orientation $\vec{e}_o$ y sera fixée une fois pour toutes. Pour échantillonner de façon isotrope une orientation, on procède de la façon suivante : on définit une sphère englobante $\mathcal{S}^{eng}$ de rayon $R^{eng}$ contenant la particule, puis on échantillonne uniformément une position $\vec{s}$ sur la surface de $\mathcal{S}^{eng}$. On définit alors $\vec{e}_i$ comme étant le vecteur unité qui depuis la position $\vec{s}$ pointe vers le centre de la sphère $\mathcal{S}^{eng}$ (voir Fig. IV.13). On vient ainsi d'échantillonner de façon isotrope la direction $\vec{e}_i$ qui permet d'échantillonner l'orientation de la particule. Par suite, la surface projetée de la particule correspondante à cette orientation est définie comme étant le disque tangent à la sphère à la position $\vec{s}$ et de rayon $R^{eng}$. On peut alors se reporter au paragraphe précédent afin d'échantillonner une position $\vec{r}_0$ sur ce disque. En tenant compte de la remarque mentionnée au paragraphe précédent, il est préférable de choisir la sphère englobante la plus petite possible afin d'éviter une augmentation de l'incertitude sur l'estimation de la grandeur considérée.

**Échantillonnage de la taille de la particule.** Comme mentionné précédemment, redéfinir la représentation de la géométrie mise en RAM à chaque nouvelle taille de particule est couteux en temps de calcul. Par conséquent, en pratique, il n'est pas envisageable de modifier le fichier comportant la géométrie à chaque réalisation de l'algorithme de Monte Carlo afin de prendre en compte la distribution de taille des particules. Pour contourner ce problème, une astuce consiste à définir les dimensions de la géométrie considérée (donnée par une CAO) une fois pour toutes dans le fichier comportant la géométrie. Ceci fixe en particulier le volume de la particule que l'on notera $V_p^{\text{CAO}}$. Supposons maintenant que

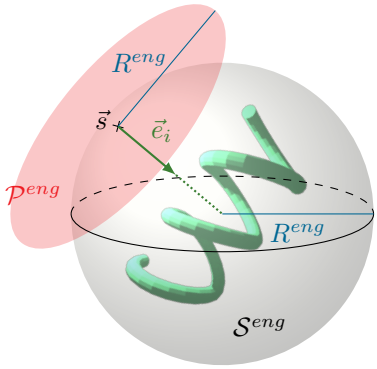



FIGURE IV.13 – Illustration de l'échantillonnage de l'orientation d'une particule. Pour échantillonner de façon isotrope une orientation, on définit une sphère englobante $\mathcal{S}^{eng}$ de rayon $R^{eng}$ contenant la particule, puis on échantillonne uniformément une position $\vec{s}$ sur la surface de $\mathcal{S}^{eng}$. On définit alors $\vec{e}_i$ comme étant le vecteur unité qui depuis la position $\vec{s}$ pointe vers le centre de la sphère $\mathcal{S}^{eng}$, permettant ainsi de définir l'orientation de la particule.

l'on souhaite étudier l'interaction entre un rayonnement incident de longueur d'onde $\lambda_e$ avec une particule de volume $\mathcal{V}_p$ caractérisée par son rayon $r_{eq}$ correspondant au rayon équivalent de la sphère en volume. Puisque nous disposons seulement d'une particule de volume $V_p^{\text{CAO}}$, nous réalisons un changement d'échelle en adaptant la longueur d'onde. En notant $\delta_g = \left(\frac{V_p^{\text{CAO}}}{V_p}\right)^{1/3}$ le rapport de changement d'échelle, la longueur d'onde que l'on doit prendre en compte dans le code est non pas $\lambda_e$ mais $\lambda_e \delta_g$. Le problème est ainsi équivalent (voir Fig. IV.14). En particulier, le paramètre de taille est bien conservé : $x^{\text{CAO}} = \frac{2\pi r_{eq}^{\text{CAO}}}{\delta_g \lambda_e} = \frac{2\pi r_{eq}}{\lambda_e} = x$.

**Échantillonnage de la forme des particules.** Comme nous l'avons mentionné pour les distributions de taille et d'orientation, la prise en compte de la distribution des formes des particules nécessite également de modifier la représentation de la géométrie mise en mémoire vive à chaque réalisation de l'algorithme, ce qui est très couteux en temps de calcul. Mais cette fois-ci, contrairement aux paragraphes précédents, il n'y a pas d'astuce pour contourner ce problème. Par exemple, si une suspension est composée d'un mélange de particules de formes hélicoïdales et super-sphéroïdales, alors il faudra nécessairement modifier le fichier de géométrie à chaque réalisation de l'algorithme. Pour illustrer un tel algorithme prenons l'exemple de la section efficace différentielle $W_{sca}$ donnée par la formulation intégrale Eq. IV.51 à laquelle nous rajoutons une intégrale sur les distributions

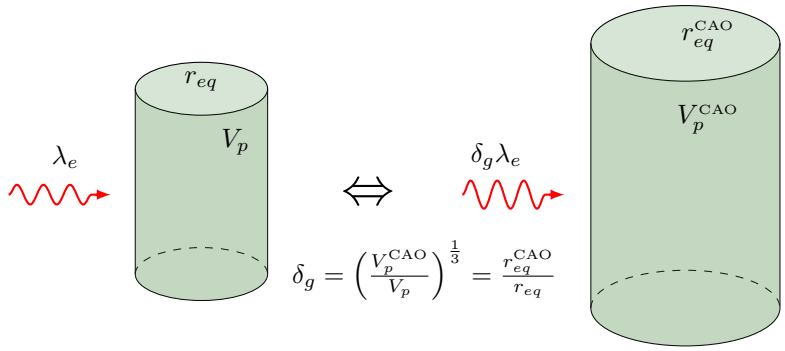



FIGURE IV.14 – Schématisation de l'adaptation de la longueur d'onde du rayonnement incident en fonction de la taille de la géométrie fixée. Soit une particule de volume $V_p$ caractérisée par un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon équivalent de la sphère en volume, et soumise à un rayonnement incident de longueur d'onde $\lambda_e$. La résolution du problème de diffusion pour une telle particule est équivalent à résoudre le problème de diffusion pour une particule de volume $V^{\mathrm{CAO}}$ caractérisée par un rayon $r_{eq}^{\mathrm{CAO}}$, et qui est soumise à un rayonnement incident de longueur d'onde $\delta_g \lambda_e$. La quantité $\delta_g$ étant le rapport entre les deux rayons équivalents, soit $\delta_g = \frac{r_{eq}^{\mathrm{CAO}}}{r_{eq}}$.

de forme :

$$W_{sca}(\vartheta_{sca}) = \int_{\mathcal{D}_{\vec{G}}} d\vec{g} p_{\vec{G}}(\vec{g}) \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \times \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \breve{w}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vartheta_{sca}) \tag{IV.158}$$

que l'on choisit de réécrire sous une forme plus compacte suivante :

$$W_{sca}(\vartheta_{sca}) = \int_{\mathcal{D}_{\vec{G}}} d\vec{g} p_{\vec{G}}(\vec{g}) \int_{\mathcal{D}_{\vec{Y}}} d\vec{y} p_{\vec{Y}}(\vec{y}) \breve{w}(\vec{g}, \vec{y}) \tag{IV.159}$$

où l'on a introduit la variable aléatoire $\vec{Y} = (\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$. L'algorithme correspondant à la formulation intégrale précédente s'énonce :

**Algorithme 12: Échantillonnage d'une forme à chaque réalisation de l'algorithme**

- **Étape 1** : une forme $\vec{g}$ est échantillonnée selon $p_{\vec{G}}(\vec{g})$.
- **Étape 2** : un vecteur $\vec{y}$ (regroupant l'orientation $\vec{e}_o$, la taille $r_{eq}$ et deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$) est échantillonné selon $p_{\vec{Y}}(\vec{y})$.
- **Étape 3** : la fonction poids $\breve{w}(\vec{g}, \vec{y})$ pour cette réalisation de l'algorithme est calculée.

Cet algorithme est coûteux en temps de calcul puisque l'on génère à chaque réalisation de l'algorithme une nouvelle géométrie qui implique de modifier le fichier contenant la

géométrie. Toutefois, suite aux travaux de Sebastian Weitz, nous avons pu proposer une technique afin de mieux gérer la prise en compte des formes des particules [Weitz et al., 2016]. L'idée est la suivante : pour chaque forme considérée au sein de la suspension, on échantillonne plusieurs chemins (au lieu d'échantillonner un chemin par forme comme dans l'algorithme précédent). Pour montrer l'intérêt de la technique, imaginons que l'on souhaite faire $N$ réalisations de l'algorithme et que nous avons une suspension constituée de $M$ formes ($M < N$ voire même $M \ll N$). Par conséquent, une même forme peut-être échantillonnée à plusieurs reprises, ce qui est couteux en temps de calcul. L'idée technique proposée par Sebastian Weitz consiste à échantillonner plusieurs chemins pour chacune des $M$ formes considérées (l'avantage est que l'on ne chargera jamais deux fois la même géométrie). L'algorithme correspondant devient :

**Algorithme 13: Échantillonnage d'une forme - optimisation**

- **Étape 1** : une forme $\vec{g}$ est échantillonnée selon $p_{\vec{G}}(\vec{g})$.
- **Étape 2** : pour cette forme, on répète $N_{\vec{Y}}$ fois la procédure suivante :
  - **Étape 2.1** : un vecteur $\vec{y}$ (regroupant l'orientation $\vec{e}_o$, la taille $r_{eq}$ et deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$) est échantillonné selon $p_{\vec{Y}}(\vec{y})$.
  - **Étape 2.2** : le poids de Monte Carlo $\check{w}(\vec{g}, \vec{y})$ est calculé.

On répète cet algorithme autant de fois qu'il y a de formes. À l'issue de cette procédure, on peut calculer une estimation de la grandeur considérée ainsi que son écart type. De plus, on est en mesure de fournir le nombre de réalisations $N_{\vec{Y}}$ optimal pour chacune des formes [Weitz et al., 2016].

**L'algorithme complet pour la section efficace d'extinction.** Ce paragraphe a pour objectif de récapituler les étapes de l'algorithme pour la section efficace d'extinction (par exemple) en précisant les procédures d'échantillonnage qui viennent d'être détaillées.

**Algorithme 14: Algorithme complet**

- **Étape 1** : une forme $\vec{g}$ est échantillonnée selon $p_{\vec{G}}(\vec{g})$.
- **Étape 2** : pour cette forme, on répète $N_{\vec{Y}}$ fois la procédure suivante :
  - **Étape 2.1** : une orientation $\vec{e}_i$ est échantillonnée sur $4\pi$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_i}(\vec{e}_i)$.
  - **Étape 2.2** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.

- **Étape 2.3** : une position $\vec{r}_0$ est échantillonnée sur la surface englobante $\mathcal{P}^{eng}(\vec{e}_o, r_{eq})$ contenant la surface projetée $\mathcal{P}(\vec{e}_o, r_{eq})$ de la particule, selon la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ (Eq. IV.156).
- **Étape 2.4** : la fonction poids $\mathring{w}_{ext}(\vec{r}_0, \vec{e}_o, r_{eq})$ pour cette réalisation de l'algorithme est calculée via Eq. IV.157. Plus précisément :
  - **Étape 2.4.1** si $\vec{r}_0 \in \mathcal{P}$, alors on calcule la longueur de traversée ; sinon l'algorithme boucle à l'**étape 2.4.2** :
    - **Étape 2.4.1.1** : la longueur de traversée $l$ est initialisée à 0.
    - **Étape 2.4.1.2** : la position d'entrée $\vec{y}_{in}$ du chemin dans la particule est obtenue en appelant la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{r}$ et de direction $\vec{e}_i$.
    - **Étape 2.4.1.3** : la position de sortie $\vec{y}_{out}$ du chemin est obtenue en appelant la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{y}_{in}$ et de direction $\vec{e}_i$.
    - **Étape 2.4.1.4** : la distance $|\vec{y}_{out} - \vec{y}_{in}|$ est ajoutée à $l$.
    - **Étape 2.4.1.5** : dans le cas des particules à géométrie concave, le chemin peut à nouveau intersecter la particule (voir Fig. IV.11). On appelle donc la fonction `Intersect` pour la demi-droite d'origine $\vec{y}_{out}$ et de direction $\vec{e}_i$ : si aucune intersection avec la particule n'est trouvée, le chemin est définitivement sortie de la particule et l'algorithme s'arrête ; sinon l'algorithme boucle à l'**étape 2.4.1.2** en remplaçant $\vec{r}_0$ par $\vec{y}_{out}$.
    - **Étape 2.4.1.6** : le poids de Monte Carlo $\mathring{w}_{ext} = w_{ext}$ est calculé par Eq. IV.157.
  - **Étape 2.4.2** : si $\vec{r}_0 \notin \mathcal{P}$, alors $\mathring{w}_{ext} = 0$

**Le logiciel StarSchiff.** C'est un logiciel libre, disponible à l'adresse suivante `https://gitlab.com/meso-star/schiff`, développé, dans le cadre du projet ALGUE, par la société d'ingénierie informatique Méso-Star qui a utilisé les travaux précédemment présentés. Les géométries y sont définies par des équations paramétriques dont chaque paramètre peut avoir une distribution statistique. Parmi ces équations paramétriques, on peut citer la superformule proposée par GIELIS [Gielis, 2003] qui permet de représenter un bon nombre de particules à géométries complexes. Le logiciel inclut la triangulation de la surface des géométries et la représentation des données ainsi obtenues dans la mémoire vive. Bien

entendu, il contient également la résolution de l'approximation de Schiff avec l'algorithme que nous avons présenté dans Sec. IV.1.7 en tenant compte du raccord aux grands angles pour la section efficace différentielle de diffusion et sa cumulée (voir Sec. III.6.3).

L'expertise des ingénieurs de Méso-Star a permis de mettre à disposition de la communauté des photo-procédés un logiciel parfaitement optimisé pour calculer simultanément toutes les propriétés radiatives et leurs sensibilités d'une suspension de particules homogènes à géométrie complexe. Cette optimisation idéale se traduit, pour l'utilisateur, par des temps de calcul essentiellement liés aux calculs des fonctions sinus et cosinus ainsi que des fonctions de Bessel qui interviennent dans les fonctions poids des grandeurs considérées. À titre d'illustration, nous allons donner les temps de calcul obtenus à partir du logiciel StarSchiff sur un ordinateur portable de bureau. Ces temps de calcul incluent l'estimation des sections efficaces, de la section efficace différentielle de diffusion et de sa cumulée pour 1000 angles et 35 longueurs d'onde ($\lambda_0 \in [350, 750nm]$) en tenant compte des distributions de taille et d'orientation. Les indices de réfraction des micro-organismes considérés sont ceux donnés dans [Dauchet et al., 2015]. Pour les micro-organismes tels que *Chlamydomonas reihardtii* (sphéroïde) et *Rhodospirillum* (cylindre), le temps de calcul est de l'ordre de une minute. Pour la micro-algues *Arthospira platensis* (spiruline) qui est plus délicate à traiter car elle est de plus grande taille (comparé à celles mentionnées juste avant) et est très allongée (voir Fig. II.12), il faut une vingtaine de minutes.

## IV.3 Résultats

Dans les sections précédentes, nous avons construit les algorithmes de Monte Carlo (Sec. IV.1) et discuté de leur mise en œuvre pratique (Sec. IV.2) permettant d'évaluer les propriétés radiatives d'une suspension de particules homogènes en tenant compte des distributions de taille, d'orientation et éventuellement de forme. Suite à ces travaux, nous proposons ici de fournir quelques résultats en vue de valider nos codes. En particulier, nous ferons une validation numérique à l'aide de codes de référence disponibles en ligne (voir Secs. IV.3.1.1 et IV.3.1.2) ainsi qu'une validation à partir de données expérimentales fournies par l'Institut Fresnel à Marseille (voir Sec. IV.3.2).

### IV.3.1 Validation numérique de nos codes de Monte Carlo

Cette validation se fera en comparant nos résultats avec ceux obtenus à partir de codes de référence disponibles en ligne implémentant les méthodes T-Matrix et DDA (voir Secs. II.1.2.2 et II.1.2.3). Compte tenu de certaines contraintes et limitations actuelles de ces méthodes (T-Matrix ne permet pas d'envisager des géométries complexes, et DDA n'est pas vraiment adaptée pour les prises de moyennes sur les tailles et les orientations,

voir Sec. II.1.2.5), la validation est restreinte à des particules sphéroïdales et cylindriques. Dans toute la suite, les configurations étudiées ne tiennent pas compte d'une distribution de forme : on fixe le rapport d'élongation $R$.

#### IV.3.1.1 Validation de nos codes de Monte Carlo avec un code T-Matrix sur une suspension constituée de particules homothétiques, homogènes et de forme soit cylindrique soit sphéroïdale

Dans cette section, nous considérons une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux (respectivement cylindriques) homogènes et homothétiques (*i.e.* de rapport d'élongation $R$ fixé). En accord avec les observations expérimentales, la distribution de taille d'une telle suspension est modélisée par une loi log-normale [Dauchet et al., 2015; Kandilian et al., 2016] :

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right] \tag{IV.160}$$

où $\bar{r}_{eq}$ est la valeur moyenne de la taille $r_{eq}$ (correspondant au rayon équivalent de la sphère en volume) de l'échantillon considéré, et $s$ la largeur de la distribution. Les algorithmes de Monte Carlo évaluant les propriétés radiatives d'une telle configuration ont été donnés dans Secs. IV.2.1.1 (sphéroïde) et IV.2.1.2 (cylindre). Nous proposons ici de valider les codes correspondants avec un code T-Matrix disponible en ligne (`www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko`) qui est un code de référence dans la communauté électromagnétique ([Mishchenko et al., 2002], voir également Sec. II.1.2.2). Cependant, les limitations actuelles du code T-Matrix que nous utilisons ne permettent pas de traiter des particules de grandes tailles devant la longueur d'onde avec de fortes élongations. Nous ne pourrons donc pas avec ce code explorer tout la gamme d'intérêt $\bar{x} \in ]0, 200]$ pour l'étude des micro-organismes [Dauchet et al., 2015]. Nous désignerons par $\bar{x}_{lim}$ la limite du paramètre de taille au delà duquel le code T-Matrix ne nous fournit plus de résultat. Dans la suite, pour des raisons purement graphiques, nous représenterons les efficacités $Q_k = \frac{\sigma_k}{\langle P \rangle}$ ($\langle P \rangle$ étant la moyenne de l'aire de la surface projetée $\mathcal{P}$, l'indice $k$ fait référence à *ext*, *abs* ou *sca*) et la fonction de phase $p = \frac{W_{sca}}{\sigma_{sca}}$ au lieu des sections efficaces $\sigma_k$ et de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$. Les différentes configurations qui vont suivre ont fait l'objet d'une publication [Charon et al., 2016].

**Sections efficaces.** Figs. IV.15 et IV.16 représentent les efficacités de diffusion $Q_{sca}$ et d'absorption $Q_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $\bar{x} = \frac{2\pi}{\lambda_e} \bar{r}_{eq}$ ($\bar{r}_{eq}$ est le rayon moyen de la sphère équivalente en volume) respectivement d'une suspension de particules sphéroïdales et cylindriques. Les résultats de l'approximation de Schiff sont obtenus par la méthode de Monte Carlo avec $N = 10^6$ réalisations et avec des incertitudes numériques inférieures à

0.2%. Ils sont comparés avec le code T-Matrix [Mishchenko et al., 2002] dans l'intervalle de paramètre de taille accessible (i.e. pour $\bar{x} < \bar{x}_{lim}$). Comme on le constate sur les courbes Figs. IV.15 et IV.16, l'approximation de Schiff fournit de très bons résultats pour des paramètres de taille typiques des micro-organismes photosynthétiques ($\bar{x} > 10$) lorsque l'indice de réfraction est faible ($n_r = 1.01$) : l'erreur relative est toujours inférieure à 2%. Comme on pouvait s'y attendre (puisque l'on s'écarte du domaine de validité de l'approximation de Schiff), la précision diminue progressivement dès lors que les contrastes d'indices augmentent. Pour $n_r = 1.1$, correspondant à la valeur limite haute pour l'étude des micro-organismes photosynthétiques, on observe une erreur relative qui atteint 7.5% pour l'efficacité de diffusion $Q_{sca}$ et 16% pour l'efficacité d'absorption $Q_{abs}$.

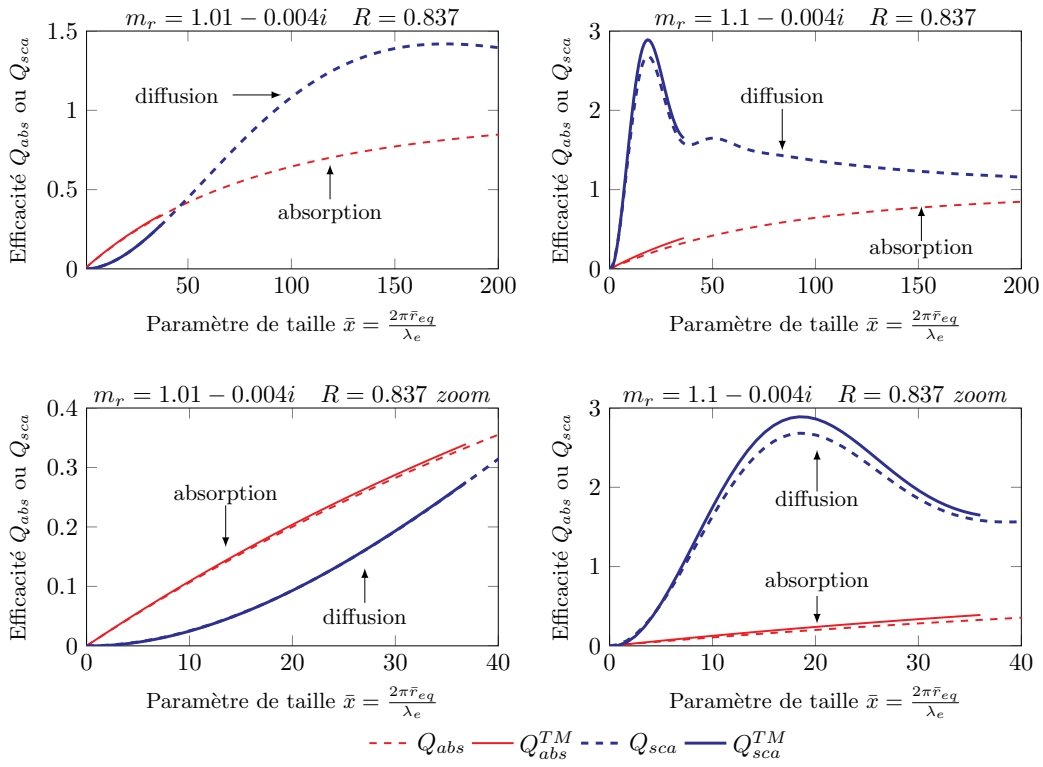



FIGURE IV.15 – Efficacités de diffusion $Q_{sca}$ et d'absorption $Q_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $\bar{x}$ d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes, homothétiques avec prise en compte des distributions de taille et d'orientation des particules. $\bar{r}_{eq}$ est le rayon moyen de la sphère équivalente en volume. Comparaison entre l'approximation de Schiff ($Q_k$) résolue par la méthode de Monte Carlo avec $N = 10^6$ millions de réalisations (incertitudes inférieures à 0.2%) et la référence T-Matrix ($Q_k^{TM}$). Paramètres : $\lambda_e = 0.45\,\mu m, s = 1.18, R = 0.837, \kappa_r = 4.10^{-3}, n_r = 1.01$ et $n_r = 1.1$.

**Section efficace différentielle de diffusion.** Figs. IV.17 et IV.18 représentent la fonction de phase $p(\vartheta_{sca})$ ainsi que la quantité $\sin(\vartheta_{sca})p(\vartheta_{sca})$ représentant la contribution de l'angle $\vartheta_{sca}$ à la cumulée de la fonction de phase d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux (respectivement cylindriques) homogènes et homothétiques en

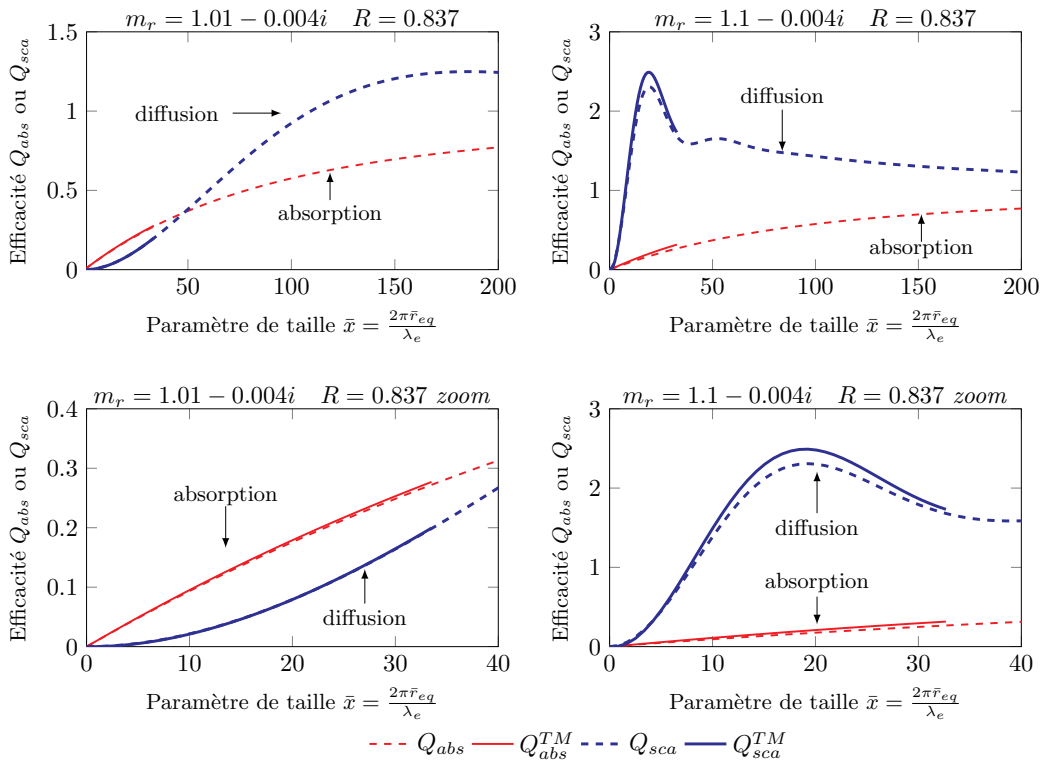



FIGURE IV.16 – Efficacités de diffusion $Q_{sca}$ et d'absorption $Q_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $\bar{x}$ d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques cylindriques homogènes, homothétiques avec prise en compte des distributions de taille et d'orientation des particules. $\bar{r}_{eq}$ est le rayon moyen de la sphère équivalente en volume. Comparaisons entre l'approximation de Schiff ($Q_k$) résolue par la méthode de Monte Carlo avec $N = 10^6$ millions de réalisations (incertitudes inférieures à 0.2%) et la référence T-Matrix ($Q_k^{TM}$). Paramètres : $\lambda_e = 0.45\,\mu m, s = 1.18, R = 0.837, \kappa_r = 4.10^{-3}, n_r = 1.01$ et $n_r = 1.1$.

tenant compte des prises de moyenne sur les tailles et les orientations des particules. Les courbes sont tracées pour un indice de réfraction $m_r = 1.08 - 0.004i$ (qui est plutôt grand pour l'étude des micro-organismes photosynthétiques). Nous observons que les résultats de l'approximation de Schiff résolue par la méthode de Monte Carlo se superposent plutôt bien avec ceux de références obtenus avec T-Matrix jusqu'à un angle de diffusion $\vartheta_{sca} \approx 70°$ (Fig. IV.17) et $\vartheta_{sca} \approx 100°$ (Fig. IV.18). En ce qui concerne les plus grands angles de diffusion, les écarts observés sont plus importants. Néanmoins, ceci n'est pas problématique en soi dans la mesure où, pour les grands angles, les contributions à la totalité de l'énergie diffusée sont nettement plus faibles comparées à celles fournies par les petits angles. Ainsi, l'approximation de Schiff est tout à fait satisfaisante au regard des besoins de l'ingénierie de la photosynthèse.

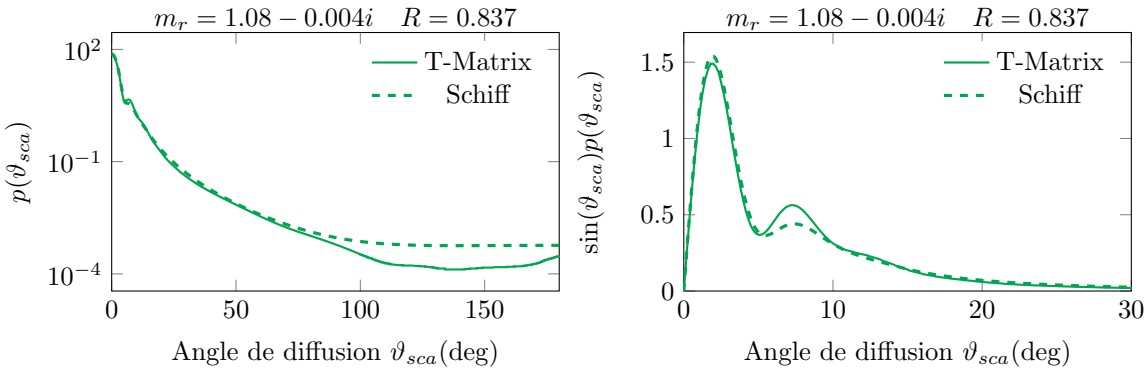



FIGURE IV.17 – Fonction de phase $p(\vartheta_{sca})$ et $\sin\vartheta_{sca}p(\vartheta_{sca})$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ pour une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques avec prise en compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules. Comparaison entre l'approximation de Schiff (traits pointillés) résolue par la méthode de Monte Carlo et la méthode de référence T-Matrix (traits plein). Paramètres : $\lambda_e = 450\ nm$, $\bar{r}_{eq} = 2.55\ \mu m$ (*i.e.* $\bar{x} = 35.6$), $s = 1.18$, $R = 0.837$, $\kappa_r = 4.10^{-3}$, $n_r = 1.08$, $\theta_l = 14°$. Les paramètres $A$ et $B$ utilisés pour l'expression aux grands angles (Eq. III.200) sont données par $A = 5.85.10^{-14}$ et $B = 3.39$.

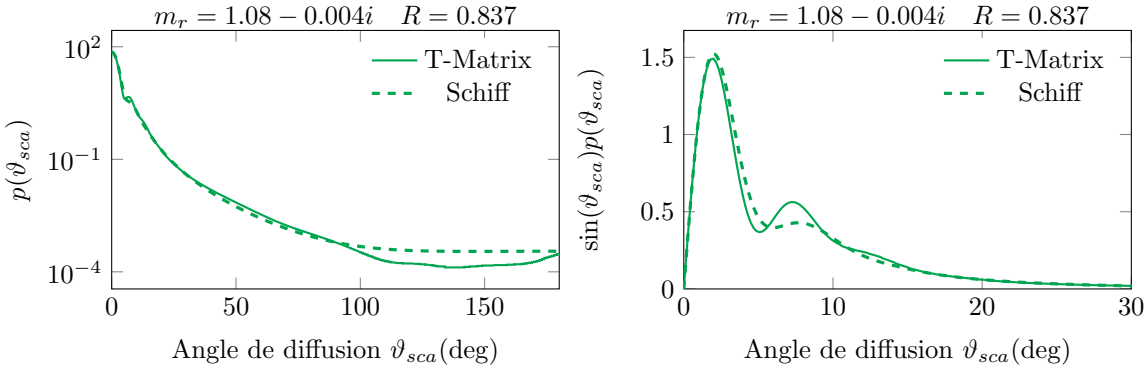



FIGURE IV.18 – Fonction de phase $p(\vartheta_{sca})$ et $\sin\vartheta_{sca}p(\vartheta_{sca})$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ pour une suspension de micro-organismes photosynthétiques cylindriques homogènes et homothétiques avec prise en compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules. Comparaison entre l'approximation de Schiff (traits pointillés) résolue par la méthode de Monte Carlo et la méthode de référence T-Matrix (traits plein). Paramètres : $\lambda_e = 450\ nm$, $\bar{r}_{eq} = 2.38\ \mu m$ (*i.e.* $\bar{x} = 33.2$), $s = 1.18$, $R = 0.9$, $\kappa_r = 4.10^{-3}$, $n_r = 1.08$, $\theta_l = 15.4°$. Les paramètres $A$ et $B$ utilisés pour l'expression aux grands angles (Eq. III.200) sont données par $A = 4.06.10^{-14}$ et $B = 3.58$.

**Sensibilités paramétriques.** Dans Sec. IV.1.6.1, nous avons donné les éléments pour obtenir les sensibilités des sections efficaces suivant les paramètres longueur d'onde $\lambda_e$, partie réelle $n_r$ et partie imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfraction $m_r$. Nous proposons ici de valider ce calcul de sensibilité obtenue par la méthode de Monte Carlo en utilisant l'approche des différences finies (voir Encart 6). Figs. IV.19, IV.21 et IV.22 montrent que l'évaluation des sensibilités directement par la méthode de Monte Carlo est en accord avec

une approche par différences finies. À noter que, les incertitudes numériques associées à l'évaluation de ses sensibilités par la méthode de Monte Carlo sont négligeables devant celles calculées par différences finies. Ceci rend l'utilisation de la méthode de Monte Carlo très pertinente pour ce type de calcul. À l'aide des figures, nous donnons maintenant une interprétation du calcul de sensibilité. Dans Fig. IV.19, on constate que $\sigma_{sca}$ est moins sensible à $n_r$ lorsque celui-ci augmente. À noter que $\sigma_{abs}$ n'est pas sensible à $n_r$ (car $\sigma_{abs}$ ne dépend pas de $n_r$). Dans Fig. IV.21, on remarque que $\sigma_{sca}$ est moins sensible à $\kappa_r$ lorsque celui-ci augmente et que la sensibilité de $\sigma_{abs}$ diminue lorsque $\kappa_r$ augmente mais reste toutefois importante. Enfin, dans Fig. IV.21, on constate que les sections efficaces d'absorption $\sigma_{abs}$ et de diffusion $\sigma_{sca}$ sont plus sensibles à la longueur d'onde lorsque celle ci diminue. Autrement dit, la longueur d'onde aura davantage d'influence, sur la grandeur considérée, lorsqu'elle est petite.

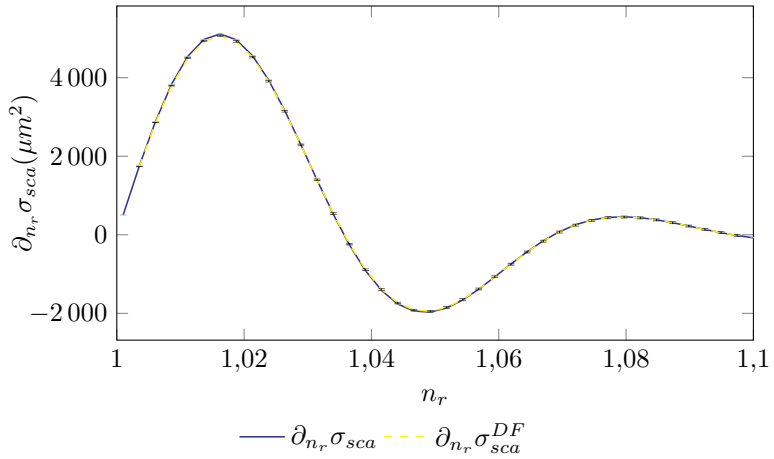



FIGURE IV.19 – Sensibilités $\partial_{n_r}\sigma_{sca}$ de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ selon le paramètre $n_r$ : étude d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques avec prise en compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules (la sensibilité $\partial_{n_r}\sigma_{abs}$ étant nulle, elle n'est pas représentée). Comparaison entre les sensibilités $\partial_{n_r}\sigma_{sca}$ calculées directement à partir des algorithmes de Monte Carlo et les sensibilités $\partial_{n_r}^{DF}\sigma_{sca}$ calculées à l'aide de l'approche classique des différences finies. Les barres d'erreurs indiquées sont celles correspondant aux différences finies, celles obtenues par Monte Carlo sont négligeables devant ces dernières. Paramètres : $\lambda_e = 0.45\,\mu m, \bar{r}_{eq} = 3.963\,\mu m, s = 1.18, R = 0.837$, $n_r \in ]1, 1.1]$ et $\kappa_r = 0.004$.

**Encart 6: Validation des sensibilités par la méthode des différences finies**

Afin de s'assurer que l'étude de sensibilité obtenues directement avec la méthode de Monte Carlo fournit le bon résultat, les expressions des sensibilités peuvent être validées en utilisant la méthode des différences finies. Pour ce faire, considérons que l'on souhaite évaluer la sensibilité $\partial_\pi G(\pi_k)$ de la grandeur $G$ suivant le paramètre $\pi$ au point $\pi_k$ (voir Fig. IV.20). La méthode de Monte Carlo nous fournit les valeurs de la grandeur $G$ (qui ont été validées préalablement) évaluées aux points $\pi_{k-1}$, $\pi_k$ et $\pi_{k+1}$ ainsi que la valeur de la sensibilité $\partial_\pi G$ évaluée au point $\pi_k$. C'est cette dernière valeur que l'on cherche à valider via la méthode des différences finies dont la sensibilité de la grandeur $G$ suivant le paramètre $\pi$ peut-être calculée à partir de la relation :

$$\partial_\pi G^{DF}(\pi_k) = \frac{G(\pi_k + \delta\pi) - G(\pi_k - \delta\pi)}{2\delta\pi} \tag{IV.161}$$

Si $\partial_\pi G^{DF} \approx \partial_\pi G$, alors les expressions des sensibilités sont validées. Nous pouvons également calculer l'écart type associé à l'estimation de la sensibilité à partir de la relation :

$$\operatorname{std} \partial_\pi G^{DF}(\pi_k) = \frac{\operatorname{std} G(\pi_k + \delta\pi) + \operatorname{std} G(\pi_k - \delta\pi)}{2\delta\pi} \tag{IV.162}$$

avec $2\delta\pi = \pi_{k+1} - \pi_{k-1}$. En pratique, la valeur de l'écart type obtenue avec la méthode des différences finies est plus élevé que celle obtenue avec un calcul direct par la méthode de Monte Carlo. Ceci met en avant la pertinence de calculer des sensibilités par la méthode de Monte Carlo, en plus du fait que cela ne demande pas de temps de calcul numérique supplémentaire.

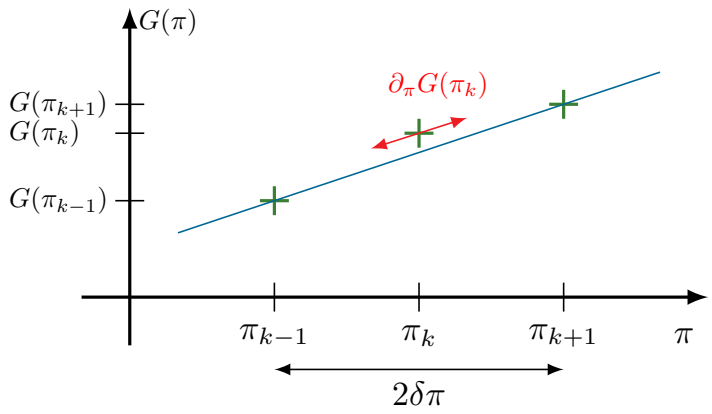



FIGURE IV.20 – Représentation schématique de la détermination de la sensibilité de la grandeur $G$ suivant le paramètre $\pi$ en utilisant la méthode des différences finies à partir des résultats de l'estimation de la grandeur $G$ par la méthode de Monte Carlo.

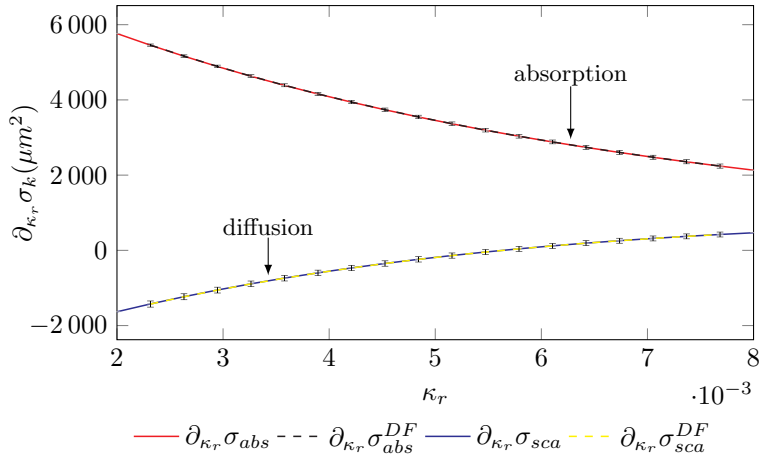



FIGURE IV.21 – Sensibilités $\partial_{\kappa_r}\sigma_k$ des sections efficaces de diffusion $\sigma_{sca}$ et d'absorption $\sigma_{abs}$ selon le paramètre $\kappa_r$ : étude d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques avec prise en compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules. Comparaison entre les sensibilités $\partial_{\kappa_r}\sigma_k$ calculées directement à partir des algorithmes de Monte Carlo et les sensibilités $\partial^{DF}_{\kappa_r}\sigma_k$ calculées à l'aide de l'approche classique des différences finies. Les barres d'erreurs indiquées sont celles correspondant aux différences finies, celles obtenues par Monte Carlo sont négligeables devant ces dernières. Paramètres : $\lambda_e = 0.45\,\mu m, \bar{r}_{eq} = 3.963\,\mu m, s = 1.18, R = 0.837$, $\kappa_r \in [2.10^{-3}, 8.10^{-3}]$ et $n_r = 1.01$.

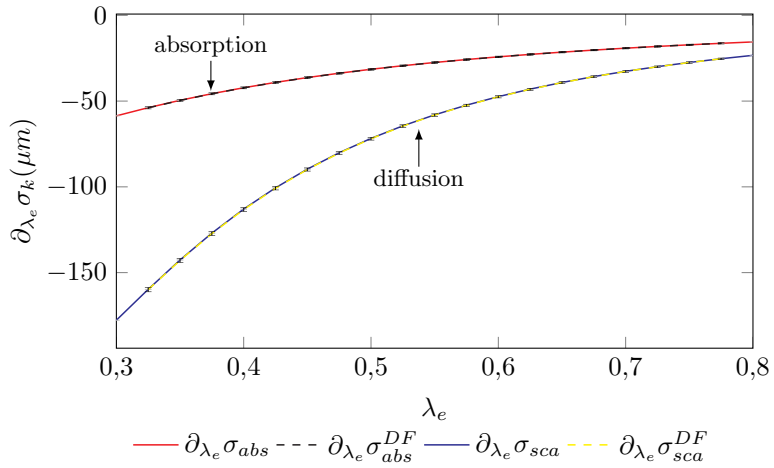



FIGURE IV.22 – Sensibilités $\partial_{\lambda_e}\sigma_k$ des sections efficaces de diffusion $\sigma_{sca}$ et d'absorption $\sigma_{abs}$ selon le paramètre $\lambda_e$ : étude d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques avec prise en compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules. Comparaison entre les sensibilités $\partial_{\lambda_e}\sigma_k$ calculées directement à partir des algorithmes de Monte Carlo et les sensibilités $\partial^{DF}_{\lambda_e}\sigma_k$ calculées à l'aide de l'approche classique des différences finies. Les barres d'erreurs indiquées sont celles correspondant aux différences finies, celles obtenues par Monte Carlo sont négligeables devant ces dernières. Paramètres : $\lambda_e \in [0.3, 0.8]\,\mu m$, $m_r = 1.01 - 0.004i$, $\bar{r}_{eq} = 3.963\,\mu m, s = 1.18, R = 0.837$.

#### IV.3.1.2 Validation avec un code ADDA sur une particule sphéroïdale homogène

Précédemment (voir Sec. IV.3.1.1), nous avons vu que le code de référence T-Matrix que nous avons utilisé ne permet pas de valider notre code pour des paramètres de taille $\bar{x} > 35$. Afin de valider notre code et de montrer la pertinence de l'approximation de Schiff (qui est d'autant plus valide aux grands paramètres de taille), nous proposons d'utiliser le code ADDA disponible en ligne (https ://github.com/adda-team/adda) [Yurkin and Hoekstra, 2011]. Ce code, basé sur la méthode DDA (voir Sec. II.1.2.3), sert de référence dans la communauté de la diffusion par des particules. Son utilisation va nous permettre ici d'aller explorer un plus grand intervalle de la gamme de paramètres de taille.

Dans la suite, nous considérons une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux possédant les mêmes caractéristiques que celle de la figure Fig. IV.15 avec toutefois une différence majeure : nous ne tiendrons pas compte de la distribution de taille des particules (les particules de la suspensions sont donc toutes de la même taille). D'un point de vue algorithmique, ceci signifie que nous ne tenons pas compte de l'étape d'échantillonnage d'une taille (voir par exemple l'algorithme dans Sec. IV.1.7). Nous noterons alors avec un exposant tilde les grandeurs sections efficaces $\tilde{\sigma}_k$ et section efficace différentielle de diffusion $\tilde{W}_{sca}$ pour bien spécifier que l'on tient compte de la moyenne sur les orientations des particules mais pas de celle concernant les tailles des particules. Ce choix ayant été fait seulement pour des raisons de temps de calcul numérique qui deviennent important avec le code ADDA (ou d'autres codes implémentant la méthode DDA) dès lors que l'on tient compte des distributions de tailles. Ceci n'a bien évidemment pas d'impact sur la pertinence de l'approximation de Schiff.

Fig. IV.23 représente les résultats des sections efficaces $\tilde{\sigma}_k$ tracés pour deux indices de réfraction relatifs différents $m_r = 1.01 - 0.004i$ et $m_r = 1.1 - 0.004i$. Le code ADDA utilisé nous fournit des résultats jusqu'à un paramètre de taille approchant $x = 100$ dans le premier cas, et $x = 80$ dans le second cas. D'une part, ceci permet de valider nos codes dans une plus large gamme de paramètre de taille (comparer à la section Sec. IV.3.1.1 avec T-Matrix). D'autre part, ceci permet de montrer la pertinence de l'approximation de Schiff, comme on peut également le constater sur les courbes où sont tracées les erreurs relatives (voir Fig. IV.23). On remarque alors que la section efficace de diffusion est d'autant mieux estimée que lorsque le paramètre de taille augmente, même pour l'indice de réfraction relatif $m_r = 1.1 - 0.004i$ qui représente la limite haute pour l'utilisation de l'approximation de Schiff. Ceci est moins vrai pour la section efficace d'absorption qui peut atteindre une erreur relative de l'ordre de 15% (cas $n_r = 1.1$).

Fig. IV.24 représente la section efficace différentielle de diffusion $\tilde{W}_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une particule sphéroïdale pour quatre couples de la partie

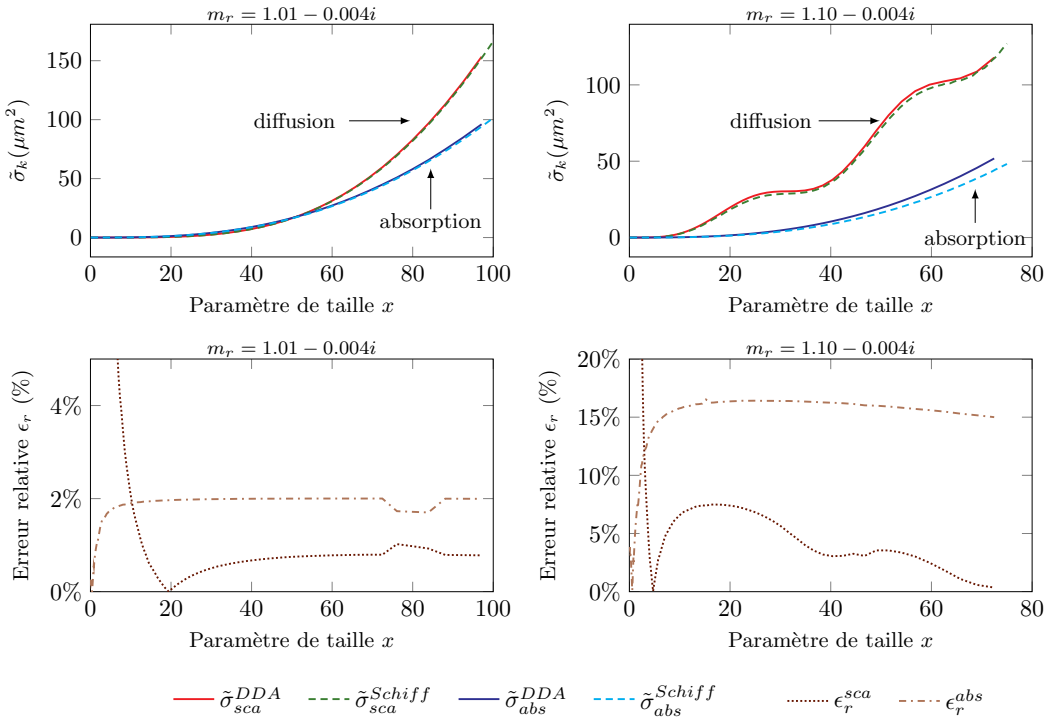



FIGURE IV.23 – Sections efficaces de diffusion $\tilde{\sigma}_{sca}$ et d'absorption $\tilde{\sigma}_{abs}$ en fonction du paramètre de taille $x$ d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux de tailles fixées en tenant compte de la distribution sur les orientations des particules. Comparaison entre les résultats obtenus par la résolution de l'approximation de Schiff par la méthode de Monte Carlo (avec $N = 10^6$ réalisations) et ceux obtenus avec un code de référence (code ADDA) utilisant la méthode DDA avec 8 dipôles ($dpl$) par longueur d'onde. Ces résultats ont été tracés pour deux indices de réfractions relatifs $m_r = 1.01 - 0.004i$ (colonne de gauche) et $n_r = 1.1 - 0.004i$ (colonne de droite). Les deux derniers graphiques représentent les erreurs relatives $\epsilon_r$ entre les résultats obtenus avec la méthode de référence DDA et l'approximation de Schiff. Paramètres : $R = 0.837$, $\lambda = 0.45\,\mu m$, $\kappa_r = 0.004$, $N = 10^6, dpl = 8$.

réelle de l'indice de réfraction relatif $n_r$ et du paramètre de taille $x$ : $(n_r = 1.01, x \approx 92.5), (n_r = 1.1, x \approx 69), (n_r = 1.01, x \approx 51.5)$ et $(n_r = 1.1, x \approx 51.5)$. Sur ces courbes, les résultats de l'approximation de Schiff aux petits angles résolue avec la méthode de Monte Carlo avec $10^7$ réalisations sont comparés avec ceux de référence fournis par le code ADDA utilisant huit dipôles par longueur d'onde pour discrétiser la particule. On rappelle que dans le cadre de l'approximation de Schiff, l'angle limite $\theta_l$ entre les petits et les grands angles de diffusion est donné par $\theta_l = \sqrt{\frac{2}{k_e \check{a}}}$, avec ici $\check{a} = a = R^{1/3}\frac{x}{k_e}$, soit $\theta_l = \sqrt{\frac{2}{R^{1/3}x}}$. Malgré cette limite (qui est approximative), les courbes pour des angles de diffusion allant jusqu'à 15° ou 20° ont été tracées, ce qui est parfois bien au delà de la valeur de $\theta_l$. Ceci permet de mettre en avant les difficultés de convergence que l'on rencontre comme on peut le constater notamment sur la figure en haut à gauche de Fig. IV.24 (Cas $n_r = 1.01$ et $x \approx 92.5$) ainsi que sur les tracés des erreurs relatives. Globalement, pour des angles de diffusion inférieurs à $\theta_l$, l'approximation de Schiff fournit

des résultats cohérents par rapport à ceux de référence. Pour un indice de réfraction $n_r = 1.1$ (limite pour l'approximation), l'erreur relative est de l'ordre ou inférieure à 20% excepté pour quelques pics. Ce que l'on peut remarquer, c'est que même s'il y a des difficultés de convergence, l'approximation de Schiff aux petits angles fournit une bonne tendance aux angles de diffusion supérieurs à $\theta_l$. En conclusion, au regard de l'application photo-procédés, l'approximation de Schiff est tout à fait satisfaisante.

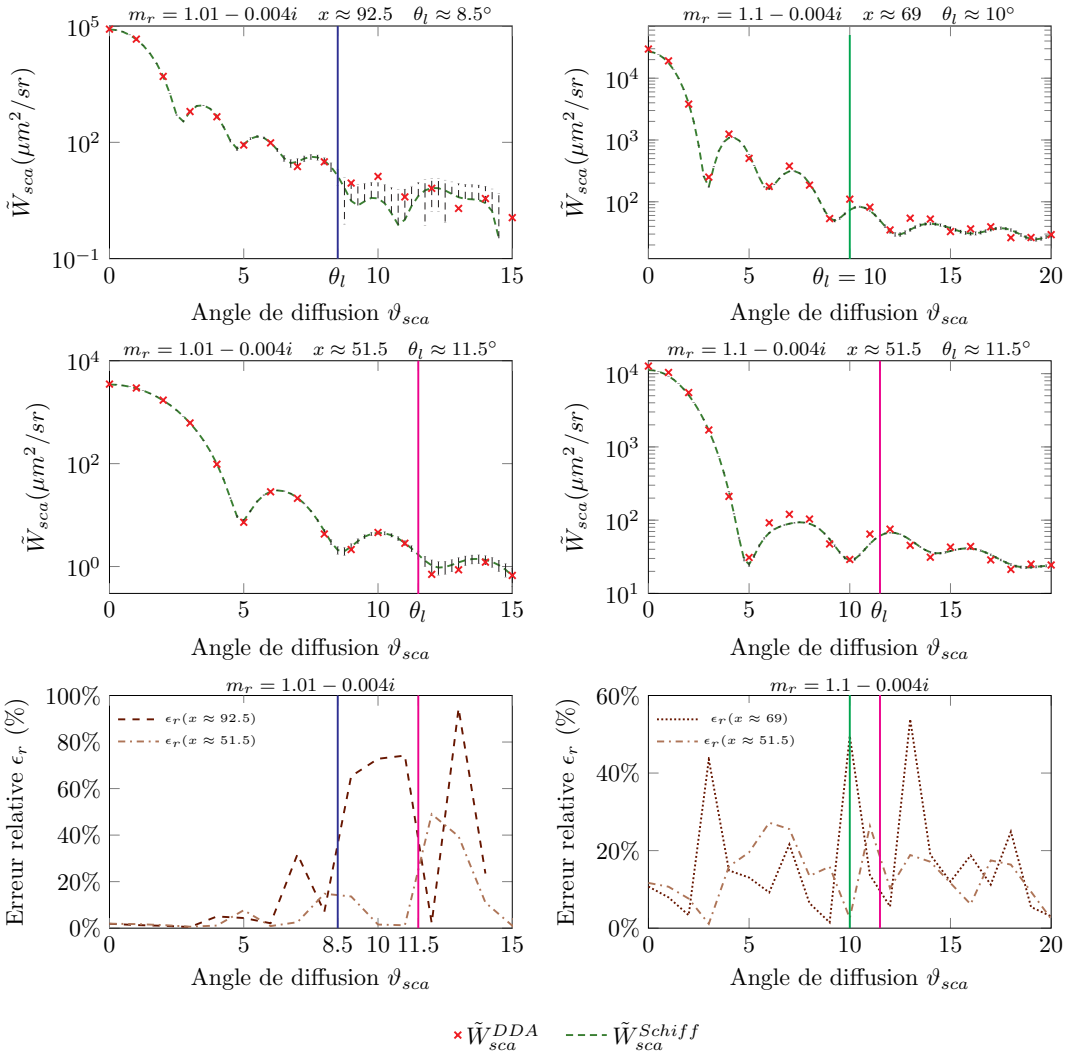



FIGURE IV.24 – Section efficace différentielle de diffusion $\tilde{W}_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux de tailles fixées en tenant compte de la distribution sur les orientations des particules. Comparaison entre les résultats obtenus par la résolution de l'approximation de Schiff par la méthode de Monte Carlo (avec $N = 10^7$ réalisations) et ceux obtenus avec un code de référence (code ADDA) utilisant la méthode DDA avec 8 dipôles ($dpl$) par longueur d'onde . Ces résultats ont été tracés pour deux indices de réfractions relatifs réels $n_r = 1.01$ (colonne de gauche) et $n_r = 1.1$ (colonne de droite) et pour trois paramètres de taille différents $x \approx 92.5$ (en haut à gauche), $x \approx 69$ (en haut à droite) et $x \approx 51.5$ (au milieu). Les deux derniers graphiques représentent les erreurs relatives $\epsilon_r$ entre la méthode de référence DDA et l'approximation de Schiff. Paramètres : $R = 0.837$, $\lambda = 0.45\,\mu m$, $\kappa_r = 0.004$, $N = 10^7, dpl = 8, \theta_l = \sqrt{\frac{2}{R^{1/3}x}}$.

### IV.3.2 Vers une validation expérimentale de nos codes

Les sections précédentes Secs. IV.3.1.1 et IV.3.1.2 ont permis de valider l'approximation de Schiff pour des particules cylindriques et sphéroïdales. Les algorithmes construits dans Sec. IV.1 étant indépendant de la géométrie (orthogonalité), ils nous permettent d'envisager leur mise en œuvre pour des géométries complexes. Toutefois, comme nous l'avons déjà mentionné, la résolution numérique des équations de Maxwell pour des particules à géométries complexes possédant des grands paramètres de taille est, à l'heure actuelle, une difficulté (voir Sec. II.1.2). Ceci rend donc difficile une validation numérique de nos codes pour ces géométries. Ce constat nous amène à envisager une validation expérimentale en utilisant le principe de l'analogie micro-onde qui sera discutée plus loin. L'avantage ici, c'est que nous pouvons envisager n'importe quelle géométrie, à condition d'être capable de les fabriquer (par usinage ou par impression 3D). Cependant, les particules auxquelles nous sommes particulièrement intéressés possèdent des faibles contrastes d'indices. D'un point de vue expérimental, ceci se traduit par une faible signature électromagnétique qui est difficile à mesurer à cause de la sensibilité au bruit et aux incertitudes de mesures [Saleh et al., 2017]. Par conséquent, réaliser ce type de mesure sur des particules dites ténues (*soft particles* en anglais) est un véritable défi qui requiert un équipement de pointe ainsi qu'un savoir faire de haut niveau. Les chercheurs de l'Institut Fresnel à Marseille, spécialistes dans les expériences d'analogie micro-onde en chambre anéchoïque, ont accepté de relever un tel défi. L'enjeu ici est donc double : d'une part, en ce qui nous concerne, il va s'agir de valider nos codes sur des géométries complexes, et d'autre part, pour l'équipe de l'Institut Fresnel, il va s'agir d'optimiser leur expérience pour pouvoir mesurer des faibles signaux suite à l'interaction entre l'onde et la cible (modélisant une particule).

Dans ce qui va suivre, nous allons présenter la première phase de ce travail de collaboration entre l'Institut Fresnel, l'Institut Pascal à Clermont-Ferrand ainsi que le centre RAPSODEE à Albi. Pour cette première phase, les expériences ont été menées sur des cibles sphéroïdales possédant des faibles contrastes d'indice avec leur milieu environnant (ici l'air). Ceci n'est bien sûr qu'une première étape en vue d'étudier des géométries plus complexes. L'intérêt de cette première étape est d'étudier la faisabilité et la précision des mesures expérimentales pour une telle cible, c'est-à-dire avec une faible signature électromagnétique. Avant de présenter les résultats de cette étude, nous décrivons brièvement le principe d'analogie micro-onde ainsi que les configurations expérimentales étudiées.

**Principe de l'analogie micro-onde.** Comme nous l'avons précédemment mentionné, l'expérience se base sur le principe de l'analogie micro-onde, lui même basé sur la règle d'invariance d'échelle des équations de Maxwell qui est valable quelque soit la forme, la morphologie ou l'orientation des particules [Mishchenko et al., 2006; Gustafson, 2009;

Vaillon and Geffrin, 2014]. Plus précisément, le principe de l'analogie micro-onde consiste à réaliser un changement d'échelle tout en conservant la forme, le rapport entre l'indice de réfraction de la particule et de son milieu environnant, ainsi que le rapport taille sur longueur d'onde. Autrement dit, la forme, l'indice de réfraction relatif $m_r$ et le paramètre de taille $x$ de la particule dite analogue (*i.e.* ayant subi un changement d'échelle) doivent être identiques à ceux de la particule réelle que l'on souhaite étudier (voir Fig. IV.25).

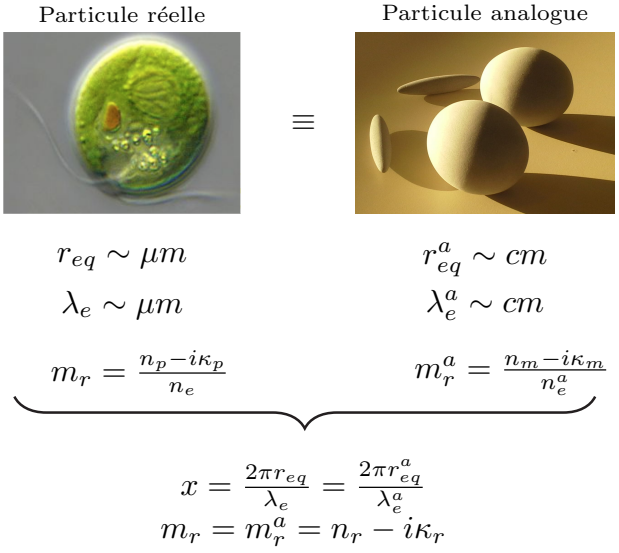



FIGURE IV.25 – Principe de l'analogie micro-onde. Le paramètre de taille $x$ et l'indice de réfraction de la particule réelle et de la particule analogue (la cible) sont identiques. $r_{eq}$ correspond au rayon équivalent de la sphère en volume, $\lambda_e$ est la longueur d'onde à laquelle est soumise la particule, et $n_e$ est l'indice de réfraction du milieu environnant. L'exposant $a$ fait référence à la particule analogue. $n_p$ et $\kappa_p$ sont les parties réelle et imaginaire de l'indice de réfraction de la particule réelle tandis que $n_m$ et $\kappa_m$ sont celles de la particule analogue (la cible). On a également posé $n_r = \frac{n_p}{n_e} = \frac{n_m}{n^a_m}$ et $\kappa_r = \frac{\kappa_p}{n_e} = \frac{\kappa_m}{n^a_m}$.

**Particules analogues.** Dans la suite, nous considérons que la particule analogue, évoquée ci-dessus, représente un micro-organisme photosynthétique homogène de forme sphéroïdale. Ceci étant une première étape vers des géométries plus complexes comprenant d'éventuelles hétérogénéités. L'avantage de la forme sphéroïdale, en plus de représenter un certain nombre de particules (notamment des micro-organismes), est qu'elle peut être usinée à l'aide de machines outils classiques notamment disponibles au Centre de Transfert de Technologie - SIGMA-Clermont à Clermont-Ferrand. Pour la présente étude, deux types de sphéroïdes homogènes pour trois indices de réfraction différents (voir Fig. IV.26), soit six sphéroïdes, ont été fabriqués par A. CHEVALIER et N. BLANCHARD. Le premier type est un sphéroïde plutôt allongé avec un paramètre de taille $x \approx 5.5$ et un rapport d'élongation $R = 0.202$. Il a été baptisé *Laurel*. Le second est un sphéroïde plus proche d'une

sphère avec un paramètre de taille $x \approx 14$ et un rapport d'élongation $R = 0.833$. Il a été baptisé *Hardy*.

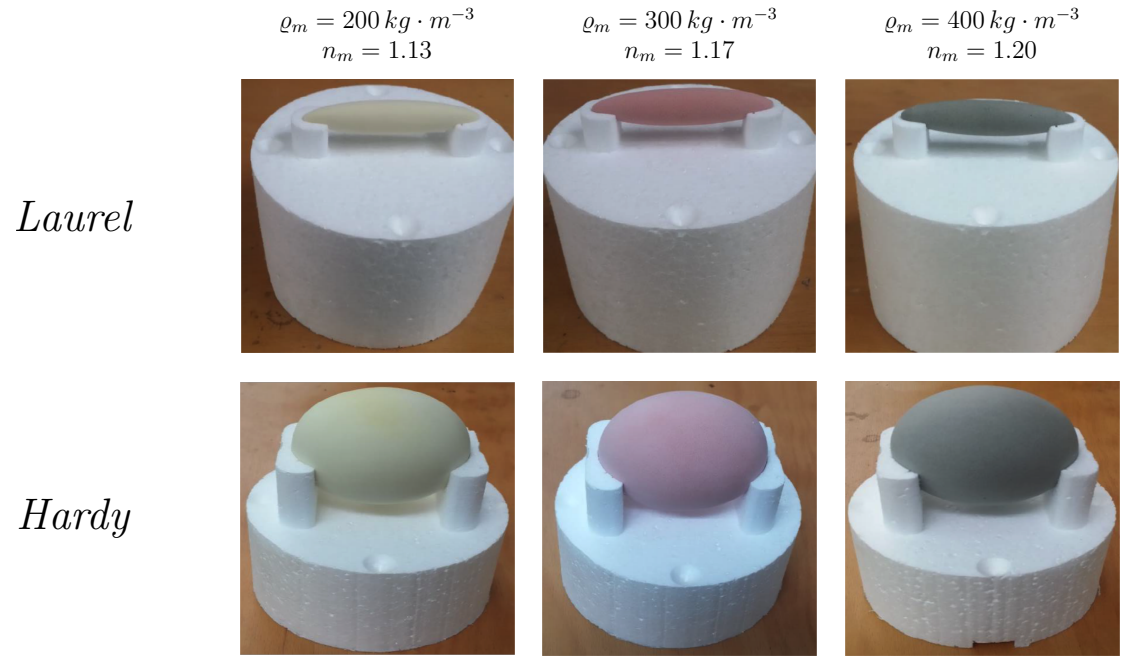



FIGURE IV.26 – Particules sphéroïdales analogues usinées dans trois mousses différentes de masse volumique $\varrho_m = 200\,kg \cdot m^{-3}$, $\varrho_m = 300\,kg \cdot m^{-3}$ et $\varrho_m = 400\,kg \cdot m^{-3}$ et ayant respectivement des indices de réfractions égaux à $n_m = 1.13, n_m = 1.17$ et $n_m = 1.20$. La forme sphéroïdale baptisée *Laurel* est caractérisée par les demi-axes $a = 8.5\,mm$ et $b = 42\,mm$, soit une élongation $R = \frac{a}{b} \approx 0.202$ et un paramètre de taille $x \approx 5.5$. La forme sphéroïdale baptisée *Hardy* est caractérisée par les demi-axes $a = 35\,mm$ et $b = 42\,mm$, soit une élongation $R = \frac{a}{b} \approx 0.833$ et un paramètre de taille $x \approx 14$. Photos prises par Hassan SALEH, doctorant à l'Institut Fresnel, et issues d'un document interne dans le cadre de ce travail collaboratif.

**Description de l'expérience en chambre anéchoïque.** Les mesures des champs provenant de l'interaction onde-particule ont été réalisées au sein de la chambre anéchoïque du CCRM (Centre Commun de Ressources en Micro-ondes) à Marseille, dont les caractéristiques ainsi que les performances sont décrites dans l'article [Vaillon et al., 2011]. L'intérêt de réaliser ce type de mesures dans une chambre anéchoïque est que l'on peut reproduire les conditions de champ libre puisque les parois absorbent les ondes électromagnétiques évitant ainsi les éventuelles réflexions. Lors des expériences au sein de la chambre anéchoïque, les particules sphéroïdales analogues sont placées avec leur support en polystyrène au centre d'un dispositif source-récepteur schématisé Fig. IV.27. À noter que l'utilisation des supports en polystyrène, spécifiquement fabriqués pour les sphéroïdes *Laurel* et *Hardy*, ont pour objectif de maîtriser le positionnement desdits sphéroïdes sans aucune influence sur les mesures. Une fois ceci fait, une onde plane est envoyée dans la di-

rection incidente vers le diffuseur analogue. L'interaction entre l'onde et le diffuseur donne naissance à un champ diffusé qui se superpose au champ incident. Le signal de ce champ total (*i.e.* incident + diffusé) est alors mesuré par le récepteur qui balaie un intervalle angulaire compris entre $-130°$ et $130°$. Davantage de détails concernant la procédure de mesure sont fournis dans l'article [Saleh et al., 2017] qui a fait suite à la présente étude.

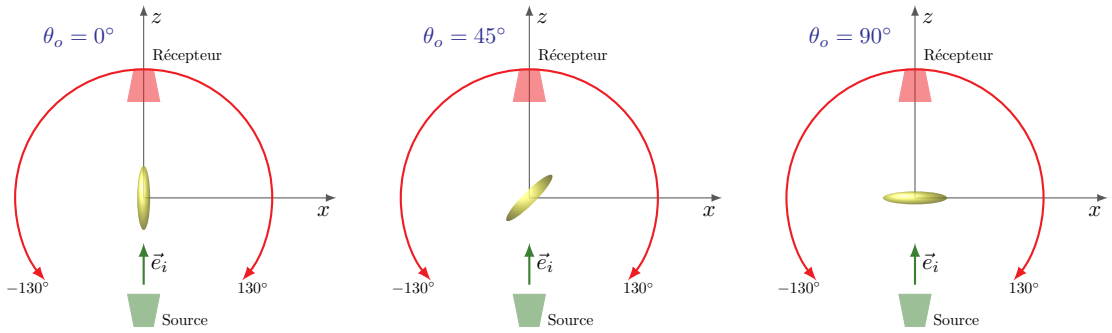



FIGURE IV.27 – Représentation schématique des trois configurations angulaires étudiées. Le sphéroïde analogue est placé au centre du dispositif source-récepteur et est orienté suivant $\theta_o = 0°$, $\theta_o = 45°$ ou $\theta_o = 90°$ selon la configuration considérée.

**Résultats.** Les résultats qui vont être présentés ont fait l'objet d'une publication [6]. Les mesures expérimentales ont été réalisées par Hassan SALEH et Jean-Michel GEFFRIN de l'équipe HIPE (*Hyperfrequency, Instrumentation, Processing, Experimentation*) de l'Institut Fresnel pour chacun des six sphéroïdes pour trois orientations différentes ($\theta_o = 0°, 45°, 90°$). Ces résultats expérimentaux sont comparés avec des résultats de référence obtenus à partir d'un code T-Matrix [7] [Mishchenko et al., 1996, 2002]. Nous ajoutons également les résultats obtenus en résolvant l'approximation de Schiff par la méthode de Monte Carlo, même si les indices de réfractions considérés ne sont pas vraiment favorables aux conditions de validités de l'approximation. Dans la suite, nous présentons les résultats pour les sphéroïdes *Laurel* et *Hardy* pour l'indice de réfraction relatif [8] le plus petit parmi ceux étudiés, à savoir $n_r = 1.13$. Les résultats pour les indices $n_r = 1.17$ et $n_r = 1.20$ sont fournis en Annexe G.3. Figs. IV.28 et IV.29 représentent les éléments diagonaux $S_{11}$ et

6. Saleh, H., Charon, J., Dauchet, J., Tortel, H., and Geffrin, J.-M. (2017). Microwave analog experiments on optically soft spheroidal scatterers with weak electromagnetic signature. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 196 :1–9.

7. Ce code T-Matrix, disponible en ligne à l'adresse suivante `www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko/t_matrix.html`

8. L'indice de réfraction relatif est donné par $n_r = \frac{n_m}{n_e^a} = n_m$ car le milieu environnant de la particule analogue (la cible) est constitué d'air d'indice de réfraction $n_e^a \approx 1$.

$S_{22}$ de la matrice amplitude de diffusion

$$\bar{\bar{S}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \tag{IV.163}$$

ainsi que la section efficace différentielle de diffusion

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = \frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2 + |S_{22}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{21}|^2\right] \tag{IV.164}$$

en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$. Nous pouvons alors remarquer que les résultats expérimentaux sont en bon accord avec ceux de référence (T-Matrix). Ceci montre la faisabilité de réaliser des mesures expérimentales en chambre anéchoïque sur des cibles possédant des faibles contrastes d'indice avec leur milieu environnant. À noter, toutefois, qu'autour de la direction d'incidence (*i.e* pour des petits angles de diffusion), des écarts plus importants sont observés (voir Figs. IV.28 et IV.29). Ces différences proviennent probablement d'une erreur systématique de mesure auxquelles s'ajoutent des imperfections d'alignements des sphéroïdes [Saleh et al., 2017]. Ce dernier point est d'autant plus visible dans le cas du sphéroïde *Hardy* qui est plus difficile à positionner du fait qu'il s'approche de la forme sphérique. Les écarts sont moins importants avec *Laurel* dans la mesure où il est suffisamment allongé pour assurer un meilleur alignement. On observe également que les valeurs obtenues des grandeurs étudiées ($\hat{W}_{sca}$, $S_{11}$ et $S_{22}$) avec *Hardy* sont globalement plus élevées que ceux obtenues avec *Laurel*. Ceci s'explique simplement par le fait que *Hardy* à un paramètre de taille $x$ et un volume plus important que ceux de *Laurel*.

Malgré que l'indice de réfraction $n_r = 1.13$ soit plutôt élevé pour l'utilisation de l'approximation de Schiff, cette dernière fournit des résultats corrects et donne notamment une bonne indication sur la tendance des grandeurs étudiées. En particulier, dans le cas du sphéroïde *Laurel*, on remarque que l'approximation de Schiff est plutôt proche des résultats expérimentaux et de la référence T-Matrix. Toutefois si cela est effectivement correct pour les orientations $\theta_o = 45°$ et $\theta_o = 90°$ du sphéroïde, ce n'est pas vraiment le cas lorsque la direction d'incidence est parallèle avec le grand-axe du sphéroïde (cas $\theta_o = 0°$) comme on peut le constater Fig. IV.29. Il convient également de préciser qu'il ne s'agit pas d'un problème numérique puisque la valeur analytique calculée pour $\vartheta_{sca} = 0°$ coïncide bien avec la valeur numérique. Ainsi, il semblerait que l'approximation de Schiff soit moins pertinente pour l'étude des particules très allongées lorsque la direction incidente coïncide avec la longueur la plus grande des particules.

Au vue des résultats comparés à la référence T-Matrix, ces mesures sont suffisamment précises (même si des améliorations sont toujours possibles) pour être utilisées comme référence. De plus, dans la mesure où il n'y a pas de contrainte liée à la complexité géométrique de la cible (hormis sa fabrication), ceci permet d'envisager une validation de nos codes résolvant l'approximation de Schiff sur une particule de géométrie complexe. Par exemple, sur une particule de forme hélicoïdale telle que la spiruline, dont nous ne bénéficions actuellement d'aucune méthode de référence qui permettrait de valider nos calculs.

Dans la mesure où il s'avère difficile de trouver et usiner des matériaux avec des indices de réfraction proche de 1, la validation de l'approximation de Schiff ne sera que partielle. Ce qui est sous-entendu ici, c'est qu'il ne faut pas s'attendre à ce que les résultats de l'approximation de Schiff se superposent avec ceux expérimentaux pour la raison évoquée précédemment. Néanmoins, cela permettrait de mettre en avant la pertinence d'utiliser l'approximation de Schiff si les écarts observés ne sont pas trop importants. Il faut garder en tête que cette approximation est d'autant meilleure que les indices de réfraction sont faibles. On peut donc penser que s'il était possible d'obtenir un matériau possédant un tel indice de réfraction, les résultats de l'approximation de Schiff et ceux expérimentaux seraient très proches.

Jusqu'ici, il s'avère que l'équipe HIPE de l'Institut Fresnel ayant réalisé les mesures expérimentales nous apporte énormément et nous permet d'envisager une validation de notre modèle sur des géométries complexes. De notre côté, nous pouvons leur apporter des informations auxquelles ils n'ont pas accès, notamment l'incertitude sur les mesures des champs (et toutes les grandeurs calculées à partir de ces mesures) liée à une erreur de mesure sur l'indice de réfraction. Cette information est accessible en calculant, par la méthode de Monte Carlo, les sensibilités de la grandeur considérée par rapport aux parties réelle et imaginaire de l'indice de réfraction. Ceci fait l'objet de la section suivante.

### IV.3.3 Application du calcul de sensibilité pour la propagation de l'incertitude d'un paramètre sur une grandeur

Considérons une particule sphéroïdale fabriquée dans une mousse d'indice de réfraction $n_m \pm \Delta n_m$, où $\Delta n_m$ est l'incertitude liée à la mesure de $n_m$. Nous supposerons que la partie imaginaire de l'indice de réfraction $\kappa_m$ est nulle. Placé dans une chambre anéchoïque, on observe le champ électrique obtenue sur un récepteur à l'issue de l'interaction entre la particule et le champ incident. La valeur expérimentale du champ nous permet de calculer la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$, par exemple. La mesure de l'indice de réfraction de la mousse n'étant par parfaite, nous souhaitons connaître l'in-

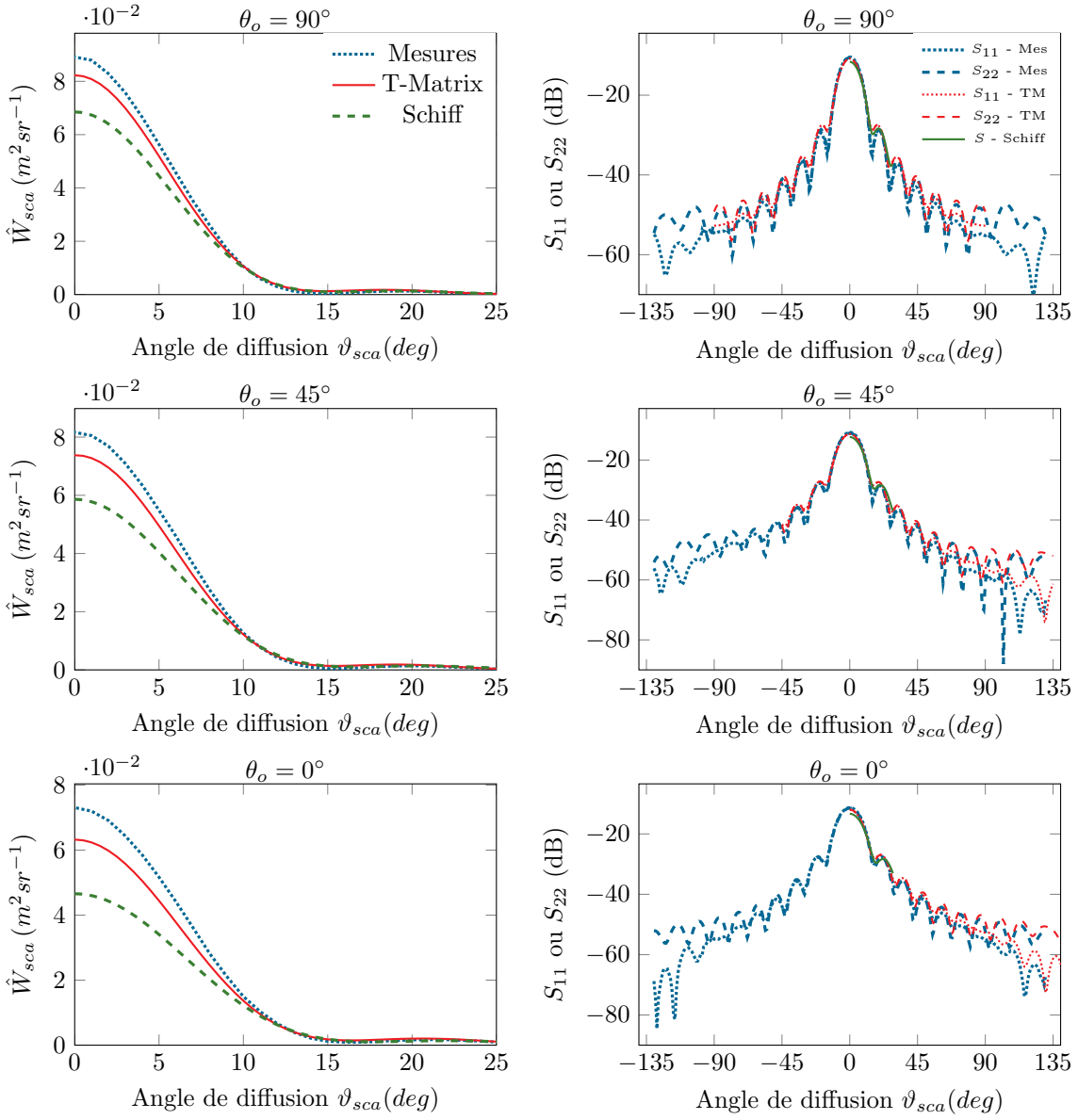



FIGURE IV.28 – Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (colonne de gauche) et éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ (colonne de droite) de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ du sphéroïde *Hardy* pour trois orientations $\theta_o$ différentes ($\theta_o = 0°, 45°$ et $90°$). Comparaisons entre les résultats expérimentaux (bleu), la référence T-Matrix (rouge) et l'approximation de Schiff (vert). Paramètres : $x \approx 14, n_r = 1.13, \kappa_r = 0, R = 0.833, f = 18\,GHz\,(\lambda_e \approx 16.7\,mm)$.

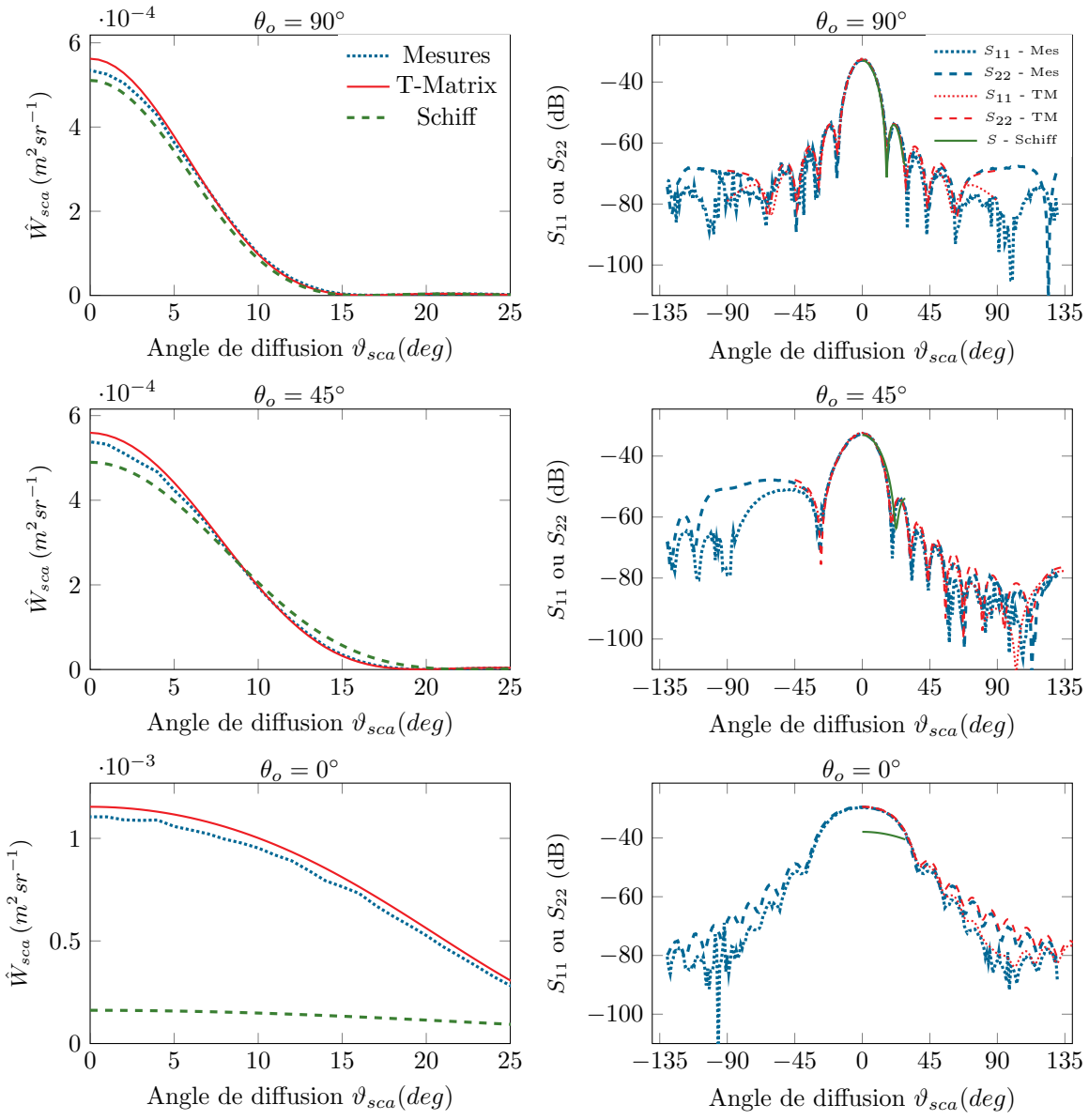



FIGURE IV.29 – Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (colonne de gauche) et éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ (colonne de droite) de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ du sphéroïde *Laurel* pour trois orientations $\theta_o$ différentes ($\theta_o = 0°, 45°$ et $90°$). Comparaisons entre les résultats expérimentaux (bleu), la référence T-Matrix (rouge) et l'approximation de Schiff (vert). Paramètres : $x \approx 5.5, n_r = 1.13, \kappa_r = 0, R = 0.202, f = 18\,GHz\,(\lambda_e \approx 16.7\,mm)$.

fluence de cette imperfection sur la grandeur finale $\hat{W}_{sca}$. Autrement dit, nous souhaitons connaître l'incertitude sur la grandeur $\hat{W}_{sca}$ provenant de l'incertitude liée à la mesure de l'indice de réfraction $n_m$. Il est possible de déduire cette incertitude à l'aide d'un calcul de sensibilité. En effet, l'incertitude relative, notée $\frac{\Delta \hat{W}_{sca}^{mes}}{\hat{W}_{sca}^{mes}}$, due à l'incertitude $\Delta n_m$ sur l'indice de réfraction $n_m$ est reliée à la valeur de la sensibilité $\partial_{n_m} \hat{W}_{sca}$ de $W_{sca}$ par rapport à l'indice $n_m$ :

$$\frac{\Delta \hat{W}_{sca}^{mes}}{\hat{W}_{sca}^{mes}} = \frac{\partial_{n_m} \hat{W}_{sca}}{\hat{W}_{sca}} \Delta n_m \tag{IV.165}$$

La grandeur $\hat{W}_{sca}^{mes}$ est calculée à partir des données expérimentales. Les quantités $\hat{W}_{sca}$ et $\partial_{n_m} \hat{W}_{sca}$ sont calculées par la méthode de Monte Carlo (voir Secs. IV.1.3 et IV.1.6.4). Ainsi, en utilisant Eq. IV.165, ceci nous permet alors de déduire via l'erreur commise $\Delta \hat{W}_{sca}^{mes}$ sur la grandeur calculée à partir de mesures expérimentales et ainsi obtenir les barres d'erreurs associées comme le montre Fig. IV.30. À titre d'illustration, une incertitude $\Delta n_m = 5\%$ sur l'indice de la mousse conduit à une incertitude relative de l'ordre de 10% sur la grandeur mesurée pour un angle de diffusion $\vartheta_{sca} = 3°$.

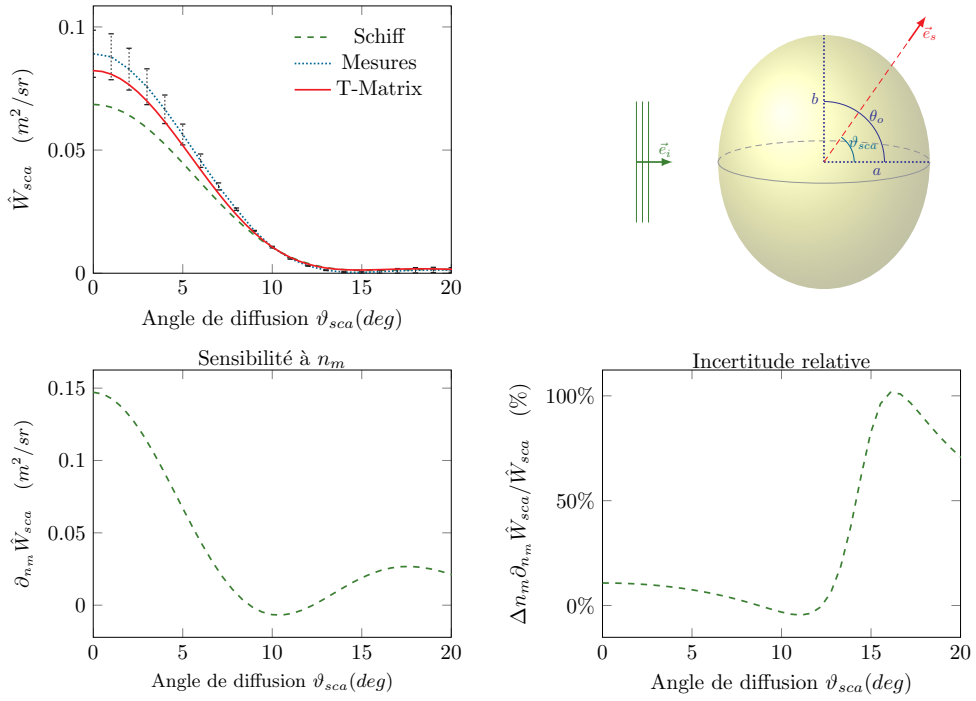



FIGURE IV.30 – Illustration de l'intérêt du calcul de sensibilité par la méthode de Monte Carlo pour la propagation d'incertitude sur la valeur du paramètre $n_m$. Le cas d'étude est une particule sphéroïdale de paramètre de taille $x \approx 14$, d'élongation $R = \frac{a}{b} \approx 0.833$ ($a = 35\,mm$ et $b = 42\,mm$) et orientée suivant $\theta_o = 90°$ (le demi-grand axe $b$ est orthogonale à la direction incidente $\vec{e}_i$). Ce sphéroïde est fabriqué dans une mousse d'indice de réfraction $n_m = 1.13$ avec une incertitude de l'ordre de $\Delta n_m = 5\%$. Il est soumis à une onde plane incidente de fréquence $18\,GHz$ (soit une longueur d'onde $\lambda_e \approx 16.7\,mm$).

## IV.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons construit les algorithmes de Monte Carlo en reformulant les formulations intégrales de l'approximation de Schiff comme des intégrales sur des espaces de chemins. Ainsi, nos algorithmes échantillonnent des chemins, qui dans le cadre de l'approximation de Schiff traversent la particule en ligne droite. Nous retrouverons cette idée dans les chapitres suivants, mais les chemins considérés seront différents.

Comme nous l'avons vu, la méthode de Monte Carlo est parfaitement adaptée à la résolution de ces intégrales de chemins. De plus, elle présente des avantages permettant de répondre à certaines difficultés rencontrées dans la littérature (voir Chap. II). D'une part, du fait d'une approche statistique, les intégrales multiples ne posent aucune difficulté, ce qui permet de tenir compte des distributions de taille, d'orientation et de forme des particules sans que cela augmente significativement le temps de calcul (contrairement à la méthode DDA par exemple). D'autre part, la prise en compte de la complexité géométrique des particules étudiées n'est en aucun cas un obstacle (contrairement à T-Matrix) car, premièrement, nos algorithmes sont complètement indépendants de la géométrie du problème, et deuxièmement, nous disposons des outils de la synthèse d'image pour gérer les données géométriques (en particulier ici, le calcul des longueurs de traversées). De plus, nos algorithmes sont en mesure d'évaluer des grandeurs complexes (ce qui n'avait jamais été fait auparavant dans le groupe) telle que l'amplitude de diffusion, ainsi que des grandeurs possédant une non linéarité quadratique telle que la section efficace différentielle de diffusion. Ainsi, tout comme les autres méthodes numériques présentées dans l'état de l'art (voir Chap. II), l'amplitude de diffusion et les propriétés radiatives peuvent être obtenues par la méthode de Monte Carlo. Le fait que la méthode de Monte Carlo puisse calculer ces grandeurs d'intérêts et surtout gérer à la fois des intégrales multidimensionnelles et la complexité géométrique est un atout majeur qui nous permet de nous positionner par rapport aux méthodes existantes. Par ailleurs, contrairement à ces dernières, nous disposons d'outils pour analyser les résultats obtenus par nos algorithmes. D'une part, à chaque estimation d'une grandeur, l'incertitude associée à cette estimation est systématiquement calculée. D'autre part, les sensibilités paramétriques sont systématiquement calculées sans que cela entraîne une augmentation significative du temps de calcul puisque nous utilisons les mêmes procédures d'échantillonnages que la grandeur elle-même. Outre ces outils d'analyses, nous disposons également de technique de réduction de variance afin de réduire l'incertitude liée à l'estimation d'une grandeur. Dans ce chapitre, nous avons rencontré une technique permettant d'optimiser un algorithme en réduisant la dimension du domaine d'intégration qui est une technique parmi d'autres pour

réduire la variance. Nous verrons une autre technique dans le chapitre VII : le principe de zéro variance [Assaraf and Caffarel, 1999].

Pour terminer, il convient de mentionner que les travaux présentés dans ce chapitre ont permis, en collaboration étroite avec la société d'ingénierie informatique Méso-Star, de mettre à disposition à la communauté un logiciel permettant de calculer, dans le cadre de l'approximation de Schiff, les propriétés radiatives de particules homogènes à géométries complexes en tenant compte des distributions de taille, d'orientation et de forme des particules.

CHAPITRE V

# Approximations de Born, de Rayleigh-Gans-Debye et variantes

Nous avons vu dans le chapitre III que l'approximation de Born dérive des équations de Maxwell dans le cas des particules de petite taille possédant des faibles contrastes d'indices avec leur milieu environnant. Cette approximation se justifie dans de nombreuses applications dont les photobioréacteurs. L'objectif de ce chapitre est de développer la formulation intégrale de l'approximation de Born pour concevoir un algorithme de Monte Carlo permettant de fournir les propriétés radiatives des particules d'intérêt. Nous écrirons également les expressions des sensibilités des grandeurs aux paramètres pouvant être pertinents car celles-ci ne modifient en aucun cas les algorithmes. Contrairement au chapitre précédent, les expressions établies ici seront valables pour des particules hétérogènes même si la question de la mise en œuvre pour de telles particules ne sera pas abordée. Dans ce chapitre, nous verrons deux particularités relatives à cette formulation. D'une part, la manipulation de matrices de nombres complexes, et d'autre part, l'échantillonnage des positions pour traiter les intégrales de volume (alors que pour l'approximation de Schiff, nous échantillonnions sur des surfaces). Outre le fait que nous allons construire des algorithmes permettant de résoudre l'approximation de Born, nous verrons qu'ils sont directement applicables aux autres variantes (approximation de Rayleigh-Gans-Debye, modification de Shimizu,...) disponibles dans la littérature et que nous avons mentionnées dans l'état de l'art (voir Sec. II.1.3.1).

# V.1 Conception des algorithmes par formulation intégrale

Cette section est dédiée à la conception des algorithmes de Monte Carlo pour le champ électrique diffusé, la matrice amplitude de diffusion ainsi que les propriétés radiatives. Pour ce faire, nous procédons comme dans le chapitre précédent en écrivant sous forme statistique les formulations intégrales établies dans Sec. III.4 dans le cadre de l'approximation de Born.

## V.1.1 Champ électrique diffusé

Dans le cadre de l'approximation de Born, la formulation intégrale du champ électrique diffusé (pour une position $\vec{r} \notin \mathcal{V}_p$) s'obtient en partant de Eq. III.69, puis en remplaçant le champ interne à la particule par le champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{V.1}$$

En suivant la même démarche qui a été détaillée dans le chapitre précédent (voir Sec. IV.1), nous introduisons une variable aléatoire position $\vec{R}_0$ dont le domaine de définition est le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule (le domaine d'intégration dans Eq. V.1). Cette variable aléatoire position $\vec{R}_0$ est distribuée selon la fonction densité de probabilité arbitraire $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Afin d'écrire le champ $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ comme une espérance mathématique, on multiplie et on divise l'intégrande par $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \frac{k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} \tag{V.2}$$

Cette formulation peut se réécrire sous la forme

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \vec{w}(\vec{r}_0) \tag{V.3}$$

où l'on a introduit la fonction poids (ou poids de Monte Carlo) $\vec{w}(\vec{r}_0)$ :

$$\vec{w}(\vec{r}_0) = \frac{k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} \tag{V.4}$$

Pour le moment, nous n'avons pas spécifié notre choix pour la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Autrement dit, nous n'avons pas encore précisé la façon dont on échantillonne les positions $\vec{r}_0$ dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$. Ce choix impacte seulement la vitesse de convergence et en aucun cas la valeur de l'intégrale. Nous verrons dans le chapitre VII, une démarche pour construire, à l'aide du principe de zéro-variance, une fonction densité

de probabilité optimisée vis à vis de la convergence d'un algorithme de Monte Carlo. Mais pour l'instant, nous prenons ici, comme dans le chapitre précédent (voir Sec. IV.1.1.1), le choix le plus simple correspondant à une fonction densité de probabilité uniforme :

$$p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{V_p} \tag{V.5}$$

où $V_p$ est le volume de la particule. Ainsi, le poids de Monte Carlo $\vec{w}(\vec{r}_0)$ se réécrit :

$$\vec{w}(\vec{r}_0) = k_e^2 V_p (m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0) \cdot \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \tag{V.6}$$

L'intégrale dans Eq. V.3 peut-être vue comme une intégrale en espace de chemin. Ce chemin correspondant à un rayon provenant de la source dans la direction incidente $\vec{e}_i$ qui interagit en une position $\vec{r}_0$ au sein de la particule avant de repartir dans la direction d'observation $\vec{e}_s$ jusqu'à la position $\vec{r}$ où le champ diffusé est calculé (voir Fig. V.1).

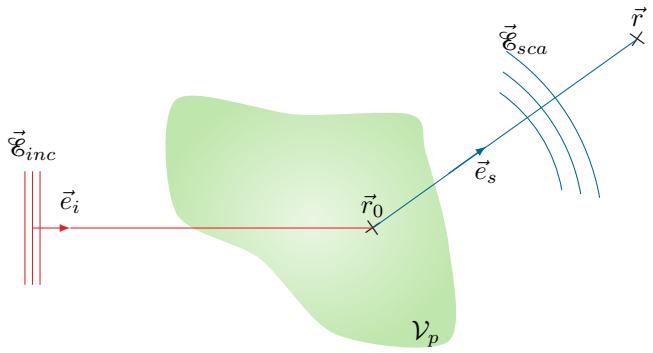



FIGURE V.1 – Représentation d'un chemin dans le cadre de l'approximation de Born. Ce chemin est celui provenant de la source dans la direction incidente $\vec{e}_i$ jusqu'à la position $\vec{r}_0$ appartenant au volume de la particule avant de repartir dans la direction d'observation $\vec{e}_s$ jusqu'à la position d'observation $\vec{r}$.

L'algorithme de Monte Carlo évaluant Eq. V.3 s'énonce :

**Algorithme 15: Approximation de Born - Champ électrique diffusé**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ selon la densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$.
- **Étape 2** : le poids de Monte Carlo $\vec{w}(\vec{r}_0)$ est calculé en utilisant Eq. V.6.

L'originalité de cet algorithme (par rapport à ce qui a été fait jusqu'ici) est que la fonction poids $\vec{w}$ est un vecteur complexe puisque le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ est une grandeur vectorielle complexe. Par conséquent, en pratique, l'algorithme ci-dessus évalue six grandeurs simultanément : les parties réelles et imaginaires de chacune des trois composantes (de la même manière que nous l'avions vu pour l'amplitude de diffusion $S$ dans Sec. IV.1.2 où l'on évaluait simultanément les parties réelle et imaginaire) .

En vue de calculer les propriétés radiatives, ce qui va nous intéresser c'est le champ électrique diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r})$ exprimé sous l'hypothèse de champ lointain (voir Sec. I.2.2). Sa formulation intégrale est obtenue en remplaçant dans Eq. V.1 la dyade de Green $\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)$ par celle en champ lointain, notée $\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ (voir Eqs. III.70 et III.71 pour son expression). L'algorithme de Monte Carlo qui en découle est le même que celui énoncé précédemment, excepté dans l'expression de la fonction poids qui est donnée par :

$$\vec{w}(\vec{r}_0) = k_e^2 V_p (m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \tag{V.7}$$

### V.1.2 Matrice amplitude de diffusion

La formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ a été établie dans Sec. III.4.2 et est donnée par Eq. III.84 que nous rappelons ci-dessous :

$$\bar{\bar{S}} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = -\frac{ik_e^2}{4\pi}\iiint_{\mathcal{V}_p}(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}d\vec{r}_0\, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{V.8}$$

où la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$, qui ne dépend que des angles définissant les directions incidente $\vec{e}_i$ et d'observation $\vec{e}_s$, est donnée par Eq. III.85 que l'on rappelle ci-dessous :

$$\begin{aligned} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} &= \begin{bmatrix} p_{22} & p_{23} \\ p_{32} & p_{33} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos\theta_s\cos\theta_i\cos(\varphi_s-\varphi_i)+\sin\theta_s\sin\theta_i & \cos\theta_s\sin(\varphi_s-\varphi_i) \\ -\cos\theta_i\sin(\varphi_s-\varphi_i) & \cos(\varphi_s-\varphi_i) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{V.9}$$

En vue de la résoudre par la méthode de Monte Carlo, nous introduisons, comme dans la section précédente (ou dans Sec. IV.1), une variable aléatoire position $\vec{R}_0$ distribuée selon la fonction densité de probabilité arbitraire $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Pour faire apparaître la fonction poids $\bar{\bar{w}}(\vec{r}_0)$, nous multiplions et divisons l'intégrande par $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$, on obtient alors :

$$\bar{\bar{S}} = \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\underbrace{\frac{-\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}}_{=\bar{\bar{w}}(\vec{r}_0)} \tag{V.10}$$

avec $\bar{\bar{w}}(\vec{r}_0)$ donnée par (avec $p_{\vec{R}_0} = \frac{1}{V_p}$) :

$$\bar{\bar{w}}(\vec{r}_0) = -i\frac{k_e^2 V_p}{4\pi}(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{V.11}$$

L'algorithme de Monte Carlo évaluant Eq. V.10 s'énonce (voir également Fig. V.2) :

**Algorithme 16: Approximation de Born - Matrice amplitude de diffusion**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est échantillonnée dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ selon la densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$.
- **Étape 2** : le poids de Monte Carlo $\vec{w}(\vec{r}_0)$ est calculé en utilisant Eq. V.11.

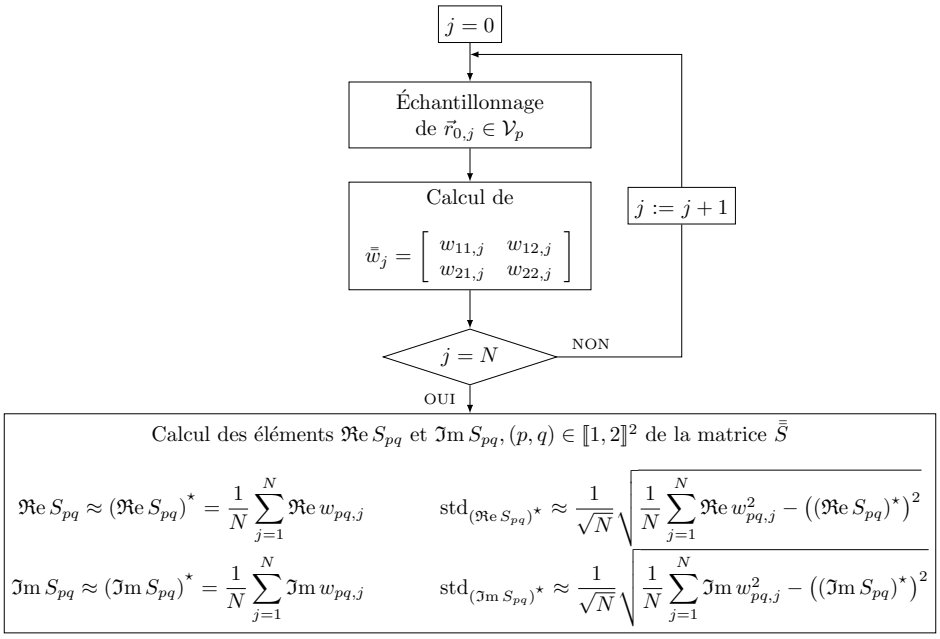



FIGURE V.2 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$. La $j^{ème}$ réalisation de l'algorithme de Monte Carlo consiste en les étapes suivantes : on échantillonne une position $\vec{r}_{0,j}$ puis on calcule le poids $\bar{\bar{w}}_j$. Cet algorithme est répété $N$ fois, ce qui permet d'obtenir une estimation $\bar{\bar{S}}^\star$ de $\bar{\bar{S}}$ ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{\bar{\bar{S}}^\star}$ de l'écart type associé.

Cet algorithme est identique à celui évaluant le champ diffusé construit précédemment ; seule la fonction poids, qui est une matrice complexe, diffère. Le calcul de cette matrice ne pose pas de difficulté particulière. Plus particulièrement, en suivant la même logique que dans la section précédente, l'algorithme ci-dessus évalue simplement huit grandeurs simultanément : les parties réelles et imaginaires de chacun des quatre éléments de la matrice $\bar{\bar{w}}$. Ainsi, à chaque réalisation de l'algorithme, la moyenne et l'écart type de chacune des huit grandeurs sont évalués (voir Fig. V.2) permettant alors de fournir une estimation de chaque élément de la matrice $\bar{\bar{S}}$.

### V.1.3 Section efficace différentielle de diffusion

L'expression de la section efficace différentielle de diffusion d'une particule isolée est définie comme la moitié de la somme des modules carrés des éléments de la matrice $\bar{\bar{S}}$

(voir Eq. I.23) :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_i,\vec{e}_s)=\frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2+|S_{12}|^2+|S_{21}|^2+|S_{22}|^2\right] \tag{V.12}$$

où les éléments $S_{pq}$ sont déduits de Eq. V.10. Plus précisément, $\forall(p,q)\in[\![1,2]\!]^2$, on a :

$$\begin{aligned}S_{pq}&=\int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})}d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{-\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}p_{p+1,q+1}\\&=-\frac{ik_e^2}{4\pi}p_{p+1,q+1}\int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})}d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\end{aligned} \tag{V.13}$$

où les termes $p_{p+1,q+1}$ désignent les éléments de la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$ et sont indépendants de la position $\vec{r}_0$ (voir Eq. V.9). Ainsi, en injectant Eq. V.13 dans Eq. V.12, la section efficace différentielle de diffusion s'écrit :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca})=\frac{k_e^4}{32\pi^2}\left|\int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})}d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\right|^2\left(1+\cos^2\vartheta_{sca}\right) \tag{V.14}$$

où nous avons utilisé le fait que $p_{22}^2+p_{23}^2+p_{32}^2+p_{33}^2=1+\cos^2\vartheta_{sca}$ (voir Sec. III.4.3).

Comme on peut le constater, l'expression de $\hat{W}_{sca}$ possède une non linéarité quadratique. Écrite sous cette forme, une évaluation directe par la méthode de Monte Carlo n'est pas possible puisque l'on ne peut pas l'écrire sous la forme d'une espérance : le module carré d'une espérance n'est pas une espérance. Nous avons déjà été confronté à ce type de non linéarité dans le chapitre précédent (voir Sec. IV.1.3). Nous avions alors détaillé une technique permettant de reformuler le module carré d'une intégrale en une combinaison linéaire d'intégrales. Cette technique peut-être utilisée ici en suivant la même démarche que dans Sec. IV.1.3 (en remplaçant l'intégrale de surface par notre intégrale de volume). En utilisant la propriété des intégrales parentes, il vient :

$$\begin{aligned}&\left|\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{y(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\right|^2\\&\quad=\mathfrak{Re}^{\,2}\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{y(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}+\mathfrak{Im}^{\,2}\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{y(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\\&\quad=\mathfrak{Re}\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\frac{y(\vec{r}_1)}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)}\mathfrak{Re}\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\frac{y(\vec{r}_2)}{p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)}\\&\qquad+\mathfrak{Im}\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\frac{y(\vec{r}_1)}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)}\mathfrak{Im}\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\frac{y(\vec{r}_2)}{p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)}\\&\quad=\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\frac{\mathfrak{Re}\,y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\,y(\vec{r}_2)+\mathfrak{Im}\,y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\,y(\vec{r}_2)}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)}\end{aligned} \tag{V.15}$$

où l'on a introduit la quantité $y(\vec{r}_0)\equiv y(\vec{r}_0,\vec{e}_o,r_{eq})=(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}$. En injectant Eq. V.15 dans Eq. V.14, la formulation intégrale de $\hat{W}_{sca}$ s'écrit :

$$\hat{W}_{sca}=\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\int_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)w(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},\vec{e}_i,\vec{e}_s) \tag{V.16}$$

où $w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ est donné par Eq. V.19. Comme dans le cas de l'approximation de Schiff, le verrou de la non linéarité a été contourné en augmentant la dimension du domaine d'intégration, ce qui ne pose pas de difficulté conceptuelle puisque la convergence de la méthode de Monte Carlo est indépendante de cette dimension. Au lieu d'intégrer sur $\mathcal{V}_p$, on intègre désormais sur $\mathcal{V}_p \times \mathcal{V}_p$. D'un point de vue algorithmique, au lieu d'échantillonner une seule position $\vec{r}_0$, nous aurons à échantillonner deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$.

En tenant compte des distributions de taille et d'orientation des particules comme nous l'avions fait au chapitre précédent (voir Sec. IV.1), la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ s'écrit :

$$W_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{e}_o, r_{eq}) = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w \tag{V.17}$$

avec $w \equiv w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ la fonction poids :

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{k_e^4}{32\pi^2} \left(1 + \cos^2 \vartheta_{sca}\right) \frac{\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2)}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)} \tag{V.18}$$

Comme précédemment, on choisit d'échantillonner uniformément les positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$. Ainsi, les fonctions densités de probabilité sont données par $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) = p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) = \frac{1}{V_p}$. Par suite, Eq. V.18 se réécrit comme :

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{k_e^4 V_p^2}{32\pi^2} \left(1 + \cos^2 \vartheta_{sca}\right) \left[\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2)\right] \tag{V.19}$$

L'algorithme de Monte Carlo, correspondant à Eq. V.17 s'énonce de la façon suivante (voir également Fig. V.3) :

**Algorithme 17: Approximation de Born - Section efficace différentielle de diffusion**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon la fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 3** : une première position $\vec{r}_1$ est uniformément échantillonnée dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule selon $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)$.

- **Étape 4** : une seconde position $\vec{r}_2$ est uniformément échantillonnée dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule selon $p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)$.
- **Étape 5** : le poids de Monte Carlo $w(r_{eq}, \vec{e}_o, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ donné par Eq. V.19 (ou Eq. V.23 pour les particules hétérogènes, ou Eq. V.25 pour les particules homogènes) est calculé.

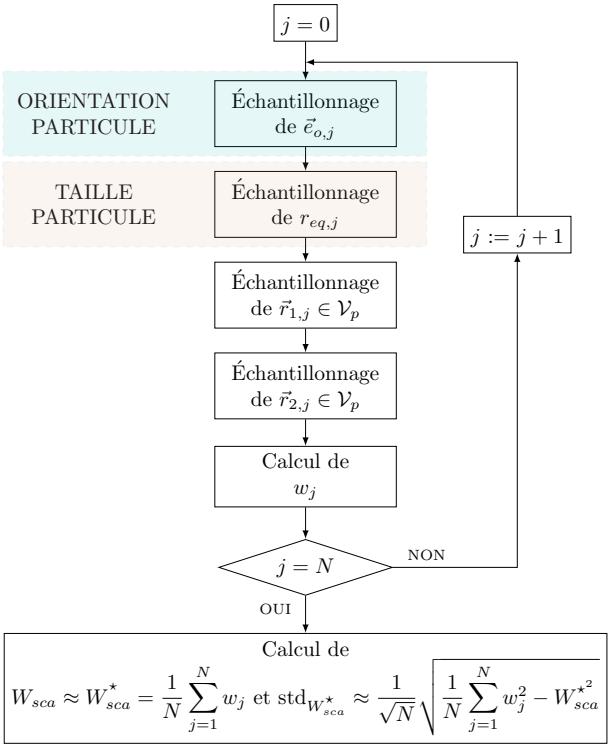



FIGURE V.3 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ en tenant compte des distributions d'orientation et de taille des particules. La $j^{ème}$ réalisation de l'algorithme de Monte Carlo consiste en les étapes suivantes : on échantillonne une orientation $\vec{e}_{o,j}$, puis une taille $r_{eq,j}$, puis une première position $\vec{r}_{1,j}$ ainsi qu'une seconde position $\vec{r}_{2,j}$ sont échantillonnées dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule. Enfin, le poids de Monte Carlo $w_j$ est évalué. Cet algorithme est répété $N$ fois, ce qui permet d'obtenir une estimation $W^\star_{sca}$ de $W_{sca}$ ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{W^\star_{sca}}$ de l'écart type associé.

Afin de travailler par la suite avec la formulation intégrale de $W_{sca}$, il est intéressant de réécrire la fonction poids Eq. V.19 pour des particules hétérogènes et des particules homogènes. Dans le premier cas, l'indice de réfraction relatif dépend de la position au sein de la particule, ce qui n'est pas le cas pour les particules homogènes. Dans la suite, il s'agit d'expliciter, selon le type de particules, la quantité $\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2)$

(avec $y(\vec{r}_k) = (m_r^2(\vec{r}_k) - 1)e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_k}$). Pour ce faire, introduisons les quantités

$$\begin{aligned} \alpha(\vec{r}) &= k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r} \\ \beta(\vec{r}) &= n_r^2(\vec{r}) - \kappa_r^2(\vec{r}) - 1 \\ \gamma(\vec{r}) &= 2n_r(\vec{r})\kappa_r(\vec{r}) \end{aligned} \tag{V.20}$$

de sorte que $\mathfrak{Re}\, y(\vec{r})$ et $\mathfrak{Im}\, y(\vec{r})$ s'écrivent :

$$\begin{aligned} \mathfrak{Re}\, y(\vec{r}) &= \beta(\vec{r})\cos\alpha(\vec{r}) - \gamma(\vec{r})\sin\alpha(\vec{r}) \\ \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}) &= \beta(\vec{r})\sin\alpha(\vec{r}) + \gamma(\vec{r})\cos\alpha(\vec{r}) \end{aligned} \tag{V.21}$$

En utilisant Eqs. V.20 et V.21, la quantité $\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2)$ s'écrit après calcul :

$$\begin{aligned} \mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2) = \\ [\beta(\vec{r}_1)\beta(\vec{r}_2) + \gamma(\vec{r}_1)\gamma(\vec{r}_2)]\cos(\alpha(\vec{r}_1) - \alpha(\vec{r}_2)) \\ + [\beta(\vec{r}_1)\gamma(\vec{r}_2) - \beta(\vec{r}_2)\gamma(\vec{r}_1)]\sin(\alpha(\vec{r}_1) - \alpha(\vec{r}_2)) \end{aligned} \tag{V.22}$$

En injectant Eq. V.22 dans Eq. V.19, on en déduit la fonction poids dans le cas de particules hétérogènes :

$$\begin{aligned} w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{k_e^4 V_p^2}{32\pi^2}\Big[ [\beta(\vec{r}_1)\beta(\vec{r}_2) + \gamma(\vec{r}_1)\gamma(\vec{r}_2)]\cos(\alpha(\vec{r}_1) - \alpha(\vec{r}_2)) + \\ [\beta(\vec{r}_1)\gamma(\vec{r}_2) - \beta(\vec{r}_2)\gamma(\vec{r}_1)]\sin(\alpha(\vec{r}_1) - \alpha(\vec{r}_2))\Big](1 + \cos^2\vartheta_{sca}) \end{aligned} \tag{V.23}$$

Dans le cas où les particules considérées sont homogènes, l'expression précédente se simplifie puisque les parties réelle $n_r$ et imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfraction relatif sont indépendantes de la position (dans le volume restreint à la particule). En particulier, les quantités $\beta$ et $\gamma$ (voir Eq. V.20) sont indépendantes des positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ : nous avons alors $\beta(\vec{r}_1) = \beta(\vec{r}_2)$ et $\gamma(\vec{r}_1) = \gamma(\vec{r}_2)$. En injectant ceci dans Eq. V.22, on constate que le second terme est nul permettant ainsi d'écrire :

$$\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2) = (\beta^2 + \gamma^2)\cos(\alpha(\vec{r}_1) - \alpha(\vec{r}_2))$$

Puis en remarquant que $\beta^2 + \gamma^2 = n_r^4 + \kappa_r^4 + 2n_r^2\kappa_r^2 + 2\kappa_r^2 - 2n_r^2 + 1 = |m_r^2 - 1|^2$, il vient

$$\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\, y(\vec{r}_2) + \mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\, y(\vec{r}_2) = |m_r^2 - 1|^2\cos(\alpha(\vec{r}_1) - \alpha(\vec{r}_2)) \tag{V.24}$$

Ainsi, en injectant Eq. V.24, dans Eq. V.19, on en déduit la fonction poids dans le cas de particules homogènes que nous utiliserons dans Sec. V.3 pour la validation de nos algorithmes :

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{k_e^4 V_p^2}{32\pi^2}|m_r^2 - 1|^2\cos(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2))(1 + \cos^2\vartheta_{sca}) \tag{V.25}$$

où nous avons également réinjecté l'expression de $\alpha$ (voir Eq. V.20).

Même si la question de l'hétérogénéité des particules n'est pas centrale dans ce manuscrit, nous avons quand même donné l'expression de la fonction poids. En pratique, dans le cadre de l'approximation de Born, la gestion de l'hétérogénéité n'est pas une difficulté, si ce n'est celle de gérer l'accès à la donnée. En effet, il faut connaître exactement les coordonnées de la position échantillonnée au sein de la particule avant de récupérer la valeur de l'indice de réfraction correspondante. Dans la suite, nous allons également donner les expressions des fonctions poids des sections efficaces pour les particules hétérogènes et homogènes.

### V.1.4 Sections efficaces

**Section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$.** Par définition, la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ est l'intégrale de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ sur les directions d'observations $\vec{e}_s$ :

$$\sigma_{sca} = \iint_{4\pi} W_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{e}_o, r_{eq}) d\vec{e}_s \tag{V.26}$$

Afin d'écrire $\sigma_{sca}$ sous la forme d'une espérance, nous introduisons une variable aléatoire de direction $\vec{E}_s$ distribuée selon $p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)$. En multipliant et divisant l'intégrande par $p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)$, on obtient :

$$\sigma_{sca} = \int_{4\pi} d\vec{e}_s p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) \frac{W_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{e}_o, r_{eq})}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)} \tag{V.27}$$

Puis, en injectant Eq. V.17 dans Eq. V.27, la formulation intégrale de la section efficace de diffusion s'écrit :

$$\begin{aligned}\sigma_{sca} = \int_{4\pi} d\vec{e}_s p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \underbrace{\frac{w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)}}_{w_{sca}}\end{aligned} \tag{V.28}$$

Dans la suite, nous prendrons une distribution isotrope des directions $\vec{e}_s$ :

$$p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) = \frac{1}{4\pi} \tag{V.29}$$

où la fonction poids $w_{sca} \equiv w_{sca}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$ s'écrit :

$$w_{sca}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s) = \frac{w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)} \tag{V.30}$$

En utilisant les expressions de $w$ données par Eq. V.23 pour les particules hétérogènes et Eq. V.25 pour les particules homogènes, on en déduit les deux fonctions poids $w_{sca}$

respectives :

$$w_{sca}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},\vec{e}_i,\vec{e}_s) = \frac{k_e^4 V_p^2}{32\pi^2}\Big[[\beta(\vec{r}_1)\beta(\vec{r}_2)+\gamma(\vec{r}_1)\gamma(\vec{r}_2)]\cos(\alpha(\vec{r}_1)-\alpha(\vec{r}_2))+ [\beta(\vec{r}_1)\gamma(\vec{r}_2)-\beta(\vec{r}_2)\gamma(\vec{r}_1)]\sin(\alpha(\vec{r}_1)-\alpha(\vec{r}_2))\Big]\frac{1+\cos^2\vartheta_{sca}}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)} \quad \text{(V.31)}$$

pour des particules hétérogènes, et

$$w_{sca}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},\vec{e}_i,\vec{e}_s) = \frac{k_e^4 V_p^2}{32\pi^2}|m_r^2-1|^2\cos(k_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2))\frac{1+\cos^2\vartheta_{sca}}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)} \quad \text{(V.32)}$$

pour des particules homogènes.

L'algorithme de Monte Carlo, correspondant à Eq. V.28, pour l'évaluation de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ s'énonce de la façon suivante (voir également Fig. V.4) :

**Algorithme 18: Approximation de Born - Section efficace de diffusion**

- **Étape 1** : une direction $\vec{e}_s$ est échantillonnée sur $4\pi$ selon la fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)$.
- **Étape 2** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon la fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 3** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0,+\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 4** : une première position $\vec{r}_1$ est uniformément échantillonnée dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule selon $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)$.
- **Étape 5** : une seconde position $\vec{r}_2$ est uniformément échantillonnée dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule selon $p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)$.
- **Étape 6** : le poids de Monte Carlo $w_{sca}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},\vec{e}_i,\vec{e}_s)$, donné par Eq. V.31 (particules hétérogènes) ou Eq. V.32 (particules homogènes), est calculé.

**Section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$.** Dans la section Sec. III.4.3, nous avons donné la formulation intégrale de la section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ d'une particule isolée (voir Eq. III.96) que l'on rappelle ci-dessous :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \iiint_{\mathcal{V}_p} 2k_e n_r(\vec{r}_0)\kappa_r(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \quad \text{(V.33)}$$

Comme dans les sections précédentes et dans Sec. IV.1, nous introduisons une position aléatoire $\vec{R}_0$ distribuée selon $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Par suite, on multiplie et on divise l'intégrande de

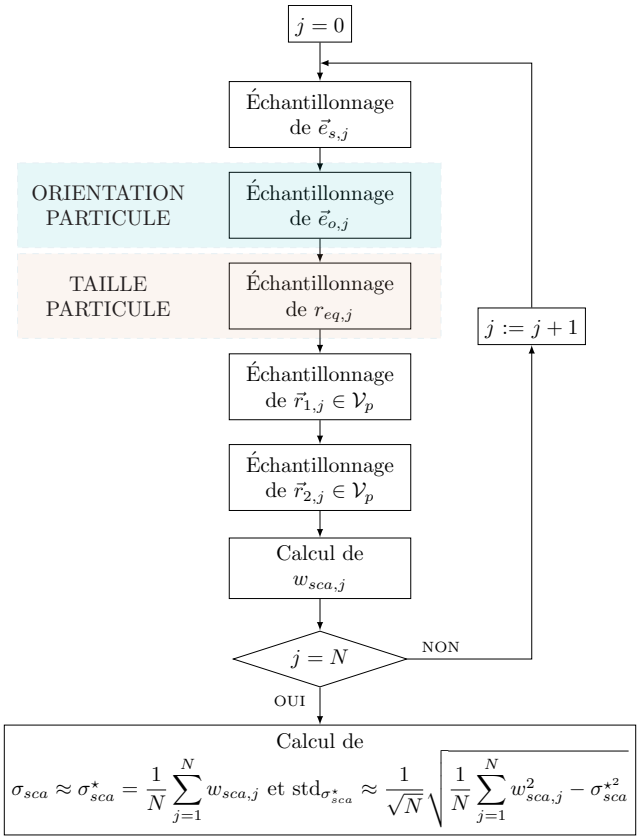



FIGURE V.4 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ en tenant compte des distributions d'orientation et de taille des particules. La $j^{ème}$ réalisation de l'algorithme de Monte Carlo consiste en les étapes suivantes : on échantillonne une direction $\vec{e}_{s,j}$, une orientation $\vec{e}_{o,j}$, puis une taille $r_{eq,j}$. Puis, une première position $\vec{r}_{1,j}$ ainsi qu'une seconde position $\vec{r}_{2,j}$ sont échantillonnées dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule. Enfin, le poids de Monte Carlo $w_{sca,j}$ est évalué. Cet algorithme est répété $N$ fois, ce qui permet d'obtenir une estimation $\sigma^{\star}_{sca}$ de $\sigma_{sca}$ ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{\sigma^{\star}_{sca}}$ de l'écart type associé.

Eq. III.96 par cette fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. Puis nous tenons compte de la distribution sur les tailles $r_{eq}$ des particules ; celle sur les orientations n'est pas nécessaire car $\hat{\sigma}_{abs}$ est indépendante de l'orientation de la particule. Ainsi, la formulation intégrale de la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ d'une suspension de particules (hétérogènes ou homogènes) en tenant compte de la distribution de taille s'écrit :

$$\sigma_{abs} = \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) w_{abs}(\vec{r}_0, r_{eq}) \tag{V.34}$$

où l'on a introduit le poids de Monte Carlo $w_{abs}$ donné par (avec $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{V_p}$) :

$$w_{abs}(\vec{r}_0, r_{eq}) = 2k_e V_p n_r(\vec{r}_0) \kappa_r(\vec{r}_0) \tag{V.35}$$

À noter que, dans le cas où la suspension est constituée de particules homogènes, l'intégrale sur les $\vec{r}_0$ n'est pas nécessaire dans la mesure où l'indice de réfraction est constant en tout point du volume de la particule.

L'algorithme de Monte Carlo, correspondant à la formulation Eq. V.34 s'énonce (voir également Fig. V.5) :

**Algorithme 19: Approximation de Born - Section efficace d'absorption**

- **Étape 1** : un rayon $r_{eq}$ de la sphère équivalente en volume est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 2** : une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule selon $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$. [Cette étape n'est pas nécessaire lorsque la suspension est constituée de particules homogènes.]
- **Étape 3** : le poids de Monte Carlo $w_{abs}$, donné par Eq. V.35, est calculé.

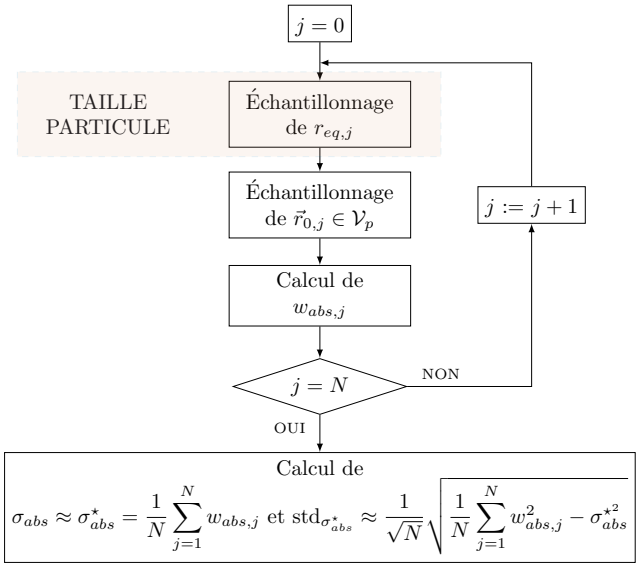



FIGURE V.5 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ en tenant compte de la distribution de taille des particules. La $j^{ème}$ réalisation de l'algorithme de Monte Carlo consiste en les étapes suivantes : on échantillonne une taille $r_{eq,j}$, puis une position $\vec{r}_{0,j}$ dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule . Enfin, le poids de Monte Carlo $w_{abs,j}$ est évalué. Cet algorithme est répété $N$ fois, ce qui permet d'obtenir une estimation $\sigma^{\star}_{abs}$ de $\sigma_{abs}$ ainsi qu'une estimation $\mathrm{std}_{\sigma^{\star}_{abs}}$ de l'écart type associé.

**Section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$.** Elle est obtenue en sommant la section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$ et d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ :

$$\hat{\sigma}_{ext} = \hat{\sigma}_{sca} + \hat{\sigma}_{abs} \tag{V.36}$$

### V.1.5 Calcul systématique de sensibilités

Comme nous l'avons fait dans le chapitre précédent (voir Sec. IV.1.6), le calcul des propriétés radiatives est systématiquement complété par un calcul de sensibilités para-

métriques. On rappelle que la sensibilité d'une grandeur $G$ par rapport à un paramètre $\pi$, notée $\partial_\pi G$, correspond à la dérivée de $G$ par rapport à $\pi$. Dans ce qui suit, nous proposons de calculer les sensibilités de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport aux parties réelle $n_r$ et imaginaire $\kappa_r$ de l'indice complexe de réfraction relatif ainsi qu'à la longueur d'onde du milieu environnant $\lambda_e$. Nous noterons de manière synthétique $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ pour désigner l'un de ces trois paramètres. En partant de l'expression de $W_{sca}$ (voir Eq. V.17), puis en procédant comme dans Sec. IV.1.6, la formulation intégrale de la sensibilité de $W_{sca} \equiv W_{sca}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)$ par rapport au paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\partial_\pi^n W_{sca} &= \frac{\partial^n W_{sca}}{\partial \pi^n} \\ &= \frac{\partial^n}{\partial \pi^n}\Bigg[\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ &\qquad \times \int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)\Bigg]\end{aligned} \tag{V.37}$$

Puisque le paramètre $\pi$ n'intervient que dans l'expression de $w$ (ceci correspond au cas 4 dans Sec. IV.1.6), l'opérateur dérivé peut sans difficulté passer sous les intégrales de sorte que Eq. V.37 devienne :

$$\begin{aligned}\partial_\pi^n W_{sca} = &\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ &\times \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \underbrace{\frac{\partial^n w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi^n}}_{w_{\pi,n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}\end{aligned} \tag{V.38}$$

où l'on a introduit la fonction poids $w_{\pi,n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)$ :

$$w_{\pi,n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi) = \frac{\partial^n w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)}{\partial \pi^n} \tag{V.39}$$

La formulation intégrale obtenue pour la sensibilité $\partial_\pi^n W_{sca}$ est identique à la grandeur initiale $W_{sca}$ ; seule la fonction poids change. Par conséquent, l'algorithme de Monte Carlo est identique à celui de $W_{sca}$ présenté Sec. V.1.3 et la fonction poids est calculée selon Eq. V.39 où la quantité $w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi)$ est donnée par Eq. V.25 dans le cas de particules homogènes. Nous la rappelons ci-dessous en mettant en évidence les dépendances au paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$ :

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \pi) = \frac{k_e^4 V_p^2}{8\pi^2} |(n_r - i\kappa_r)^2 - 1|^2 \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right) (1 + \cos^2 \vartheta_{sca}) \tag{V.40}$$

**Poids de Monte Carlo $w_{n_r,n}$ des sensibilités $n^{\text{ème}}$ de $W_{sca}$ par rapport à $n_r$.**

Comme on peut le constater sur Eq. V.40, la dépendance à la partie réelle $n_r$ de l'indice de réfraction relatif se fait par l'intermédiaire du terme $|(n_r - i\kappa_r)^2 - 1|^2$. Pour les calculs, nous utilisons la forme développée de ce terme :

$$|(n_r - i\kappa_r)^2 - 1|^2 = n_r^4 + \kappa_r^4 + 2n_r^2\kappa_r^2 + 2\kappa_r^2 - 2n_r^2 + 1 \tag{V.41}$$

En injectant Eq. V.41 dans Eq. V.40, le calcul des dérivées successives de la fonction poids $w$ de la section efficace différentielle de diffusion est direct ; il suffit seulement de calculer les dérivées par rapport à $n_r$ de Eq. V.41. Ainsi, les fonctions poids des sensibilités $n^{\text{ème}}$ de $W_{sca}$ par rapport à $n_r$ sont données par :

$$\begin{aligned}
w_{n_r,1} &= \frac{\partial w}{\partial n_r} = \frac{k_e^4}{2\pi} V_p^2 \left[n_r^3 + n_r\kappa_r^2 - n_r\right] \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{n_r,2} &= \frac{\partial^2 w}{\partial n_r^2} = \frac{k_e^4}{2\pi} V_p^2 \left[3n_r^2 + \kappa_r^2 - 1\right] \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{n_r,3} &= \frac{\partial^3 w}{\partial n_r^3} = \frac{3k_e^4}{\pi} V_p^2 n_r \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{n_r,4} &= \frac{\partial^4 w}{\partial n_r^4} = \frac{3k_e^4}{\pi} V_p^2 \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{n_r,n} &= \frac{\partial^n w}{\partial n_r^n} = 0 \qquad \forall n \geq 5
\end{aligned} \tag{V.42}$$

**Poids de Monte Carlo $w_{\kappa_r,n}$ des sensibilités $n^{\text{ème}}$ de $W_{sca}$ par rapport à $\kappa_r$.**

Tout comme dans le paragraphe précédent, on constate (voir Eq. V.40) que la dépendance à la partie imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfraction relatif se fait par l'intermédiaire du terme $|(n_r - i\kappa_r)^2 - 1|^2$. On peut alors procéder comme précédemment sauf que cette fois-ci, on dérive par rapport à $\kappa_r$. Ainsi, les fonctions poids des sensibilités $n^{\text{ème}}$ de $W_{sca}$ par rapport à $\kappa_r$ sont données par :

$$\begin{aligned}
w_{\kappa_r,1} &= \frac{\partial w}{\partial \kappa_r} = \frac{k_e^4}{2\pi} V_p^2 \left[\kappa_r^3 + n_r^2\kappa_r + \kappa_r\right] \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{\kappa_r,2} &= \frac{\partial^2 w}{\partial \kappa_r^2} = \frac{k_e^4}{2\pi} V_p^2 \left[3\kappa_r^2 + n_r^2 + 1\right] \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{\kappa_r,3} &= \frac{\partial^3 w}{\partial \kappa_r^3} = \frac{3k_e^4}{\pi} V_p^2 \kappa_r \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{\kappa_r,4} &= \frac{\partial^4 w}{\partial \kappa_r^4} = \frac{3k_e^4}{\pi} V_p^2 \cos\left(k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \\
w_{\kappa_r,n} &= \frac{\partial^n w}{\partial \kappa_r^n} = 0 \qquad \forall n \geq 5
\end{aligned} \tag{V.43}$$

**Poids de Monte Carlo $w_{\lambda_e,n}$ des sensibilités $n^{\text{ème}}$ de $W_{sca}$ par rapport à $\lambda_e$.**

La dépendance à la longueur d'onde $\lambda_e$ se fait par l'intermédiaire du nombre d'onde $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$ qui intervient dans la fonction cosinus ainsi que dans le facteur $k_e^4$ (voir Eq. V.40). Pour des raisons de simplicité et de clarté, nous introduisons les quantités :

$$\zeta = 2\pi(\vec{e}_i - \vec{e}_s) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \tag{V.44}$$

$$\xi = \frac{\pi^2}{2}|m_r^2 - 1|^2 V_p^2 (1 + \cos\vartheta_{sca}) \tag{V.45}$$

de sorte à écrire $w$ (voir Eq. V.40) sous la forme :

$$w(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \lambda_e) = \frac{\xi}{\lambda_e^4} \cos\left(\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) \tag{V.46}$$

Le détails des calculs de la fonction poids $w_{\lambda_e,n}$ de la sensibilité $n^{\text{ème}}$ par rapport à $\lambda_e$ sont fournis en Annexe H.3. Nous donnons ici seulement le résultat final :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \qquad w_{\lambda_e,n} = \frac{\partial^n w}{\partial \lambda_e^n} = \frac{\xi}{\lambda_e^{n+4}}\left[U_n \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_n \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \tag{V.47}$$

avec $U_n$ et $V_n$ deux suites dépendantes de la longueur d'onde $\lambda_e$ et données par :

$$\begin{aligned} U_n &= -(n+3)U_{n-1} + \lambda_e U'_{n-1} - \frac{\zeta}{\lambda_e} V_{n-1} \\ V_n &= -(n+3)V_{n-1} + \lambda_e V'_{n-1} + \frac{\zeta}{\lambda_e} U_{n-1} \\ U_1 &= -4 \\ V_1 &= \frac{\zeta}{\lambda_e} \end{aligned} \tag{V.48}$$

où $U'_{n-1}$ et $V'_{n-1}$ désignent respectivement les dérivées de $U_{n-1}$ et $V_{n-1}$ par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$.

**Sensibilités $n^{\text{ème}}$ de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$**

Sous l'hypothèse d'une distribution isotrope des directions $\vec{e}_s$, les sensibilités pour la section efficace $\sigma_{sca}$ suivant les trois paramètres $n_r, \kappa_r$ et $\lambda_e$ sont obtenues en multipliant par $4\pi$ les expressions des sensibilités établies pour la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$.

### V.1.6 Conclusion

Comme dans le chapitre précédent sur l'approximation de Schiff, nous avons bénéficié des caractéristiques de la méthode de Monte Carlo :

1. traitement direct des géométries complexes dont nous verrons la mise en œuvre dans la section suivante,
2. traitement des distributions statistiques de paramètres tels que la taille, l'orientation et même la forme (il suffit de rajouter un échantillonnage sur les formes des particules dans l'algorithme),
3. calcul de sensibilités paramétriques.

Les points délicats tels que la non linéarité quadratique et les matrices de nombres complexes ont été traités sans trop de difficultés. Tous ces éléments nous ont permis de concevoir des algorithmes originaux pour l'estimation des champs diffusé, de la matrice amplitude de diffusion, des propriétés radiatives et de leurs sensibilités. Ainsi, tout est en place pour mener à bien la résolution de l'approximation de Born par la méthode de Monte Carlo. Dans la suite, nous nous intéressons à la mise en œuvre pratique des algorithmes construits dans cette section.

## V.2 Mise en œuvre pratique

Bien que les formulations intégrales établies précédemment sont valables pour des particules hétérogènes, nous nous intéressons ici à la mise en œuvre de nos algorithmes pour des particules homogènes. Ces dernières peuvent être de géométries complexes et sont spécifiées à partir d'un fichier CAO fourni par l'utilisateur. La question de la mise en œuvre pour des particules hétérogènes n'est pas abordée car elle nécessite ici de gérer des données volumiques (ici l'indice de réfraction), ce qui sort du cadre de la présente thèse.

### V.2.1 Procédures d'échantillonnages

**Échantillonnage d'une position dans le volume de la particule.** Contrairement au chapitre précédent, l'échantillonnage d'une position ne se fait pas sur la surface projetée de la particule mais dans le volume $\mathcal{V}_p$ de celle-ci. Puisque les particules considérées ici sont à géométries complexes, un tel échantillonnage pose une difficulté qui peut-être levée en suivant la même logique que pour un échantillonnage d'une position sur la surface projetée inconnue d'une particule (voir Sec. IV.2.2). Plutôt que d'échantillonner directement une position dans le volume de la particule, nous introduisons un volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$, contenant la particule de domaine $\mathcal{V}_p$. On choisit un volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$ sur lequel on sait échantillonner une position $\vec{r}_0$, par exemple une sphère. Puis, une fois que la position $\vec{r}_0$ est échantillonnée, il s'agit de savoir si cette position appartient au volume de la particule ou non. Cela se fait en deux étapes. La première consiste à calculer la première intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ d'origine $\vec{r}_0$ et de direction $\vec{\omega}$ arbitraire ((0,0,1), par

exemple). Comme nous l'avons déjà rencontré dans le chapitre sur l'approximation de Schiff (voir Sec. IV.2.2), cette intersection est calculée en appelant la fonction `Intersect` qui est disponible dans la librairie de calcul scientifique PBRT que nous utilisons [Pharr et al., 2016]. Cette fonction renvoie l'intersection ainsi que la normale sortante $\vec{n}$ à la frontière de la particule. La seconde étape consiste à calculer le produit scalaire $\vec{\omega} \cdot \vec{n}$. On distingue alors trois cas qui sont détaillés dans Fig. V.6. Au final, si, à l'issue de ce test d'intersection, $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$ (cas 3 de Fig. V.6 où $\vec{\omega} \cdot \vec{n} > 0$), alors on conserve cette position ; sinon on la rejette et on recommence un nouvel échantillonnage. Cette procédure de rejet permet d'échantillonner une position dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule ; il n'y a alors pas besoin de modifier les expressions des fonctions poids. Ceci est un avantage car il n'y a aucun impact sur la variance de l'algorithme. Par contre, la taille du volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$ a une influence sur le temps de calcul. En effet, si celui-ci est grand comparé au volume de la particule, alors le nombre de positions rejetées augmentera.

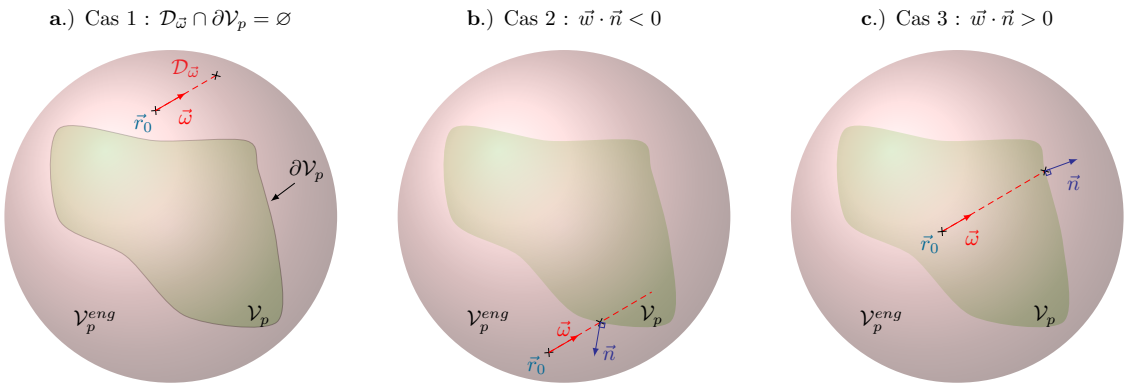



FIGURE V.6 – Échantillonnage d'une position $\vec{r}_0$ dans une particule de domaine $\mathcal{V}_p$. Premièrement, on échantillonne une position $\vec{r}_0$ dans un volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$. Puis, on cherche l'intersection (si elle existe) entre, d'une part, la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ d'origine $\vec{r}_0$ et dirigée suivant la direction $\vec{\omega}$ (fixée au préalable), et d'autre part, la frontière de la particule $\partial\mathcal{V}_p$ orientée suivant la normale sortante $\vec{n}$. Cela permet de savoir si la position $\vec{r}_0$ échantillonnée appartient à la particule ou non. On distingue trois configurations possibles. a.) Cas 1 - L'intersection $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p$ n'existe pas : la position $\vec{r}_0$ est en dehors du volume de la particule et est donc rejetée. b.) Cas 2 - L'intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ et la surface de la particule existe et $\vec{\omega} \cdot \vec{n} < 0$ : l'échantillonnage de la position $\vec{r}_0$ est rejetée. c.) Cas 3 - L'intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ et la surface de la particule existe et $\vec{\omega} \cdot \vec{n} > 0$ : l'échantillonnage de la position $\vec{r}_0$ est conservée.

L'algorithme détaillé permettant d'échantillonner une position $\vec{r}_0$ dans un volume $\mathcal{V}_p$ s'énonce comme suit :

**Algorithme 20: Échantillonnage d'une position $\vec{r}_0$ dans un volume $\mathcal{V}_p$**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est uniformément échantillonnée dans le volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$ contenant la particule $\mathcal{V}_p$ selon la densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) = \frac{1}{V_p^{eng}}$.
- **Étape 2** : un test d'intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ d'origine $\vec{r}_0$ dirigée suivant $\vec{\omega}$ et la géométrie délimitée par la frontière $\partial\mathcal{V}_p$ est réalisé :
  - **Étape 2.1** : Si $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p = \varnothing$, alors $\vec{r}_0 \notin \mathcal{V}_p$. On rejette cet échantillonnage et l'algorithme boucle à l'**étape 1**.
  - **Étape 2.2** : Si $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p \neq \varnothing$, alors une intersection a été trouvée. Deux cas se présentent (on note $\vec{n}$ la normale sortante à $\partial\mathcal{V}_p$) :
    - **Étape 2.2.1** : Si $\vec{\omega} \cdot \vec{n} < 0$, alors $\vec{r}_0 \notin \mathcal{V}_p$. On rejette cet échantillonnage et l'algorithme boucle à l'**étape 1**.
    - **Étape 2.2.1** : Si $\vec{\omega} \cdot \vec{n} > 0$, alors $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$. On conserve alors cette position $\vec{r}_0$.

**Échantillonnage d'une taille.** Comme nous l'avons vu Sec. IV.2.2, redéfinir la représentation de la géométrie mise en RAM à chaque nouvelle taille de la particule (et donc à chaque réalisation de l'algorithme) s'avère très couteux en temps de calcul. Pour contourner ce problème, nous procédons comme cela a été discuté dans Sec. IV.2.2. Sans rentrer dans les détails, on rappelle que l'idée est de fixer la géométrie puis d'effectuer un changement d'échelle en adaptant, dans le code, la longueur d'onde pour obtenir une configuration équivalente à celle initialement souhaitée (voir Fig. V.7).

Ce changement d'échelle implique de modifier l'expression de la fonction poids du problème initial pour obtenir l'expression de la fonction poids du problème équivalent. À première vue, il suffirait de procéder comme suit :

1. on remplace $\lambda_e$ par $\mathring{\lambda}_e = \delta_g \lambda_e = \left(\frac{V_p^{\text{CAO}}}{V_p}\right)^{\frac{1}{3}} \lambda_e$
2. on remplace $V_p$ par $V_p^{\text{CAO}}$

Cependant, se restreindre à ces deux étapes n'est pas suffisant car ici la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ n'est pas invariante par ce changement de variable. Cela est dû au choix de convention pris pour définir la matrice $\bar{\bar{S}}$ (voir Eq. I.14). En particulier, dans notre convention, il n'y a pas le terme $\frac{1}{k_e}$ comme dans la convention choisie (par exemple) par

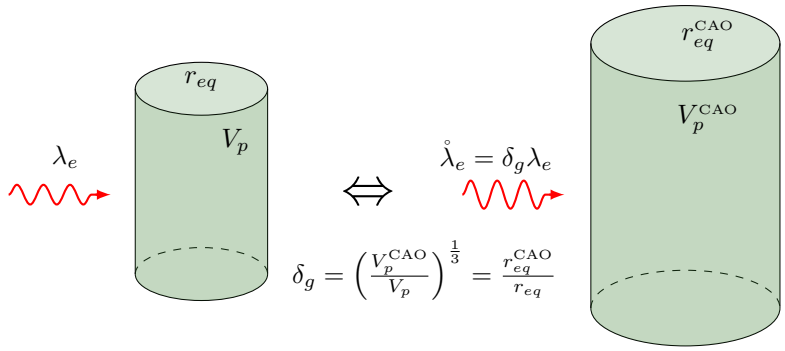



FIGURE V.7 – Schématisation de l'adaptation de la longueur d'onde du rayonnement incident en fonction de la taille de la géométrie fixée. Soit une particule de volume $V_p$ caractérisée par un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon équivalent de la sphère en volume, et soumise à un rayonnement incident de longueur d'onde $\lambda_e$. La résolution du problème de diffusion pour une telle particule est équivalent à résoudre le problème de diffusion pour une particule de volume $V_p^{\mathrm{CAO}}$ caractérisée par un rayon $r_{eq}^{\mathrm{CAO}}$, et qui est soumise à un rayonnement incident de longueur d'onde $\mathring{\lambda}_e = \delta_g \lambda_e$. La quantité $\delta_g$ étant le rapport entre les deux rayons équivalents, soit $\delta_g = \frac{r_{eq}^{\mathrm{CAO}}}{r_{eq}}$.

BOHREN et HUFFMAN [Bohren and Huffman, 1983] :

$$\begin{bmatrix} \mathscr{E}_{sca}^{\theta} \\ \mathscr{E}_{sca}^{\varphi} \end{bmatrix} = \bar{\bar{S}} \frac{e^{-ik_e r}}{-ir} \begin{bmatrix} \mathscr{E}_{0,inc}^{\theta} \\ \mathscr{E}_{0,inc}^{\varphi} \end{bmatrix} \qquad \text{notre convention}$$

$$\begin{bmatrix} \mathscr{E}_{sca}^{\theta} \\ \mathscr{E}_{sca}^{\varphi} \end{bmatrix} = \bar{\bar{S}}_{BH} \frac{e^{ik_e r}}{-ik_e r} \begin{bmatrix} \mathscr{E}_{0,inc}^{\theta} \\ \mathscr{E}_{0,inc}^{\varphi} \end{bmatrix} \qquad \text{convention de BOHREN et HUFFMAN}$$

En pratique, pour corriger cela, il suffit de multiplier la fonction poids du problème équivalent par $\frac{1}{\delta_g}$. Pour le voir, nous proposons de repartir de la formulation intégrale de $\bar{\bar{S}}$ :

$$\bar{\bar{S}} = -\frac{ik_e^2}{4\pi} \iiint_{\mathcal{V}_p} (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{V.49}$$

Dans un premier temps, il va s'agir d'écrire la formulation intégrale du problème équivalent. Pour ce faire, nous effectuons le changement de variable $\vec{r}_0 = \frac{1}{\delta_g}\vec{r}_{\mathrm{CAO}}$. L'élément de volume $d\vec{r}_0$ est alors donné par $d\vec{r}_0 = \frac{1}{\delta_g^3} d\vec{r}_{\mathrm{CAO}}$. Ainsi, Eq. V.49 devient :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{S}} &= -\frac{ik_e^2}{4\pi} \iiint_{\mathcal{V}_p^{\mathrm{CAO}}} (m_r^2(\vec{r}_{\mathrm{CAO}}) - 1) e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\frac{\vec{r}_{\mathrm{CAO}}}{\delta_g}} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \frac{1}{\delta_g^3} d\vec{r}_{\mathrm{CAO}} \\ &= -\frac{i}{4\pi}\frac{k_e^2}{\delta_g^2} \iiint_{\mathcal{V}_p^{\mathrm{CAO}}} (m_r^2(\vec{r}_{\mathrm{CAO}}) - 1) e^{-i\frac{k_e}{\delta_g}(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_{\mathrm{CAO}}} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \frac{1}{\delta_g} d\vec{r}_{\mathrm{CAO}} \end{aligned} \tag{V.50}$$

En introduisant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_{\mathrm{CAO}}}(\vec{r}_{\mathrm{CAO}}) = \frac{1}{V_p^{\mathrm{CAO}}}$, on en déduit la fonction poids du problème équivalent :

$$\bar{\bar{w}} = -\frac{1}{\delta_g}\frac{i\mathring{k}_e^2}{4\pi} V_p^{\mathrm{CAO}} (m_r^2(\vec{r}_{\mathrm{CAO}}) - 1) e^{-i\mathring{k}_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_{\mathrm{CAO}}} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{V.51}$$

où l'on a introduit la quantité

$$\mathring{k}_e = \frac{k_e}{\delta_g} = \frac{2\pi}{\lambda_e \delta_g} = \frac{2\pi}{\mathring{\lambda}_e}$$

Ainsi, comme annoncé précédemment, nous devons multiplier la fonction poids de $\bar{\bar{S}}$ par $\frac{1}{\delta_g}$. Ceci n'aurait pas été le cas avec la convention de Bohren et Huffman car il y aurait eu un $k_e^3$ dans la formulation intégrale initiale de $\bar{\bar{S}}_{BH}$ qui aurait conduit à un terme en $\mathring{k}_e^3 = \frac{k_e^3}{\delta_g^3}$ dans celle du problème équivalent.

Puisque, avec notre convention, la matrice $\bar{\bar{S}}$ n'est pas invariante à ce changement d'échelle, on retrouve cette propriété sur les sections efficaces $(\sigma_{ext}, \sigma_{abs}, \sigma_{sca})$ et la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$. Pour ces grandeurs énergétiques, nous aurons à multiplier les fonctions poids par $\frac{1}{\delta_g^2}$ (on rappelle, par exemple, que $W_{sca}$ est une grandeur quadratique de $\bar{\bar{S}}$). Par contre, les efficacités et la fonction de phase sont quant à elles invariantes (il n'y a pas de correction à faire). En résumé, les fonctions poids du problème équivalent sont obtenues à partir de celles du problème initial en suivant les étapes suivantes :

1. on remplace $\lambda_e$ par $\mathring{\lambda}_e = \delta_g \lambda_e$
2. on remplace $V_p$ par $V_p^{\text{CAO}}$
3. on multiplie soit par $\frac{1}{\delta_g}$ pour $\bar{\bar{S}}$, soit par $\frac{1}{\delta_g^2}$ pour les propriétés radiatives.

**Échantillonnage d'une orientation.** Nous l'avons vu dans la Sec. IV.2.2, que redéfinir la représentation de la géométrie mise en RAM à chaque nouvelle orientation de la particule (et donc à chaque réalisation de l'algorithme) est très couteux en temps de calcul. Or on constate que l'échantillonnage d'une orientation d'une particule est complètement équivalent à échantillonner une direction d'incidence $\vec{e}_i$ et un angle $\phi_{sca}$ (nous n'avions pas cet angle dans le chapitre précédent car les fonctions poids y étaient indépendantes, ce qui n'est plus le cas ici). Ceci revient à faire pivoter le plan de diffusion formé par les directions $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$. En procédant ainsi, il est alors possible de fixer, dans le fichier comportant la géométrie, l'orientation $\vec{e}_o$ de la particule une fois pour toutes. L'échantillonnage de la direction $\vec{e}_i$ est choisi isotrope et celui de l'angle $\phi_{sca}$ est choisi uniforme. Ainsi les fonctions densités de probabilité correspondantes s'écrivent :

$$p_{\vec{E}_i}(\vec{e}_i) = \frac{1}{4\pi} \tag{V.52}$$

$$p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = \frac{1}{2\pi} \tag{V.53}$$

Comme nous l'avons vu dans Sec. IV.1.4, dans le cas d'une distribution isotrope des directions nous avons

$$p_{\Theta_i}(\theta_i) = \frac{\sin\theta_i}{2} \tag{V.54}$$

$$p_{\Phi_i}(\varphi_i) = \frac{1}{2\pi} \tag{V.55}$$

où $\theta_i$ et $\varphi_i$ sont les deux angles de la direction d'incidence $\vec{e}_i$. Ainsi, en pratique, l'intégration sur les orientations $\vec{e}_o$ d'une particule se décompose de la façon suivante :

$$\int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \equiv \int_0^{2\pi} d\phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \int_0^{\pi} d\theta_i p_{\Theta_i}(\theta_i) \int_0^{2\pi} d\varphi_i p_{\Phi_i}(\varphi_i) \tag{V.56}$$

L'algorithme correspondant à l'échantillonnage d'une orientation $\vec{e}_o$ s'énonce :

**Algorithme 21: Échantillonnage d'une orientation $\vec{e}_o$**

- **Étape 1** : un angle $\phi_{sca}$ est uniformément échantillonné sur $[0, 2\pi]$ selon $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca})$.
- **Étape 2** : un angle $\theta_i$ est échantillonné sur $[0, \pi]$ selon $p_{\Theta_i}(\theta_i)$.
- **Étape 3** : un angle $\phi_i$ est échantillonné sur $[0, 2\pi]$ selon $p_{\Phi_i}(\varphi_i)$.

**Échantillonnage d'une direction d'observation.** De la même façon que nous avons échantillonné une direction d'incidence $\vec{e}_i$, nous choisissons d'échantillonner de façon isotrope une direction d'observation $\vec{e}_s$. Cette dernière peut-être définie soit à l'aide des angles $\theta_s$ et $\varphi_s$, soit à l'aide des angles $\vartheta_{sca}$ et $\phi_{sca}$ (voir Eq. III.88). Nous choisissons plutôt la seconde option, car nous pourrons alors réutiliser l'échantillonnage de l'angle $\phi_{sca}$ qui est nécessaire pour échantillonner une orientation $\vec{e}_o$. Il ne nous reste plus qu'à échantillonner un angle $\vartheta_{sca}$. Pour un échantillonnage isotrope, nous avons :

$$p_{\Theta_{sca}}(\vartheta_{sca}) = \frac{\sin\vartheta_{sca}}{2} \tag{V.57}$$

$$p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) = \frac{1}{2\pi} \tag{V.58}$$

Ainsi, en pratique, l'intégration sur la direction $\vec{e}_s$ se décompose de la façon suivante :

$$\int_{4\pi} d\vec{e}_s p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) \equiv \int_0^{\pi} d\vartheta_{sca} p_{\Theta_{sca}}(\vartheta_{sca}) \int_0^{2\pi} d\Phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \tag{V.59}$$

L'algorithme correspondant à l'échantillonnage isotrope d'une direction $\vec{e}_s$ s'énonce :

**Algorithme 22: Échantillonnage d'une direction $\vec{e}_s$**

- **Étape 1** : un angle $\vartheta_{sca}$ est échantillonné sur $[0, \pi]$ selon $p_{\Theta_{sca}}(\vartheta_{sca})$.
- **Étape 2** : un angle $\Phi_{sca}$ est échantillonné sur $[0, 2\pi]$ selon $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca})$.

### V.2.2 Retour sur la formulation intégrale et algorithme détaillé

L'objet de cette section est de regrouper tout ce qui a été présenté dans la section précédente. Pour ce faire, nous prenons la formulation intégrale de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ (qui utilise tous les échantillonnages mentionnés précédemment) donnée par Eq. V.28 que nous redonnons ci-dessous :

$$\begin{aligned}\sigma_{sca} = \int_{4\pi} d\vec{e}_s p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w_{sca}\end{aligned} \tag{V.60}$$

En utilisant Eqs. V.56 et V.59, la formulation intégrale de $\sigma_{sca}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\sigma_{sca} = \int_0^{\pi} d\vartheta_{sca} p_{\Theta_{sca}}(\vartheta_{sca}) \int_0^{2\pi} d\Phi_{sca} p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca}) \int_0^{\pi} d\theta_i p_{\Theta_i}(\theta_i) \int_0^{2\pi} d\varphi_i p_{\Phi_i}(\varphi_i) \\ \times \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) w_{sca}\end{aligned} \tag{V.61}$$

L'algorithme de Monte Carlo correspondant à cette formulation intégrale s'énonce (voir également Fig. V.8) :

**Algorithme 23: Approximation de Born - Section efficace de diffusion**

- **Étape 1** : un angle $\vartheta_{sca}$ est échantillonné sur $[0, \pi]$ selon $p_{\Theta_{sca}}(\vartheta_{sca})$.
- **Étape 2** : un angle $\Phi_{sca}$ est échantillonné sur $[0, 2\pi]$ selon $p_{\Phi_{sca}}(\phi_{sca})$.
- **Étape 3** : un angle $\theta_i$ est échantillonné sur $[0, \pi]$ selon $p_{\Theta_i}(\theta_i)$.
- **Étape 4** : un angle $\varphi_i$ est échantillonné sur $[0, 2\pi]$ selon $p_{\Phi_i}(\varphi_i)$.
- **Étape 5** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 6** : une première position $\vec{r}_1$ est uniformément échantillonnée dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ :

- **Étape 6.1** : une position $\vec{r}_1$ est uniformément échantillonnée dans le volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$ contenant la particule $\mathcal{V}_p$ selon la densité de probabilité $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) = \frac{1}{V_p^{eng}}$.
- **Étape 6.2** : un test d'intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ d'origine $\vec{r}_1$ dirigée suivant $\vec{\omega}$ et la géométrie délimitée par la frontière $\partial\mathcal{V}_p$ est réalisé :
  - **Étape 6.2.1** : Si $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p = \varnothing$, alors $\vec{r}_1 \notin \mathcal{V}_p$. On rejette cet échantillonnage et l'algorithme boucle à l'**étape 6**.
  - **Étape 6.2.2** : Si $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p \neq \varnothing$, alors une intersection a été trouvée. Deux cas se présentent (on note $\vec{n}$ la normale sortante à $\partial\mathcal{V}_p$) :
    - **Étape 6.2.2.1** : Si $\vec{\omega} \cdot \vec{n} < 0$, alors $\vec{r}_1 \notin \mathcal{V}_p$. On rejette cet échantillonnage et l'algorithme boucle à l'**étape 6**.
    - **Étape 6.2.2.2** : Si $\vec{\omega} \cdot \vec{n} > 0$, alors $\vec{r}_1 \in \mathcal{V}_p$. On conserve alors cette position $\vec{r}_1$.

- **Étape 7** : une seconde position $\vec{r}_2$ est uniformément échantillonnée dans le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ :
  - **Étape 7.1** : une position $\vec{r}_2$ est uniformément échantillonnée dans le volume englobant $\mathcal{V}_p^{eng}$ contenant la particule $\mathcal{V}_p$ selon la densité de probabilité $p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) = \frac{1}{V_p^{eng}}$.
  - **Étape 7.2** : un test d'intersection entre la demi-droite $\mathcal{D}_{\vec{\omega}}$ d'origine $\vec{r}_2$ dirigée suivant $\vec{\omega}$ et la géométrie délimitée par la frontière $\partial\mathcal{V}_p$ est réalisé :
    - **Étape 7.2.1** : Si $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p = \varnothing$, alors $\vec{r}_2 \notin \mathcal{V}_p$. On rejette cet échantillonnage et l'algorithme boucle à l'**étape 7**.
    - **Étape 7.2.2** : Si $\mathcal{D}_{\vec{\omega}} \cap \partial\mathcal{V}_p \neq \varnothing$, alors une intersection a été trouvée. Deux cas se présentent (on note $\vec{n}$ la normale sortante à $\partial\mathcal{V}_p$) :
      - **Étape 7.2.2.1** : Si $\vec{\omega} \cdot \vec{n} < 0$, alors $\vec{r}_2 \notin \mathcal{V}_p$. On rejette cet échantillonnage et l'algorithme boucle à l'**étape 7**.
      - **Étape 7.2.2.2** : Si $\vec{\omega} \cdot \vec{n} > 0$, alors $\vec{r}_2 \in \mathcal{V}_p$. On conserve alors cette position $\vec{r}_2$.

- **Étape 8** : le poids de Monte Carlo $w_{sca}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s)$, donné par Eq. V.31 (particules hétérogènes) ou Eq. V.32 (particules homogènes), est calculé.

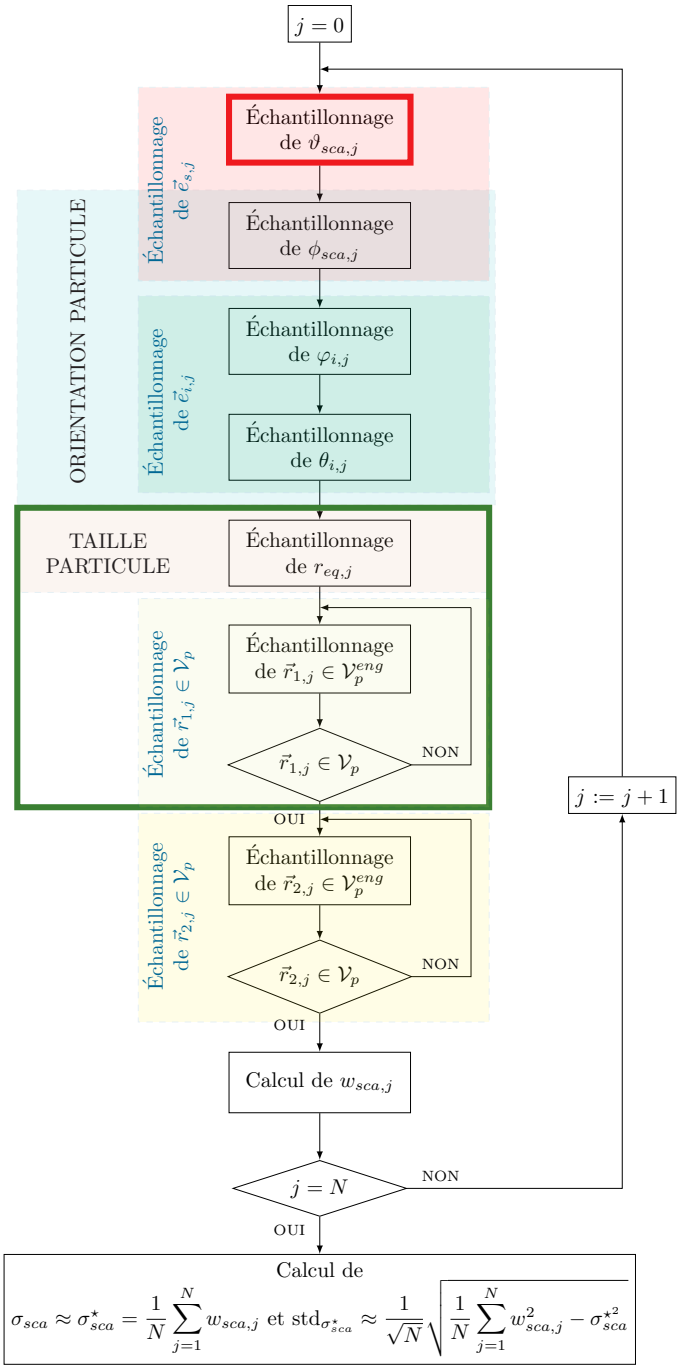



FIGURE V.8 – Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ en tenant compte des distributions d'orientation et de taille des particules. Cet organigramme détaille les procédures d'échantillonnage de la $j^{ème}$ réalisation de l'algorithme de Monte Carlo présenté dans la légende de Fig. V.4. Plus généralement, cet algorithme peut également être utilisé pour évaluer toutes les autres propriétés radiatives. Le cadre rouge indique que l'échantillonnage en question n'est pas utilisé pour estimer la grandeur $W_{sca}$. Le cadre vert indique que l'évaluation de la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ utilise seulement ces deux procédures d'échantillonnage (voir Fig. V.5).

Même si l'algorithme précédent a été détaillé sur la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$, il est directement utilisable pour calculer toutes les autres propriétés radiatives ($W_{sca}$, $\sigma_{abs}$, $\sigma_{ext}$) ainsi que leurs sensibilités. En effet, en suivant la même démarche présentée dans Sec. IV.1.7, il est possible d'écrire les propriétés radiatives sous la même formulation intégrale que $\sigma_{sca}$ ; seules les expressions des fonctions poids changent qui seront alors calculées en prenant uniquement les échantillonnages nécessaires. En ce qui concerne la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$, l'unique différence avec l'algorithme de $\sigma_{sca}$ est l'étape 1 puisque l'échantillonnage de $\vartheta_{sca}$ n'est pas utilisée (cette différence est repérée en encadré rouge dans Fig. V.8). Lors de la phase de programmation, il faudra toutefois bien différencier (par renommage) l'angle $\vartheta_{sca}$ qui est utilisé (et aléatoirement échantillonné) pour $\sigma_{sca}$ et les angles $\vartheta_{sca}$ utilisés (et fixés par l'utilisateur) pour $W_{sca}$. Pour la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$, seules les **étapes 5** et **6** sont nécessaires pour pouvoir calculer la fonction poids (ces étapes sont repérées en encadré vert dans Fig. V.8). Enfin, pour la section efficace d'extinction $\sigma_{ext}$, nous n'utilisons pas les échantillonnages des **étapes 1** et **7**.

Comme nous l'avons vu dans Sec. IV.1.1.1, si l'on souhaite tenir compte d'une distribution sur les formes des particules, il suffit simplement de rajouter une étape supplémentaire au début de l'algorithme. Cette étape correspond à l'échantillonnage d'une forme qui a été détaillé dans Sec. IV.2.2.

### V.2.3 Mise en œuvre des variantes de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye

Dans le chapitre état de l'art (voir Sec. II.1.3.1), il a été mentionné un certain nombres d'améliorations et d'extensions de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye qui est une variante de l'approximation de Born (voir Sec. II.1.3.2) ; la différence résulte du fait que la quantité $m_r^2 - 1$ est approximée par $2(m_r - 1)$. La résolution de ces extensions, qui sont également des intégrales, est immédiate avec nos algorithmes qui viennent d'être détaillés. Il suffit seulement de modifier le poids de Monte Carlo, ce qui ne relève d'aucune difficulté particulière. Afin d'illustrer ce propos, prenons l'exemple de la variante proposée par Shimizu. Nous avions vu dans Sec. II.1.3.1 que cette variante est basée sur l'hypothèse que les champs incident et diffusé se propageaient dans la particule avec le nombre d'onde $n_r k_e$ (dans l'approximation de Born ou de Rayleigh-Gans-Debye, ils se propagent avec le nombre d'onde $k_e$). Sous ces hypothèses, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}_{Shimizu}$ s'écrit :

$$\bar{\bar{S}}^{Shimizu}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r(\vec{r}_0) - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-in_r(\vec{r}_0)k_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{V.62}$$

En procédant exactement comme dans Sec. V.1.2, on en déduit l'expression de la fonction poids donnée par :

$$\bar{\bar{w}}^{Shimizu} = -\frac{1}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r(\vec{r}_0)-1)e^{-in_r(\vec{r}_0)k_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{V.63}$$

Nous pouvons faire de même pour les autres variantes dont les expressions de la matrice amplitude de diffusion sont fournies en Annexe D.3.

## V.3 Résultats et validations

Dans les sections précédentes, à partir des formulations intégrales de l'approximation de Born, nous avons construit les algorithmes de Monte Carlo (voir dans Sec. V.1) correspondants et discuté de leur mise en œuvre pratique (voir dans Sec. V.2). Ces algorithmes résolvant l'approximation de Born permettent d'évaluer les propriétés radiatives pour une suspension de particules hétérogènes ou homogènes dans le cas de géométries complexes en tenant compte des distributions statistiques de paramètres tels que la taille, l'orientation et la forme.

Dans cette section, nous proposons de valider nos algorithmes sur trois suspensions de particules homogènes et homothétiques. Elles sont respectivement constituées de particules sphériques, cylindriques et cylindriques avec des extrémités sphériques. Nous tiendrons compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules. Pour les formes mentionnées, nous disposons des solutions analytiques ou semi-analytiques résolvant l'approximation de Born (voir dans Sec. II.1.3.2 du chapitre état de l'art et en Annexe D.1). Ces dernières sont résolues par la méthode de Monte Carlo afin de tenir compte des distributions de taille et d'orientation des particules. Pour les géométries sphériques et cylindriques, nous disposons également des résultats obtenus avec un code de référence T-Matrix disponible en ligne[1].

Dans la suite, les paramètres des simulations qui ont été choisis correspondent à des paramètres typiques pour l'étude des plus petits micro-organismes photosynthétiques qui vérifient le cadre de validité de l'approximation de Born (faible paramètre de taille et faible contraste d'indice, voir dans Sec. II.1.3.2 dans le chapitre état de l'art). De plus, nous choisissons, comme dans le chapitre précédent (voir Sec. IV.3.1.1), de décrire les tailles des particules selon une distribution log-normale (voir Eq. IV.160) paramétrée par $\vec{r}_{eq}$(rayon moyen de la sphère équivalente en volume) et $s$ (largeur de la distribution).

1. Code T-Matrix de M.I. MISHCHENKO disponible à l'adresse `https://www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko/t_matrix.html`

### V.3.1 Validation de nos algorithmes de Monte Carlo

Figs. V.9 et V.10 représentent la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ pour les trois suspensions de particules considérées. À noter que pour la suspension constituée de particules cylindriques avec extrémités sphériques, les résultats ne sont pas comparés à T-Matrix car le code que nous utilisons ne le permet pas. Fig. V.11 représente la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ en fonction du paramètre de taille $\bar{x} \in [0, 10]$ pour une suspension constituée de particules sphériques (respectivement cylindriques). Au regard de ces figures, on constate que les résultats obtenus avec nos algorithme de Monte Carlo (ceux construits pour n'importe quelle géométrie) se superposent parfaitement avec ceux obtenus à partir des solutions analytiques ou semi-analytiques, et sont également en très bon accord avec les résultats fournis à partir du code de référence T-Matrix.

À titre d'indication, une analyse de l'écart type relatif (voir Encart 7) sur les configurations étudiées dans Fig. V.9 a été réalisée. Cette analyse montre que nos algorithmes résolvant l'approximation de Born avec $10^6$ réalisations fournissent des écarts types relatifs inférieurs à 1% dans le cas où $\bar{x} = 1$, et inférieurs à 2% sur l'intervalle angulaire $[0, 20]$ (et jusqu'à 10% sur $[20, 30]$) dans le cas où $\bar{x} = 10$. Cela pourrait bien entendu être diminué en augmentant le nombre de réalisations (ce qui peut devenir couteux en temps de calcul) ou bien en utilisant une approche de type zéro-variance (voir Chap. VII). Toutefois, au regard des courbes (seconde ligne), la contribution principale à la section efficace différentielle de diffusion est située pour les petits angles de diffusion $\vartheta_{sca}$ compris entre 0° et 20° ; les résultats sont donc tout à fait satisfaisants au regard de l'application des procédés photo-réactifs.

**Encart 7: Écart type relatif**

On définit l'écart type relatif d'une grandeur (par exemple $W_{sca}$), noté $\epsilon_r^{W_{sca}}$, comme le rapport entre l'estimation de l'écart type $\mathrm{std}_{W^\star_{sca}}$ associé à l'estimation $W^\star_{sca}$ et l'estimation $W^\star_{sca}$ de la grandeur $W_{sca}$ :

$$\epsilon_r^{W_{sca}} = \frac{\mathrm{std}_{W^\star_{sca}}}{W^\star_{sca}} \tag{V.64}$$

Ainsi, compte tenu de tous ces résultats, nous pouvons considérer que nos algorithmes de Monte Carlo construits sont validés sur des géométries simples. Une validation de ces algorithmes sur des géométries complexes est tout à fait envisageable en poursuivant le travail qui a été initié avec l'Institut Fresnel qui sont en mesure de fournir des résultats expérimentaux de référence comme nous l'avons vu dans le cadre de l'approximation de

Schiff (voir Sec. IV.3.2). Nous pourrons alors les utiliser notamment pour des géométries complexes pour lesquels il n'y a pas de solutions analytiques ou semi-analytiques dans le cadre de l'approximation de Born qui fait toujours l'objet de travaux recherche comme nous l'avons mentionné dans Sec. II.1.3.1.

Bien que nos algorithmes soient validés, des difficultés de convergence apparaissent lorsque le paramètre de taille augmente. Cela se traduit par un écart type relatif qui augmente nous conduisant à augmenter le nombre de réalisations de sorte à avoir moins de 1% d'incertitude à $\bar{x} = 10$ sur la Fig. V.11. Or, augmenter le nombre de réalisations n'est pas une solution très efficace car elle s'avère coûteuse en temps de calcul. Une autre solution consiste à optimiser les procédures d'échantillonnages afin de réduire la variance des algorithmes. Pour y parvenir, nous utiliserons, au chapitre VII, une approche de type zéro-variance qui va nous servir de guide pour construire une fonction densité de probabilité la plus adaptée possible à notre étude.

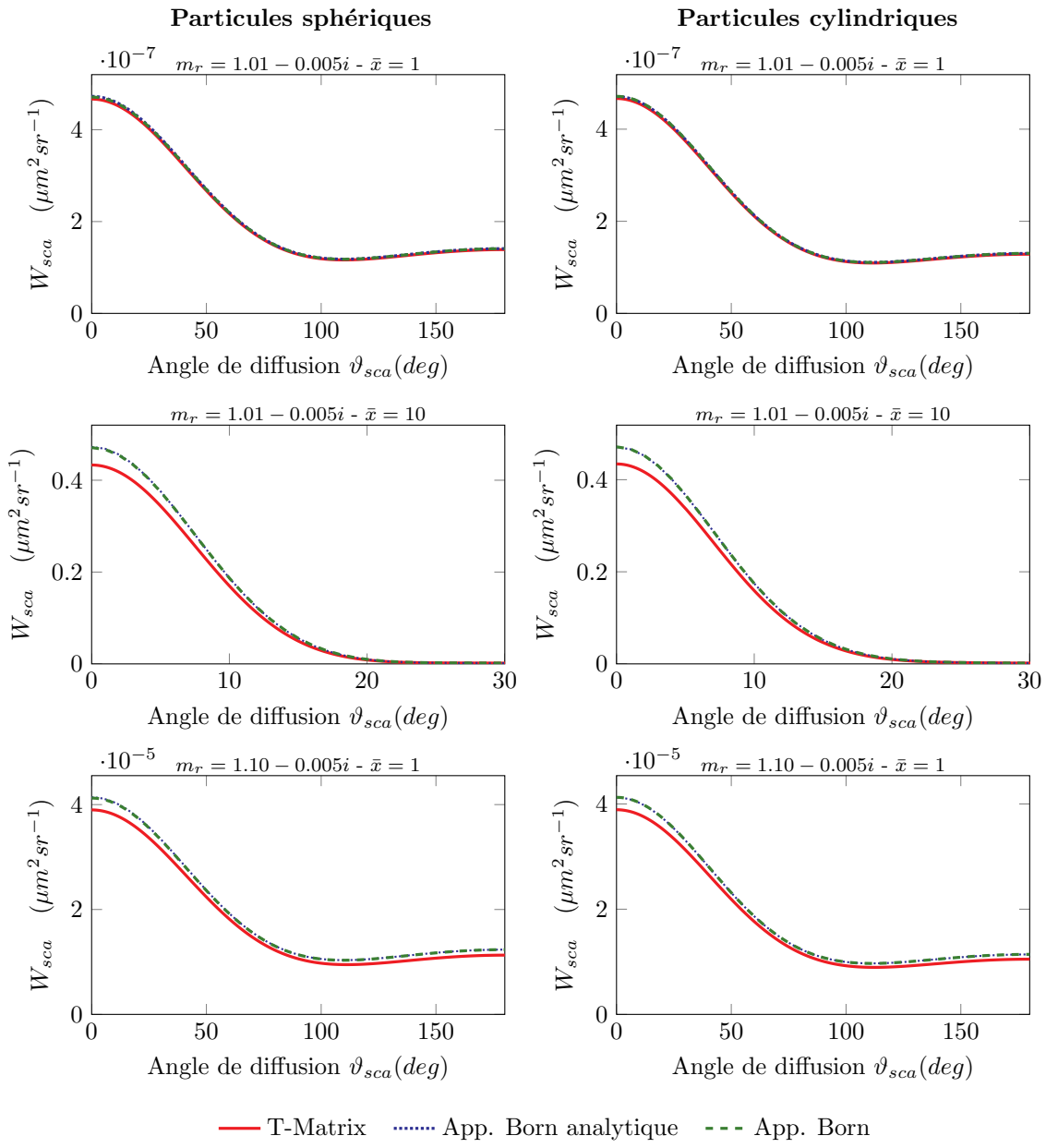



FIGURE V.9 – Section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une suspension de particules sphériques homogènes (colonne de gauche) et de particules cylindriques homogènes de rapport d'élongation $R = 0.837$ fixé (colonne de droite). Il est tenu compte des prises de moyennes sur les tailles et les orientations des particules. Les résultats sont fournis pour trois couples $(\bar{x}, m_r)$ différents : $(\bar{x} = 1, m_r = 1.01 - 0.005i)$ (première ligne), $(\bar{x} = 10, m_r = 1.01 - 0.005i)$ (seconde ligne), et $(\bar{x} = 1, m_r = 1.10 - 0.005i)$ (dernière ligne). Paramètres utilisés pour l'ensemble des simulations : $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $s = 1.18$, $N = 10^6$.

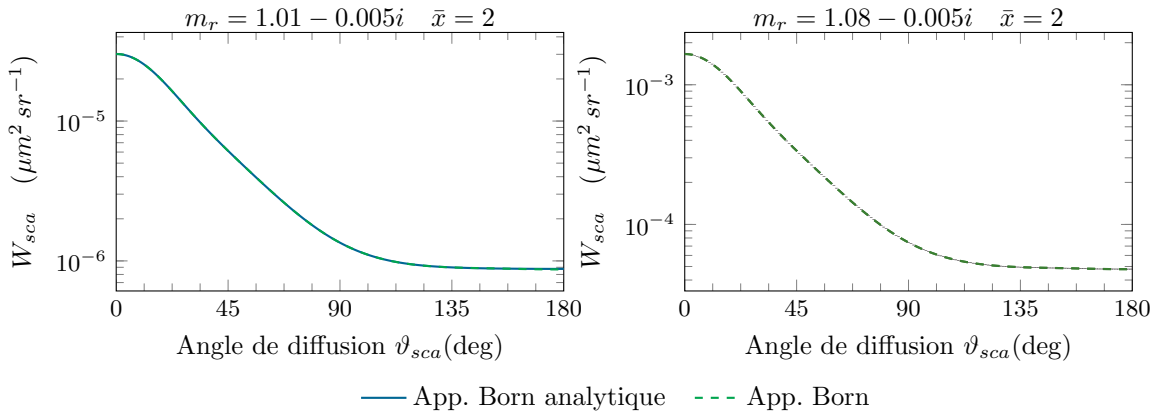



FIGURE V.10 – Section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une suspension de particules cylindriques avec extrémités sphériques de rapport d'élongation $R = 0.2$ fixé (voir Annexe D.1.2 pour sa définition) pour deux indices de réfraction relatifs : $m_r = 1.01 - 0.005i$ (à gauche) et $m_r = 1.08 - 0.005i$ (à droite). Ces tracés tiennent compte des distributions de taille et d'orientation des particules. Paramètres : $\bar{x} = 2$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $s = 1.18$, $N = 10^8$.

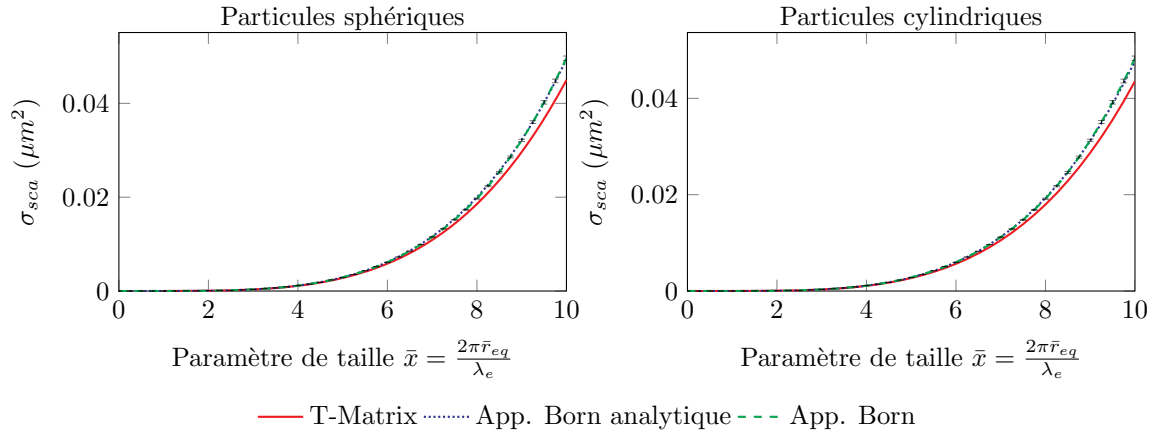



FIGURE V.11 – Section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ en fonction du paramètre de taille $\bar{x}$ pour une suspension de particules sphériques (à gauche) et de particules cylindriques (à droite) de rapport d'élongation $R = 0.837$ fixé. Ces tracés tiennent compte des distributions de taille et d'orientation des particules. Paramètres : $m_r = 1.01 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $s = 1.18$, $N = 10^8$.

### V.3.2 Validation du calcul de sensibilités par les différences finies

Nous avons donné dans Sec. V.1.5 les expressions des fonctions poids permettant de calculer les sensibilités directement par la méthode de Monte Carlo. Comme cela a été fait dans le chapitre précédent (voir Sec. IV.3.1.1), nous proposons de valider ces calculs directs de sensibilités en utilisant une autre méthode : la méthode des différences finies (voir Encart 6 dans Sec. IV.3.1.1). Pour cette validation, nous considérons ici une suspension de micro-organismes photosynthétiques cylindriques de rapport d'élongation

$R = 0.837$ fixé ; on tient également compte des distributions de taille et d'orientation des particules. Figs. V.12, V.13 et V.14 représentent les résultats obtenus pour le calcul des sensibilités (premières) de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport aux indices $n_r$ et $\kappa_r$, et à la longueur d'onde $\lambda_e$. Au regard de ces figures, le calcul direct de sensibilité est validé. De plus, il convient de noter que les barres d'erreurs indiquées sur chacune des figures correspondent à celles obtenues avec l'approche par différences finies. Celles obtenues en calculant directement les sensibilités par la méthode de Monte Carlo sont négligeables devant celles des différences finies. Ceci montre bien l'intérêt de mener systématiquement un calcul de sensibilité directement avec la méthode de Monte Carlo.

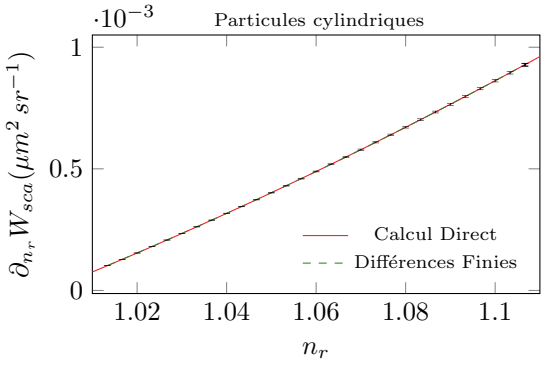



FIGURE V.12 – Sensibilité $\partial_{n_r} W_{sca}$ de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à la partie réelle $n_r$ en fonction de $n_r \in [1.01, 1.1]$ pour une suspension de particules cylindriques de rapport d'élongation $R$ fixé. Paramètres : $\kappa_r = 0.005$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $R = 0.837$, $\vartheta_{sca} = 1°$, $\bar{x} = 1$, $s = 1.18$, $N = 10^7$, $\delta n_r = \frac{1}{300}$.

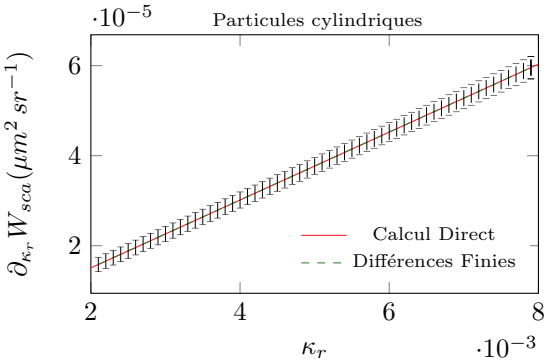



FIGURE V.13 – Sensibilité $\partial_{\kappa_r} W_{sca}$ de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à la partie imaginaire $\kappa_r$ en fonction de $\kappa_r \in [0.002, 0.008]$ de l'indice de réfraction pour une suspension de particules cylindriques de rapport d'élongation $R$ fixé. Paramètres : $n_r = 1.01$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $R = 0.837$, $\vartheta_{sca} = 1°$, $\bar{x} = 1$, $s = 1.18$, $N = 10^7$, $\delta\kappa_r = 10^{-4}$.

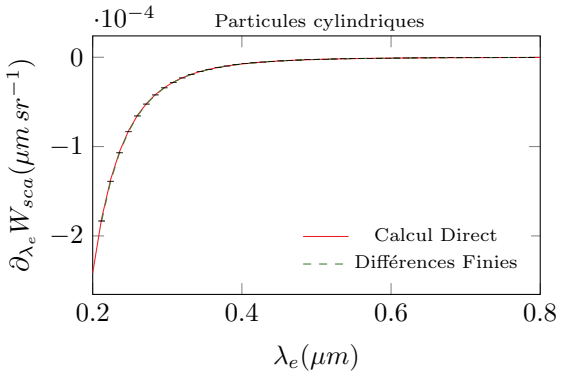



FIGURE V.14 – Sensibilité $\partial_{\lambda_e} W_{sca}$ de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à la longueur $\lambda_e$ en fonction de $\lambda_e \in [0.2, 0.8]\,\mu m$ pour une suspension de particules cylindriques de rapport d'élongation $R$ fixé. Paramètres : $m_r = 1.01 - 0.005i$, $R = 0.837$, $\vartheta_{sca} = 1°$, $\bar{x} = 1$, $s = 1.18$, $N = 10^7$, $\delta\lambda_e = 0.012\,\mu m$.

## V.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons construit les algorithmes de Monte Carlo en réécrivant les formulations intégrales de l'approximation de Born comme des intégrales sur des espaces de chemins. Ainsi, nos algorithmes échantillonnent des chemins. Dans le cadre de l'approximation de Born un chemin est vu comme celui provenant de la source dans la direction d'incidence $\vec{e}_i$, puis passant par une position du volume de la particule et repartant depuis cette position dans la direction d'observation $\vec{e}_s$.

Pour résoudre ces intégrales, nous avons réutilisé ce que nous avions rencontré dans le chapitre précédent concernant les géométries complexes, les distributions statistiques de paramètres (taille, orientation, forme) ainsi que le calcul de sensibilités. Une des nouveautés de ce chapitre a été l'estimation d'une grandeur matricielle de nombres complexes (la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$).

À l'issue de ces travaux, nous disposons d'un algorithme permettant de calculer toutes les grandeurs d'intérêts telles que le champ, la matrice amplitude de diffusion et les propriétés radiatives, ainsi que leurs sensibilités pour n'importe quelle géométrie de particule. Pour les propriétés radiatives, nous tenons également compte des moyennes sur les tailles et les orientations des particules pour un temps de calcul identique à celui pour calculer les grandeurs pour une particule isolée. À noter également que les algorithmes construits dans cette section sont directement utilisables pour résoudre les variantes de l'approximation de Born (Rayleigh-Gans-Debye, Saxon, Shimizu, ...) ; il suffit seulement de modifier l'expression de la fonction poids.

Dans le présent chapitre, bien que les formulations intégrales des grandeurs citées ci-dessus sont valables pour traiter des particules hétérogènes (nous avons fourni les expressions des fonctions poids), nous n'avons pas été jusqu'à la mise en œuvre numérique en hétérogène. Cette dernière ne pose, à priori, aucune difficulté conceptuelle. Il faut seulement être en mesure d'accéder à la valeur de l'indice de réfraction en n'importe quel position au sein de la,particule. C'est donc une question d'accès à la donnée. L'enjeu est ici purement informatique et résonne avec le travail de Méso-Star sur l'orthogonalité entre les données volumiques (ici l'indice de réfraction $m_r$) et les algorithmes.

À l'issue de ce chapitre et du chapitre précédent, nous disposons des approximations de Born et de Schiff qui permettent, à elles deux, de traiter n'importe quelle suspension de particules ténues sur l'ensemble de la gamme de paramètres de taille. Les outils développés répondent immédiatement aux attentes de la communauté des photoprocédés qui ont besoin de connaître avec précision les propriétés radiatives des micro-algues pour l'optimisation des photobioréacteurs.

# CHAPITRE VI

# Développement en série de Born

Dans les chapitres précédents, nous avons montré l'intérêt d'une approche statistique pour la résolution des approximations de Schiff et de Born : traitement des statistiques de particules et calcul de sensibilité sans augmentation des temps de calcul ; calculs en géométrie complexe facilités par les outils de la synthèse d'image. Le présent chapitre est une transition importante dans ce manuscrit, puisque nous attaquons maintenant l'étude d'une solution rigoureuse du problème de diffusion : le développement en série de Born. Tout d'abord, une formulation statistique générale en intégrale de chemins sera établie pour le développement de Born. La particularité de ce travail de formulation par rapport aux chapitres précédents réside dans l'étude d'une série infinie. En pratique, le traitement de cette série par la méthode de Monte Carlo se traduira par des algorithmes récursifs. Comme dans les chapitres précédents, la mise en œuvre pratique des algorithmes nécessite de fixer un choix pour certaines lois d'échantillonnage statistique (lors du travail de formulation statistique, nous serons amenés à introduire des densités de probabilités et des probabilités arbitraires). Ce choix influe uniquement sur la convergence des algorithmes, c'est-à-dire sur la précision numérique obtenue pour un nombre de réalisations donné. Nous proposons dans ce chapitre un premier choix d'échantillonnage statistique qui donne satisfaction pour les petites particules avec de faibles contrastes d'indices, ce qui nous permettra de valider nos algorithmes par comparaison avec des solutions de référence.

## VI.1 Introduction

Dans le chapitre précédent sur l'approximation de Born, le champ électrique à l'intérieur de la particule est approximé par le champ incident. Ce champ interne étant connu, il ne nous restait plus qu'à propager en champ lointain la source qu'il produit au sein de la particule. Ici, nous levons cette approximation. Le champ interne n'est alors plus fixé mais obéit à une équation intégrale de Fredholm qu'il nous faudra résoudre. Pour cela, nous développons une approche statistique originale de ce problème réputé délicat.

L'établissement de l'équation de Fredholm à laquelle obéit le champ interne à partir des équations de Maxwell est largement discuté dans la littérature et a été repris dans le chapitre III (voir Sec. III.5). Elle s'écrit [1] :

$$\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 \; \eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1) + \xi(\vec{r}_0)\vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \tag{VI.1}$$

où $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ est le champ électrique en n'importe quelle position $\vec{r}_0$ appartenant au volume $\mathcal{V}_p$ de la particule, $\bar{\bar{G}}$ est la dyade de Green, $\vec{\mathcal{E}}_{inc}$ est le champ incident et

$$\eta(\vec{r}) = k_e^2(m_r^2(\vec{r}) - 1) \tag{VI.2}$$

$$\xi(\vec{r}) = \frac{3}{2 + m_r^2(\vec{r})} \tag{VI.3}$$

Le terme intégral dans Eq. VI.1 provient d'une réécriture du problème de départ faisant apparaître le propagateur de Green $\bar{\bar{G}}$ en champ libre, c'est-à-dire le propagateur pour un milieu homogène infini ayant pour indice de réfraction celui du milieu extérieur à la particule. L'avantage de cette formulation est que l'expression analytique de $\bar{\bar{G}}$ est connue (voir Eq. III.68), ce qui n'est pas le cas pour le propagateur de notre problème de départ incluant une hétérogénéité complexe de l'indice de réfraction (la géométrie des particules qui nous intéressent est complexe). Mais en contrepartie, cette approche fait apparaître une équation de Fredholm traduisant le fait que le champ $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ est le résultat de la propagation en champ libre des sources produites par le champ $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1)$ lui-même en toutes les positions $\vec{r}_1$ à l'intérieur de la particule. L'implémentation de Eq. VI.1 pour évaluer le champ $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}$ n'est donc pas directe : sans traitement supplémentaire, il faudrait connaître le champ en tout point afin d'évaluer le champ en un point. La résolution d'équations intégrales de Fredholm de seconde espèce par la méthode de Monte Carlo est classique, c'est notamment la méthode de référence pour résoudre l'équation de transport linéaire de Boltzmann (par exemple en neutronique ou en transfert radiatif). Cependant, à notre connaissance, cette piste est ici envisagée pour la première fois en électromagnétisme, pour évaluer le champ $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}$ à partir de Eq. VI.1.

Le terme $\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$ dans Eq. VI.1 est le résultat d'un traitement mathématique usuel de la singularité de la dyade de Green $\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)$ en $\vec{r}_0 = \vec{r}_1$ (voir Chap. III). Ce traitement inclut aussi l'exclusion d'un volume $\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$ centré en $\vec{r}_0 = \vec{r}_1$ dans le terme intégral : le domaine d'intégration n'est pas le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule, mais $\mathcal{V}_p$ privé de $\mathcal{V}_\delta$. L'exposant † signifie que nous négligeons ce petit volume $\mathcal{V}_\delta$ dans l'intégrale, comme dans la plupart des méthodes en volume (DDA, MOM, *etc.*). Eq. VI.1 inclut donc une

1. Nous avons établi dans Sec. III.5.2 l'équation de Fredholm Eq. III.122 à laquelle obéit le champ diffusé. Nous préférons ici travailler sur l'expression du champ total $\vec{\mathcal{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = \vec{\mathcal{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}_0) + \vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$, qui après avoir ajouté $\vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$ à Eq. III.122 puis rassemblé les termes en champ incident s'écrit comme Eq. VI.1.

approximation totalement maîtrisée par la taille du volume exclu qui sera en pratique un paramètre de nos simulations. L'approche retenue pour fixer sa valeur sera présentée dans Sec. VI.4.4. Pour une écriture plus synthétique, nous utiliserons l'opérateur intégral $\bar{\bar{\mathcal{L}}}$

$$\bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\vec{f}\right)(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r})} \eta(\vec{r'})\xi(\vec{r})\,\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r'})\,\vec{f}(\vec{r'})d\vec{r'} \tag{VI.4}$$

qui permet de réécrire l'équation VI.1 comme :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger = \bar{\bar{\mathcal{L}}}\vec{\mathscr{E}}^\dagger + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc} \tag{VI.5}$$

Lorsque l'on résout une équation de Fredholm par la méthode de Monte Carlo, on évalue numériquement une formulation intégrale explicite de la solution (une formulation ne faisant plus intervenir d'intégrale de la solution). Il existe de nombreuses manières d'obtenir une telle formulation. Ici, nous étudions une formulation bien connue dans les contextes de la mécanique quantique et de l'électromagnétisme : le développement en série de Born. Elle est obtenue en redéployant l'équation de Fredholm de départ Eq. VI.5, c'est-à-dire en l'injectant dans elle-même de manière récursive :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathscr{E}}^\dagger &= \bar{\bar{\mathcal{L}}}\vec{\mathscr{E}}^\dagger + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc} \\
&= \bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\bar{\bar{\mathcal{L}}}\vec{\mathscr{E}}^\dagger + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right) + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc} \\
&= \bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\bar{\bar{\mathcal{L}}}\vec{\mathscr{E}}^\dagger + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right) + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right) + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc} \\
&= \cdots \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} \bar{\bar{\mathcal{L}}}^n \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}
\end{aligned} \tag{VI.6}$$

avec $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^0 = \bar{\bar{I}}$. On obtient ainsi une expression explicite du champ interne $\vec{\mathscr{E}}^\dagger$ sous forme d'une série de Neumann. Nous choisissons dans la suite de travailler sur cette série car son comportement est bien connu (de nombreux travaux sont disponibles dans la littérature), ce qui en fait un problème bien posé pour développer notre approche statistique et sa mise en œuvre par la méthode de Monte Carlo. Notamment, une condition nécessaire et suffisante pour que la série de Born soit solution de l'équation de départ est que la norme de l'opérateur $\bar{\bar{\mathcal{L}}}$ soit inférieure à 1, de sorte que le développement converge [Kleinman et al., 1990; Li et al., 2010; Colton and Kress, 2013; Hanson and Yakovlev, 2002]. À notre connaissance, le rayon de convergence de la série de Born fait encore à l'heure actuelle l'objet de travaux de recherche. On trouve dans la littérature différentes expressions pour celui-ci, par exemple : $|m_r^2 - 1|(17x^2/2 + 2\sqrt{74}x + 105) < 1$ [Kilgore et al., 2017]. En

pratique, toutes ces expressions, comme celle donnée en exemple, impliquent que le développement en série de Born est solution de notre problème lorsque les particules sont petites et à faibles contrastes d'indice. Nous nous concentrons dans ce chapitre uniquement sur ces situations pour lesquelles le développement en série de Born Eq. VI.6 est solution du problème de départ Eq. VI.5.

Des recherches sont menées afin de proposer d'autres développements en séries permettant de traiter des particules possédant des indices de réfraction et des paramètres de taille plus élevés [Kleinman et al., 1990; Pankratov et al., 1995; Gao and Torres-Verdín, 2006; Osnabrugge et al., 2016]. Par exemple, l'approche rapportée dans [Kleinman et al., 1990] consiste à introduire un paramètre de relaxation $\alpha$ en écrivant $\vec{\mathscr{E}}^\dagger = \alpha\vec{\mathscr{E}}^\dagger + (1-\alpha)\vec{\mathscr{E}}^\dagger$ puis en utilisant Eq. VI.5 pour réécrire le terme $\alpha\vec{\mathscr{E}}^\dagger$ :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^\dagger &= \alpha\left(\bar{\bar{\mathcal{L}}}\vec{\mathscr{E}}^\dagger + \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right) + (1-\alpha)\vec{\mathscr{E}}^\dagger \\ &= \left(\alpha\bar{\bar{\mathcal{L}}} + (1-\alpha)\bar{\bar{\mathcal{I}}}\right)\vec{\mathscr{E}}^\dagger + \alpha\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\end{aligned} \tag{VI.7}$$

On obtient ainsi une nouvelle équation de Fredholm dont l'opérateur intégral n'est plus $\bar{\bar{\mathcal{L}}}$ mais $\bar{\bar{\mathcal{L}}}_K = \alpha\bar{\bar{\mathcal{L}}} + (1-\alpha)\bar{\bar{\mathcal{I}}}$. Tout l'enjeu de cette approche est de déterminer une valeur de $\alpha$ telle que la norme de $\bar{\bar{\mathcal{L}}}_K$ soit inférieure à 1 (quand cela est possible), de sorte que le redéploiement de Eq. VI.7 donne un développement convergent :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger = \sum_{n=0}^{+\infty}\left(\alpha\bar{\bar{\mathcal{L}}} + (1-\alpha)\bar{\bar{\mathcal{I}}}\right)^n \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc} \tag{VI.8}$$

Indépendamment du rayon de convergence de ces séries, et donc du type de particules qui peut être traité, le point de départ de l'évaluation numérique du champ $\vec{\mathscr{E}}^\dagger$ à partir de ces expressions est le même : il nous faut être en mesure de traiter numériquement une somme infinie de termes faisant intervenir l'opérateur $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^n$ appliqué à $\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}$. La présente étude du développement en série de Born soulèvera des difficultés numériques lors de l'évaluation de ces termes et l'analyse de ces difficultés (qui fait l'objet du chapitre VII) est une première étape nécessaire pour aller, à terme, vers la résolution de développements à rayon de convergence étendus tels que Eq. VI.8.

Dans ce qui va suivre, nous allons d'abord établir dans Sec. VI.2 une formulation statistique en intégrale de chemins pour le développement en série de Born. La traduction de cette formulation intégrale en un algorithme de Monte Carlo sera ensuite étudiée dans Sec. VI.3, ce qui impliquera de faire un choix pour les échantillonnages statistiques lors de sa mise en œuvre numérique dans Sec. VI.4 (choix d'un jeu de probabilités et d'un jeu de fonctions densités de probabilité arbitraires). Les résultats obtenus seront enfin validés et discutés dans Sec. VI.4.4.

## VI.2 Formulation statistique du champ électrique interne

Nous présentons ici la formulation statistique du développement en série de Born qui sera utilisée plus tard pour l'estimation numérique du champ électrique. Tout l'enjeu de ce travail réside dans la formulation du champ interne, ce qui constitue une difficulté significative par rapport au chapitre précédent sur l'approximation de Born, où le champ interne était égal au champ incident. Cela nécessite de traiter :

1. des intégrales de volume sur le domaine $\mathcal{V}_p^n$ où $n$ est l'ordre dans une série infinie,
2. la somme infinie d'intégrales de dimension croissante constituant la série.

Dans Sec. VI.2.1 le point 1. sera traité avec la même approche qu'au chapitre précédent, par introduction d'un jeu de variables aléatoires positions. Nous nous attarderons dans la suite sur le point 2. qui n'a pas encore été abordé dans ce manuscrit.

Nous avons déjà illustré l'intérêt d'une approche statistique pour traiter des intégrales de dimension élevées et nous en bénéficierons ici lors du traitement du point 1. Les même bénéfices sont attendus pour le traitement des sommes ayant un nombre de termes important (point 2.). Cette approche nous permettra notamment d'évaluer la série infinie de Born sans avoir recours à un ordre de troncature. Une approche déterministe de résolution du développement en série de Born consisterait à tronquer la somme à un certain ordre, en fonction de la précision désirée et des paramètres du problème (indice de réfraction, paramètre de taille et géométrie). Nous utilisons dans la suite une approche statistique radicalement différente, consistant à construire la procédure d'échantillonnage d'une variable aléatoire *Ordre du développement*. Numériquement, cela nous permettra de parfaitement maîtriser la précision des simulations, sans avoir à gérer l'impact d'une troncature déterministe (la somme infinie étant exprimée comme une espérance, l'édifice de la méthode de Monte Carlo nous donnera systématiquement accès à l'erreur statistique ; voir Chap. IV). Quant au nombre de réalisations de l'algorithme pour atteindre une précision donnée - la convergence numérique - elle dépendra des lois statistiques choisies dans Sec. VI.4, lors des simulations, pour définir la variable aléatoire *Ordre du développement* et les positions aléatoires (l'optimisation de ces lois fera l'objet du chapitre suivant).

Dans les paragraphes suivants, en nous appuyant sur les notions déjà introduites dans les chapitres précédents, nous utilisons une formulation statistique plus compacte faisant intervenir l'opérateur espérance, mais strictement équivalente aux formulations intégrales détaillées qui ont été utilisées jusqu'à présent. Nous ferons le lien entre ces deux formulations dans Sec. VI.2.5.

### VI.2.1 Reformulation en espérance de l'opérateur intégral de volume

Nous allons ici suivre la même procédure que celle utilisée au chapitre V pour le traitement de l'intégrale sur le volume de la particule. Afin d'écrire les opérateurs intégrales de volume $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^n$ intervenant dans le développement en série de Born comme des espérances mathématiques, nous introduisons un jeu de variables aléatoires positions $\vec{R}_n|(\vec{R}_{n-1}=\vec{r}_{n-1})$, $n\in\mathbb{N}^*$ de domaine de définition $\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{n-1})$ et de densité de probabilité $p_{\vec{R}_n}(\vec{r}_n|\vec{r}_{n-1})$. Du fait du volume d'exclusion, la position aléatoire $\vec{R}_n$ est conditionnée par la valeur $\vec{r}_{n-1}$ prise par la position précédente, via son domaine de définition. Par exemple, la position $\vec{R}_1$ est définie sur le volume $\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$ de la particule privé d'un volume d'exclusion centré en $\vec{r}_0$ : la variable aléatoire $\vec{R}_1$ dépend donc de $\vec{r}_0$. Dans la suite, nous omettrons ces dépendances dans nos notations pour les positions aléatoires, que nous noterons $\vec{R}_n$, et leur densités de probabilité, que nous noterons $p_{\vec{R}_n}(\vec{r}_n)$. Nous travaillons ici en toute généralité ; le choix d'un jeu de densités de probabilité $p_{\vec{R}_n}$ particulier sera présenté dans la section VI.4.2.

Le terme d'ordre 1 dans le développement en série de Born s'écrit (voir définition de $\bar{\bar{\mathcal{L}}}$ dans Eq. VI.4) :

$$\bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0)=\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)}d\vec{r}_1\eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\,\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\,\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) \tag{VI.9}$$

Nous procédons comme dans Sec. IV.1, en multipliant et en divisant l'intégrande dans Eq. VI.9 par $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)$ :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0)&=\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)}d\vec{r}_1\,p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\,\frac{\eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)}\,\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1)\\&=\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)}d\vec{r}_1\,p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\,\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\,\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1)\end{aligned} \tag{VI.10}$$

où, afin d'alléger nos expressions, nous avons introduit :

$$\bar{\bar{A}}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})=\frac{\eta(\vec{r}_{n+1})\xi(\vec{r}_n)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})}{p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})} \tag{VI.11}$$

L'équation VI.10 signifie que $\bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0)$ est l'espérance mathématique de la variable aléatoire $\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\,\xi(\vec{R}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_1)$, calculée sur l'ensemble des valeurs prises par $\vec{R}_1$ :

$$\bar{\bar{\mathcal{L}}}\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0)=\mathbb{E}\left[\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\,\xi(\vec{R}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_1)\right] \tag{VI.12}$$

avec $\mathbb{E}[]$ l'opérateur espérance. On procède de la même manière pour l'opérateur $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^2$ :

$$\begin{aligned}
\bar{\bar{\mathcal{L}}}^2\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0) &= \int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1\eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2\eta(\vec{r}_2)\xi(\vec{r}_1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\xi(\vec{r}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_2)\\
&= \int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1\,p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\,\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2\,p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\,\bar{\bar{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\xi(\vec{r}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_2)\\
&= \int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1\,p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2\,p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\,\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\,\bar{\bar{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\xi(\vec{r}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_2)\\
&= \mathbb{E}\left[\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\,\bar{\bar{A}}(\vec{R}_1,\vec{R}_2)\xi(\vec{R}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_2)\right]
\end{aligned}$$

où la variable aléatoire $\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\,\bar{\bar{A}}(\vec{R}_1,\vec{R}_2)\xi(\vec{R}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_2)$ est fonction des deux positions aléatoires $\vec{R}_1$ et $\vec{R}_2$. À l'ordre $n\geq 1$ on obtient :

$$\bar{\bar{\mathcal{L}}}^n\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0) = \mathbb{E}\left[\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\left[\prod_{k=1}^{n-1}\bar{\bar{A}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})\right]\xi(\vec{R}_n)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_n)\right] \tag{VI.13}$$

où pour $n=1$, $\displaystyle\prod_{k=1}^{n-1}\bar{\bar{A}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})=1$. On rappelle que pour $n=0$, $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^0\left(\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\right)(\vec{r}_0) = \xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$.

### VI.2.2 Espace de chemins

En injectant l'expression de $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^n$ établie au paragraphe précédent (voir Eq. VI.13) dans le développement en série de Born, il vient :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) &= \sum_{n=0}^{+\infty}\bar{\bar{\mathcal{L}}}^n\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc}\\
&= \sum_{n=0}^{+\infty}\mathbb{E}\left[\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\left[\prod_{k=1}^{n-1}\bar{\bar{A}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})\right]\xi(\vec{R}_n)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_n)\right]\\
&= \sum_{n=0}^{+\infty}\mathbb{E}\left[\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|N=n}\right]
\end{aligned} \tag{VI.14}$$

où

$$\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|N=n} = \bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)\left[\prod_{k=1}^{n-1}\bar{\bar{A}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})\right]\xi(\vec{R}_n)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_n) \tag{VI.15}$$

est la contribution au champ électrique $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ d'un chemin $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)$ partant de $\vec{r}_0$ et comportant $n$ positions $\vec{R}_n$ au sein de la particule (voir Fig. VI.1). La variable aléatoire *chemin* $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)$ agrège simplement les positions successives $\vec{r}_0,\vec{R}_1,\cdots,\vec{R}_n$ : $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n) = (\vec{r}_0,\vec{R}_1,\cdots,\vec{R}_n)$. Ainsi, le terme d'ordre $n$ dans le développement de Born s'interprète comme la contribution de l'ensemble des chemins comportant $n$ positions : $\bar{\bar{\mathcal{L}}}^n\xi\vec{\mathscr{E}}_{inc} = \mathbb{E}\left[\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)}\right]$.

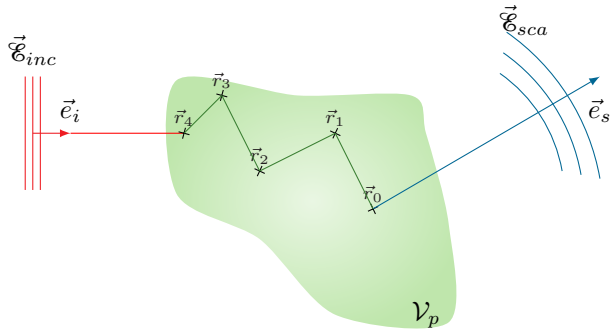



FIGURE VI.1 – Chemin au sein du volume $\mathcal{V}_p$ de la particule. Le chemin tracé depuis la source du champ incident jusqu'à la position $\vec{r}_0$ représente celui correspondant au champ interne. Ce chemin se poursuit dans la direction d'observation $\vec{e}_s$ lorsque l'on s'intéresse au champ diffusé en champ lointain (voir Sec. VI.3.3).

En fonction des paramètres du problème physique, la contribution $\vec{W}$ s'écrit (en utilisant Eqs. VI.11, VI.2 et VI.3) :

$$\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)} = 3k_e^2 \frac{m_r^2(\vec{R}_1)-1}{m_r^2(\vec{r}_0)+2} \frac{\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{R}_1)}{p_{\vec{R}_1}} \left[\prod_{k=1}^{n-1} 3k_e^2 \frac{m_r^2(\vec{R}_{k+1})-1}{m_r^2(\vec{R}_k)+2} \frac{\bar{\bar{G}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})}{p_{\vec{R}_{k+1}}}\right] 3 \frac{\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_n)}{m_r^2(\vec{R}_n)+2} \tag{VI.16}$$

### VI.2.3 Traitement statistique de la somme infinie

Dans Eq. VI.14, nous avons sommé de manière déterministe la contribution des chemins comportant $n = 1, 2, \cdots, +\infty$ positions au sein de la particule. Les chemins $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)$ que nous avons utilisés pour cela sont conditionnés par la variable aléatoire *nombre de positions* $N$, qui correspond aussi à la variable aléatoire *ordre* dans le développement en série de Born. Ici, nous allons introduire une statistique pour $N$ et ainsi définir un espace de chemins plus général, comportant un nombre aléatoire de positions. Le champ électrique résultera de l'ensemble des contributions de ces chemins.

Nous introduisons un jeu de probabilités $\mathcal{P}_n$ tel que $\sum_{n=0}^{+\infty} \mathcal{P}_n = 1$ pour définir la variable aléatoire discrète $N$ qui prend la valeur 0 avec la probabilité $\mathcal{P}_0$, la valeur 1 avec la probabilité $\mathcal{P}_1$,... la valeur $n$ avec la probabilité $\mathcal{P}_n$,... . On peut alors réécrire la somme infinie dans Eq. VI.14 comme une espérance :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \mathcal{P}_n \mathbb{E}\left[\frac{1}{\mathcal{P}_n}\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)}\right] \\
&= \mathbb{E}_N\left[\mathbb{E}\left[\frac{1}{\mathcal{P}_n}\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|N=n}\right]\right] \\
&= \mathbb{E}_N\left[\mathbb{E}\left[\vec{W}'_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)}\right]\right]
\end{aligned}$$

où $\vec{W}'_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)} = \frac{1}{\mathcal{P}_n}\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(N=n)}$. En appliquant le théorème de l'espérance totale $\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}\left[\mathbb{E}[X|Y]\right]$, comme nous l'avons fait dans Sec. IV.1.1.1 pour traiter la prise de moyenne sur les tailles et les orientations, il vient :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = \mathbb{E}\left[\vec{W}'_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)}\right] \tag{VI.17}$$

où $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)$ est la variable chemin, elle comporte un nombre de positions aléatoires, et $\vec{W}'_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)} = \frac{1}{\mathcal{P}_N}\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)}$ est sa contribution au champ électrique.

Pour aider le lecteur à se faire une image pour décrire la variable aléatoire $\vec{W}'_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)}$, nous donnons ci-dessous une expérience statistique menant à l'échantillonnage d'une de ses réalisations (*i.e.* un algorithme de Monte Carlo) :

**Algorithme 24: Développement de Born - Champ interne $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$**

- **Étape 1** : une réalisation $n$ de $N$ est échantillonnée selon le jeu de probabilités $\mathcal{P}_n$.
- **Étape 2** : un chemin $\vec{\gamma}(\vec{r}_0)$ au sein de la particule est échantillonné en générant aléatoirement $n$ positions $\vec{r}_k$ dans $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_k}(\vec{r}_k)$.
- **Étape 3** : la réalisation $\vec{w}'$ de la variable aléatoire poids de Monte Carlo $\vec{W}'_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)}$ est calculée selon (en utilisant Eq. VI.16) :

$$\vec{w}' = \frac{3k_e^2}{\mathcal{P}_n}\frac{m_r^2(\vec{r}_1)-1}{m_r^2(\vec{r}_0)+2}\frac{\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)}\left[\prod_{k=1}^{n-1} 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_{k+1})-1}{m_r^2(\vec{r}_k)+2}\frac{\bar{\bar{G}}(\vec{r}_k,\vec{r}_{k+1})}{p_{\vec{R}_{k+1}}(\vec{r}_{k+1})}\right] 3\frac{\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_n)}{m_r^2(\vec{r}_n)+2} \tag{VI.18}$$

### VI.2.4 Reformulation en somme de contributions le long d'un chemin

Lorsqu'un chemin $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)$ est échantillonné, il est possible de calculer non seulement sa contribution au champ électrique, mais aussi les contributions de tous les chemins partageant les mêmes positions. C'est la stratégie que nous avons retenue pour nos algorithmes de Monte Carlo car elle mène en pratique à une meilleure convergence numérique. Fig. VI.2 représente un exemple dans lequel, à partir de deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ échantillonnées, on somme facilement :

1. la contribution du chemin d'ordre 0 arrivant directement en $\vec{r}_0$ depuis la direction incidente,
2. la contribution du chemin d'ordre 1 arrivant en $\vec{r}_1$ depuis la direction incidente, puis ralliant la position $\vec{r}_0$,

3. la contribution du chemin d'ordre 2 arrivant en $\vec{r}_2$ depuis la direction incidente, ralliant la position $\vec{r}_1$, puis $\vec{r}_0$.

Cette pratique, dans laquelle on somme les contributions de la source incidente en chaque nœud d'un chemin est largement utilisée dans le domaine du transfert radiatif, lorsque l'on souhaite mener un calcul sonde et que les sources sont collimatées (portées par une seule direction), comme ici. Dans le présent contexte, cela revient à sommer les contributions $\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=0)}$, $\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=1)}$, ... jusqu'à $\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=M)}$ le long d'un même chemin $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=M)$ comportant un nombre aléatoire $M$ de positions. $M$ est une variable aléatoire différente de celle de $N$ introduite au paragraphe précédent. Ici, $M$ est la variable *ordre de troncature* du développement en série de Born.

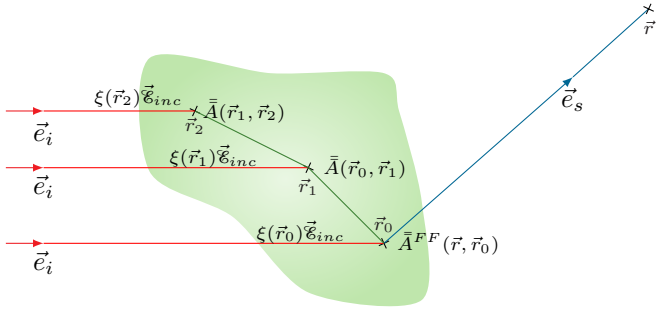



FIGURE VI.2 – Illustration des chemins correspondants au champ diffusé exprimé en champ lointain (voir Sec. VI.3.3). À l'ordre 0, la fonction poids est $\bar{\bar{A}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0)$. À l'ordre 1, il s'écrit $\bar{\bar{A}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1)$. À l'ordre 2, il s'écrit $\bar{\bar{A}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\bar{\bar{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\xi(\vec{r}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_2)$. Et ainsi de suite. La dyade $\bar{\bar{A}}^{FF}$ est donnée par $\bar{\bar{A}}^{FF} = \frac{1}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$. La dyade $\bar{\bar{A}}$ est donnée par Eq. VI.11. À noter que dans le cas du champ interne, le chemin s'arrête en $\vec{r}_0$, donnant ainsi un exemple de réalisation de la variable contribution $\vec{W}$ le long d'un chemin $\vec{\Gamma}$.

En suivant la démonstration présentée dans les paragraphes suivants, cette sommation des contributions le long d'un chemin revient à reformuler le champ électrique comme :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) &= \mathbb{E}\left[\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=0)} + \frac{\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=1)}}{\mathcal{P}_0} + \frac{\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=2)}}{\mathcal{P}_0\mathcal{P}_1} + \cdots + \frac{\vec{W}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)|(n=M)}}{\mathcal{P}_0\mathcal{P}_1\cdots\mathcal{P}_{M-1}}\right] \\ &= \mathbb{E}\left[\sum_{n=0}^{M}\left[\prod_{k=0}^{n-1}\frac{\bar{\bar{A}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})}{\mathcal{P}_k}\right]\xi(\vec{R}_n)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{R}_n)\right] \qquad \text{(VI.19)}\end{aligned}$$

où pour $n=0$, $\prod_{k=0}^{n-1}\frac{\bar{\bar{A}}(\vec{R}_k,\vec{R}_{k+1})}{\mathcal{P}_k} = 1$ et où la variable aléatoire *ordre de troncature* $M$ est définie à partir d'un jeu de variables aléatoires de Bernoulli $B_n$ prenant la valeur 1 avec la probabilité $\mathcal{P}_n$ et 0 avec la probabilité $\mathcal{Q}_n = 1 - \mathcal{P}_n$ :

$$M = \sum_{n=0}^{+\infty} n\, B_n \prod_{q=0}^{n-1}(1 - B_q) \qquad \text{(VI.20)}$$

Bien que nous gardions la même notation, le jeu de probabilités $\mathcal{P}_n$ est ici différent de celui utilisé dans le paragraphe précédent (par exemple, nous n'avons plus $\sum_{n=0}^{+\infty} \mathcal{P}_n = 1$, mais simplement $0 < \mathcal{P}_n < 1, \forall n \in \mathbb{N}$). Afin de décrire la variable aléatoire $M$, nous donnons ci-dessous une expérience statistique menant à son échantillonnage :

**Algorithme 25: Échantillonnage de $M$**

- **Étape 1** : la valeur 0 est affectée à l'indice $n$.
- **Étape 2** : une réalisation $b_n$ de la variable aléatoire de Bernoulli $B_n$ est générée aléatoirement selon la probabilité $\mathcal{P}_n$,
  - **Étape 2.1** : si $b_n = 1$, l'algorithme boucle à l'**étape 2** après avoir incrémenté l'indice $n$.
  - **Étape 2.2** : si $b_n = 0$, la procédure d'échantillonnage s'arrête et l'algorithme va à l'**étape 4**.
- **Étape 4** : la réalisation de $M$ est $m = n$.

Les algorithmes de Monte Carlo pour l'évaluation de $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ à partir de la formulation Eq. VI.19 sont donnés dans Sec. VI.3 et un jeu de probabilités $\mathcal{P}_n$ particulier sera choisi dans Sec. VI.4 lors de la mise en œuvre numérique de ces algorithmes. Le paragraphe suivant propose une redite de ce qui vient d'être fait et inclut une démonstration de Eq. VI.19 basée sur un travail de reformulation intégrale du développement en série de Born.

### VI.2.5 Redite en formulation intégrale

Partons du développement en série de Born écrit sous la forme

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \tag{VI.21}$$

avec $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1)$ défini de manière récursive comme

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_n) = \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} \eta(\vec{r}_{n+1})\xi(\vec{r}_n)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})\cdot\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_{n+1})d\vec{r}_{n+1} + \xi(\vec{r}_n)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_n) \tag{VI.22}$$

L'équivalence entre cette expression et l'équation VI.6 apparaît en injectant Eq. VI.22 dans Eq. VI.21, puis en procédant par itération, on obtient :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = \; & \xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \\ & + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 \, \eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1) \Bigg[ \xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) \\ & + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 \, \eta(\vec{r}_2)\xi(\vec{r}_1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \Bigg[ \xi(\vec{r}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_2) \\ & + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_2)} d\vec{r}_3 \, \eta(\vec{r}_3)\xi(\vec{r}_2)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_2,\vec{r}_3) \Bigg[ \xi(\vec{r}_3)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_3) \\ & + \cdots \Bigg] \Bigg] \Bigg]\end{aligned} \tag{VI.23}$$

En développant cette expression il vient :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = & \xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \\ & + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 \eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) \\ & + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 \eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\eta(\vec{r}_2)\xi(\vec{r}_1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\,\xi(\vec{r}_2)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_2) \\ & + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_2)} d\vec{r}_3 \, \eta(\vec{r}_1)\xi(\vec{r}_0)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\eta(\vec{r}_2)\xi(\vec{r}_1)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \\ & \qquad \times \eta(\vec{r}_3)\xi(\vec{r}_2)\bar{\bar{G}}(\vec{r}_2,\vec{r}_3)\,\xi(\vec{r}_3)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_3) \\ & + \cdots\end{aligned} \tag{VI.24}$$

qui est bien la forme développée de l'équation VI.6. Dans la suite, nous travaillons sur la formulation suivante du développement en série de Born, obtenue en injectant la définition Eq. VI.11 de $\bar{\bar{A}}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})$ dans Eqs. VI.21 et VI.22 :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_n) = \xi(\vec{r}_n)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_n) + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} d\vec{r}_{n+1} p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})\bar{\bar{A}}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1}) \cdot \vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_{n+1}) \tag{VI.25}$$

Afin de traiter la somme infinie dans Eq. VI.25, nous introduisons les probabilités complémentaires $\mathcal{P}_0$ et $1-\mathcal{P}_0$ de sorte que :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) = & (1-\mathcal{P}_0)\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \mathcal{P}_0\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \\ & + \mathcal{P}_0 \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0} \cdot \vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1) \\ = & (1-\mathcal{P}_0)\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) \\ & + \mathcal{P}_0 \left[ \xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0} \cdot \vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_1) \right]\end{aligned}$$

En utilisant le fait que $\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) = 1$ (par définition d'une densité de probabilité), nous pouvons écrire :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_0) = (1-\mathcal{P}_0)\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \mathcal{P}_0 \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \underbrace{\left[\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_1)\right]}_{\vec{\mathcal{I}}_1}$$

Pour reformuler $\vec{\mathcal{I}}_1$, on utilise Eq. VI.25 (en prenant $n=1$) dans laquelle on introduit les probabilités $\mathcal{P}_1$ et $1-\mathcal{P}_1$ comme cela a été fait précédemment :

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{I}}_1 &= \xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_1) \\ &= (1-\mathcal{P}_1+\mathcal{P}_1)\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\Bigg[(1-\mathcal{P}_1)\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) \\ &\quad + \mathcal{P}_1\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) + \mathcal{P}_1\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}{\mathcal{P}_1}\cdot\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_2)\Bigg]\end{aligned}$$

En regroupant les termes en $\mathcal{P}_1$ et $(1-\mathcal{P}_1)$, il vient :

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{I}}_1 = (1-\mathcal{P}_1)&\left[\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1)\right] + \mathcal{P}_1\Bigg[\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \\ &\frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}{\mathcal{P}_1}\cdot\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_2)\Bigg]\end{aligned}$$

En utilisant le fait que $\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) = 1$, l'intégrale $\vec{\mathcal{I}}_1$ s'écrit

$$\begin{aligned}\vec{\mathcal{I}}_1 &= (1-\mathcal{P}_1)\underbrace{\left[\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1)\right]}_{=\vec{w}_1} + \mathcal{P}_1\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) \\ &\quad\times\underbrace{\left[\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\cdot\xi(\vec{r}_1)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) + \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)}{\mathcal{P}_0}\frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}{\mathcal{P}_1}\cdot\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_2)\right]}_{=\vec{\mathcal{I}}_2} \\ &= (1-\mathcal{P}_1)\vec{w}_1 + \mathcal{P}_1\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_1)} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)\vec{\mathcal{I}}_2\end{aligned}$$

En suivant la même démarche, ce résultat est généralisable au calcul de l'intégrale $\vec{\mathcal{I}}_n$ ($n \in \mathbb{N}^*$) et il vient :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_0) = (1-\mathcal{P}_0)\xi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_0) + \mathcal{P}_0\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\vec{\mathcal{I}}_1 \tag{VI.26}$$

avec $\vec{\mathcal{I}}_1$ défini de manière récursive comme

$$\vec{\mathcal{I}}_n = (1-\mathcal{P}_n)\vec{w}_n + \mathcal{P}_n \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} d\vec{r}_{n+1} p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1}) \vec{\mathcal{I}}_{n+1} \qquad \forall n \in \mathbb{N}^* \tag{VI.27}$$

et

$$\vec{w}_n = \sum_{q=0}^{n} \left[ \prod_{k=0}^{q-1} \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k} \right] \xi(\vec{r}_q) \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_q) \tag{VI.28}$$

où pour $q = 0$, $\prod_{k=0}^{q-1} \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k} = 1$. La formulation intégrale du champ électrique $\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_0)$ s'écrit également sous la forme d'une intégrale de chemin :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_0) = \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) \vec{w}_n \tag{VI.29}$$

Cette formulation intégrale est équivalente à Eq. VI.19 ; elle sera traduite en un algorithme de Monte Carlo dans Sec. VI.3.

### VI.2.6 Illustration sur une équation algébrique du traitement de l'équation de Fredholm Eq. VI.1 proposé jusqu'ici

Nous proposons ici d'illustrer ce qui vient d'être fait dans ce chapitre sur l'équation algébrique

$$y = b + a\, y \tag{VI.30}$$

où $y$, $a$ et $b$ sont réels. Cette équation a pour solution $y = \frac{b}{1-a}$. Lorsque $0 < a < 1$, on peut aussi écrire la solution comme une série géométrique, en redéployant Eq. VI.30 :

$$\begin{aligned} y &= b + a\, y \\ &= b + a(b + a\, y) \\ &= b + a(b + a(b + a\, y)) \\ &= \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} a^n\, b \end{aligned} \tag{VI.31}$$

Pour illustration, nous allons ici reformuler statistiquement cette expression de $y$. Une approche déterministe de résolution de Eq. VI.31 consisterait à tronquer la somme à un certain ordre selon la précision souhaitée ainsi que des paramètres du problème ($a$ et $b$ ici ; indice de réfraction, paramètre de taille et géométrie dans le cas du développement en série de Born). Comme précédemment, nous utilisons une approche statistique qui consiste à introduire un jeu de variables aléatoires de Bernoulli $B_n$ prenant la valeur 1 avec la probabilité $\mathcal{P}_n$ et 0 avec la probabilité $\mathcal{Q}_n = 1 - \mathcal{P}_n$. Cela permet de construire la

procédure d'échantillonnage d'une variable aléatoire *Ordre du développement* $N$ telle que $y = \mathbb{E}\left(\sum_{n=0}^{N} \frac{a^n}{\mathcal{P}_0 \times \mathcal{P}_1 \times \cdots \mathcal{P}_n}\, b\right)$, où $\mathbb{E}$ est l'opérateur espérance.

Tout d'abord, on réécrit Eq. VI.31 comme une suite mathématique faisant intervenir le jeu de probabilités $\mathcal{P}_n$. Pour cela, on commence par introduire la probabilité $\mathcal{P}_0 \in ]0,1[$ comme suit :

$$\begin{aligned} y &= b + \sum_{n=1}^{+\infty} a^n\, b \\ &= (1-\mathcal{P}_0)\, b + \mathcal{P}_0\, b + \mathcal{P}_0\, \frac{1}{\mathcal{P}_0} \sum_{n=1}^{+\infty} a^n\, b \\ &= (1-\mathcal{P}_0)\, b + \mathcal{P}_0 \underbrace{\left[ b + \frac{1}{\mathcal{P}_0} \sum_{n=1}^{+\infty} a^n\, b \right]}_{t_1} \\ &= (1-\mathcal{P}_0)\, w_0 + \mathcal{P}_0\, t_1 \end{aligned} \tag{VI.32}$$

où l'on a posé

$$w_0 = b \tag{VI.33}$$

et

$$\begin{aligned} t_1 &= b + \frac{1}{\mathcal{P}_0} \sum_{n=1}^{+\infty} a^n\, b \\ &= b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b + \frac{1}{\mathcal{P}_0} \sum_{n=2}^{+\infty} a^n\, b \end{aligned} \tag{VI.34}$$

Puis, de la même manière, on introduit une probabilité $\mathcal{P}_1$ dans l'expression de $t_1$ :

$$t_1 = (1-\mathcal{P}_1) \left[ b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b \right] + \mathcal{P}_1 \underbrace{\left[ b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b + \frac{1}{\mathcal{P}_0 \mathcal{P}_1} \sum_{n=2}^{+\infty} a^n\, b \right]}_{t_2} \tag{VI.35}$$

$$= (1-\mathcal{P}_1)\, w_1 + \mathcal{P}_1\, t_2 \tag{VI.36}$$

où

$$w_1 = b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b \tag{VI.37}$$

et

$$t_2 = b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b + \frac{1}{\mathcal{P}_0 \mathcal{P}_1} \sum_{n=2}^{+\infty} a^n\, b \tag{VI.38}$$

$$= b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b + \frac{a}{\mathcal{P}_0} \frac{a}{\mathcal{P}_1}\, b + \frac{1}{\mathcal{P}_0 \mathcal{P}_1} \sum_{n=3}^{+\infty} a^n\, b \tag{VI.39}$$

Après introduction de la probabilité $\mathcal{P}_2$, il vient

$$t_2 = (1 - \mathcal{P}_2)\, w_2 + \mathcal{P}_2\, t_3 \tag{VI.40}$$

où

$$w_2 = b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\, b + \frac{a}{\mathcal{P}_0}\frac{a}{\mathcal{P}_1}\, b \tag{VI.41}$$

En procédant ainsi à l'ordre $n$, on obtient la suite

$$t_n = (1 - \mathcal{P}_n)\, w_n + \mathcal{P}_n\, t_{n+1} \tag{VI.42}$$

où

$$w_n = \sum_{q=0}^{n} \left[ \prod_{k=0}^{q-1} \frac{a}{\mathcal{P}_k} \right] b \tag{VI.43}$$

avec lorsque $n = 0$, $\prod_{k=0}^{q-1} \frac{a}{\mathcal{P}_k} = 1$.

Cette suite se reformule statistiquement comme

$$y = \mathbb{E}\left[(1 - B_0)\, w_0 + B_0\, T_1\right] \tag{VI.44}$$

où $\mathbb{E}[]$ est l'opérateur espérance et $T_1$ est une variable aléatoire définie de façon récursive :

$$T_n = (1 - B_n)\, w_n + B_n\, T_{n+1} \tag{VI.45}$$

avec $B_n$ le jeu de variables aléatoires de Bernoulli prenant la valeur 1 avec la probabilité $\mathcal{P}_n$ et 0 avec la probabilité $\mathcal{Q}_n = 1 - \mathcal{P}_n$.

Afin d'illustrer la formulation statistique que nous venons d'établir par une expérience aléatoire, nous donnons l'algorithme de Monte Carlo correspondant à Eq. VI.44 :

**Algorithme 26: Equation algébrique**

- **Étape 1** : la valeur 0 est affectée à l'indice $n$.
- **Étape 2** : une réalisation $b_n$ de la variable aléatoire de Bernoulli $B_n$ est générée aléatoirement selon la probabilité $\mathcal{P}_n$,
  - si $b_n = 1$, l'algorithme va à l'**étape 2** après avoir incrémenté l'indice $n$,
  - si $b_n = 0$, la procédure d'échantillonnage s'arrête et l'algorithme va à l'**étape 3**.
- **Étape 3** : le poids $w_n$ est calculé selon Eq. VI.43.

La formulation statistique Eq. VI.44 peut se réécrire

$$y = \mathbb{E}\left(W_N\right) \tag{VI.46}$$

où la variable aléatoire poids

$$W_N = \sum_{q=0}^{N} \left[ \prod_{k=0}^{q-1} \frac{a}{\mathcal{P}_k} \right] b \tag{VI.47}$$

est définie par la fonction poids Eq. VI.43 appliquée à la variable aléatoire

$$N = \sum_{n=0}^{+\infty} n\, B_n \prod_{q=0}^{n-1} (1 - B_q) \tag{VI.48}$$

Cette dernière formulation est directement visible dans l'algorithme 26 : la procédure d'échantillonnage de l'algorithme revient à générer aléatoirement une réalisation $n$ de la variable aléatoire $N$ en suivant l'algorithme 25, puis à évaluer la fonction poids pour $n$.

## VI.3 Algorithmes de Monte Carlo

Dans cette section, nous allons détailler les algorithmes de Monte Carlo sur les champs électrique interne et diffusé. À l'inverse, nous ne détaillerons pas les algorithmes sur les propriétés radiatives et leurs sensibilités car la démarche à suivre est identique à celle présentée dans les chapitres concernant les approximations de Schiff et de Born.

### VI.3.1 Test de Bernoulli

Les formulations statistiques établies dans la section précédente font intervenir des variables aléatoires de Bernoulli $B$ prenant la valeur 1 avec la probabilité $\mathcal{P}$ et 0 avec la probabilité $1 - \mathcal{P}$. Nous spécifions ici comment nous échantillonnons en pratique ces variables aléatoires : par un test de Bernoulli.

**Algorithme 27: Échantillonnage d'une réalisation $b$ de la variable aléatoire de Bernoulli $B$**

- **Étape 1** : un nombre $u$ est uniformément échantillonné sur $[0, 1]$,
  - **Étape 1.1** : si $u < \mathcal{P}$, alors $b = 0$,
  - **Étape 1.2** : si $u > \mathcal{P}$, alors $b = 1$.

### VI.3.2 Champ électrique interne

L'algorithme de Monte Carlo évaluant le champ interne $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ par implémentation de la formulation statistique Eq. VI.19, ou indifféremment Eq. VI.26, s'énonce :

**Algorithme 28: Développement de Born - Champ interne $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$**

- **Étape 1** : la valeur 0 est affectée à l'indice $n$.
- **Étape 2** : un nombre $u_n$ est uniformément échantillonné sur $[0,1]$,
  - **Étape 2.1** : si $u_n < \mathcal{P}_n$, alors une position $\vec{r}_{n+1}$ est échantillonnée sur $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})$ et l'algorithme boucle à l'**étape 2** après avoir incrémenté l'indice $n$.
  - **Étape 2.2** : si $u_n > \mathcal{P}_n$, alors la génération aléatoire des positions successives est stoppée et l'algorithme va à l'**étape 3**.
- **Étape 3** : le poids de Monte Carlo $\vec{w}_n$, donnée par Eq. VI.28, est calculé.

Cet algorithme évalue rigoureusement la valeur du développement en série de Born, sans avoir besoin de le tronquer. Comme discuté dans la section précédente, il consiste à générer un chemin au sein de la particule. On remarque que le même résultat serait obtenu en échantillonnant d'abord le nombre de positions composant ce chemin (par exemple avec l'algorithme 25) puis en échantillonnant ensuite autant de positions, comme suggéré par la formulation Eq. VI.19. Ici, l'algorithme présenté est la stricte traduction de Eq. VI.26.

### VI.3.3 Champ électrique diffusé en champ lointain

En vue de calculer les propriétés radiatives, on s'intéresse maintenant au champ électrique diffusée $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$ en une position $\vec{r}$ de l'espace située loin de la particule de sorte que l'approximation du champ lointain soit valide (voir Sec. I.2.2). Son expression a été établie au chapitre III (voir Eq. III.99) :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}) = \iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 \tag{VI.49}$$

où $\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ est la dyade de Green exprimée en champ lointain (voir Eq. III.70). Cette intégrale est traitée comme dans le chapitre précédent sur l'approximation de Born, en introduisant une position aléatoire $\vec{R}_0$ de domaine de définition $\mathcal{V}_p$ (le volume de la particule) et de densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$ :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r}) = \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0) \tag{VI.50}$$

où l'algorithme évaluant $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ est donné au paragraphe précédent. En comparaison avec l'algorithme 28, nous avons donc seulement à ajouter un échantillonnage de la position $\vec{R}_0$ en début d'algorithme et à multiplier la fonction poids Eq. VI.28 par le préfacteur

$\frac{1}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) \bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0)$ :

$$\begin{aligned}
\vec{w}_{sca,n} &= \frac{k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) \bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} \vec{w}_n \\
&= \frac{k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) \bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} \sum_{q=0}^{n} \left[ \prod_{k=0}^{q-1} \frac{\bar{\bar{A}}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k} \right] \xi(\vec{r}_q) \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_q) \\
&= \frac{k_e^2 (m_r^2(\vec{r}_0) - 1) \bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} \sum_{q=0}^{n} \left[ \prod_{k=0}^{q-1} 3k_e^2 \frac{m_r^2(\vec{r}_{k+1}) - 1}{m_r^2(\vec{r}_k) + 2} \frac{\bar{\bar{G}}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k+1})}{p_{\vec{R}_{k+1}}(\vec{r}_{k+1}) \mathcal{P}_k} \right] \frac{3\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_q)}{m_r^2(\vec{r}_q) + 2}
\end{aligned} \tag{VI.51}$$

**Algorithme 29: Développement de Born - Champ diffusée $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}(\vec{r})$**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est échantillonnée sur $\mathcal{V}_p$ suivant $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$.
- **Étape 2** : la valeur 0 est affectée à l'indice $n$.
- **Étape 3** : un nombre $u_n$ est uniformément échantillonné sur $[0, 1]$,
  - **Étape 2.1** : si $u_n < \mathcal{P}_n$, alors une position $\vec{r}_{n+1}$ est échantillonnée sur $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})$ et l'algorithme boucle à l'**étape 2** après avoir incrémenté l'indice $n$.
  - **Étape 2.2** : si $u_n > \mathcal{P}_n$, alors la génération aléatoire des positions successives est stoppée et l'algorithme va à l'**étape 4**.
- **Étape 4** : le poids de Monte Carlo $\vec{w}_{sca,n}$, donnée par Eq. VI.51, est calculé.

Le chemin aléatoire $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0)$ qui était échantillonné pour évaluer le champ interne $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}(\vec{r}_0)$ partait toujours de la position $\vec{r}_0$ (voir Fig. VI.2). Ici, nous intégrons le champ interne sur le volume de la particule en échantillonnant le chemin $\vec{\Gamma} = \vec{\Gamma}(\vec{R}_0) = (\vec{R}_0, \vec{R}_1, \cdots, \vec{R}_n)$ dont la position initiale $\vec{R}_0$ est aléatoire. Les chemins partant de $\vec{r}_0$ peuvent être interprétés comme la variable aléatoire $\vec{\Gamma}$ conditionnée par sa première position : $\vec{\Gamma}(\vec{r}_0) = \vec{\Gamma}\,|(\vec{R}_0 = \vec{r}_0)$.

### VI.3.4 Matrice amplitude de diffusion

Comme dans le cas de l'approximation de Born au chapitre précédent (voir aussi Annexe I.2), l'algorithme pour évaluer $\bar{\bar{S}}$ est identique à celui pour évaluer le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}^{\dagger}_{sca}$ (algorithme 29) ; seule la fonction poids est modifiée. Nous donnons dans la suite les étapes clés permettant d'établir la fonction poids $\bar{\bar{w}}_n$ associée au calcul de $\bar{\bar{S}}$.

À partir de l'expression de la fonction poids $\vec{w}_{sca,n}$ (voir Eq. VI.51), on procède comme suit :

1. on remplace dans Eq. VI.51 la dyade de Green en champ lointain par son expression :

$$\vec{w}_{sca,n} = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r}\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] \frac{k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\vec{w}_n \tag{VI.52}$$

2. on injecte dans $\vec{w}_n$ (voir Eq. VI.28) l'expression du champ incident exprimée dans la base incidente $\mathcal{B}_i$ compte tenu de la définition de la matrice $\bar{\bar{S}}$. Ce champ incident est donné par :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{inc}(\vec{r}_k) = e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_k} P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{VI.53}$$

ce qui permet d'écrire :

$$\vec{w}_n = \sum_{q=0}^{n}\left[\prod_{k=0}^{q-1}\frac{\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_k,\vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k}\right]\xi(\vec{r}_q)e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_q}P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc} \tag{VI.54}$$

où pour $q=0$, $\prod_{k=0}^{q-1}\frac{\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_k,\vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k} = 1$.

3. on multiplie l'expression obtenue par :

$$-ire^{ik_e r}\frac{\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}}{\|\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}\|} \tag{VI.55}$$

Ceci permet d'obtenir la fonction poids de la matrice[2] $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ de dimension $3\times 3$ :

$$\bar{\bar{w}}_{\bar{\bar{\mathcal{S}}}} = -ire^{ik_e r}\frac{\vec{w}_{sca,n}\cdot\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}}{\|\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}\|} \tag{VI.56}$$

avec $\vec{w}_{sca,n}$ donnée par Eqs. VI.52 et VI.54.

4. on obtient la fonction poids de la matrice $\bar{\bar{S}}$ en prenant la sous-matrice obtenue en supprimant la première ligne et la première colonne de la matrice $\bar{\bar{w}}_{\bar{\bar{\mathcal{S}}}}$ :

$$\bar{\bar{w}}_n = \left\{\bar{\bar{w}}_{\bar{\bar{\mathcal{S}}}}\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{VI.57}$$

ce qui s'écrit de manière plus explicite :

$$\bar{\bar{w}}_n = \left\{\frac{\tau(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\sum_{q=0}^{n}\prod_{k=0}^{q-1}\left[\frac{\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_k,\vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k}\right]e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_q}\xi(\vec{r}_q)P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{VI.58}$$

où l'on a posé

$$\tau(\vec{r}_0) = -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \tag{VI.59}$$

Pour $n=0$, on pose $\prod_{k=0}^{q-1}\left[\frac{\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_k,\vec{r}_{k+1})}{\mathcal{P}_k}\right] = 1$.

2. Pour des raisons de commodités d'écriture, nous introduisons, comme dans Sec. III.5.3, la matrice $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ qui est une matrice $3\times 3$ reliant le champ diffusé exprimé dans la base $\mathcal{B}_s$ et le champ incident exprimé dans la base $\mathcal{B}_i$ :

$$\vec{\mathscr{E}}^{\dagger,\mathcal{B}_s}_{sca}(\vec{r}) = \frac{e^{-ik_e r}}{-ir}\bar{\bar{\mathcal{S}}}\vec{\mathscr{E}}^{\mathcal{B}_i}_{0,inc}$$

La matrice amplitude de diffusion correspond à la sous-matrice de $\bar{\bar{\mathcal{S}}}$ obtenue en supprimant la première ligne et la première colonne.

La matrice $\bar{\bar{S}}$ est évaluée par l'algorithme 29, dans lequel on calcule le poids avec Eq. VI.58 à l'étape 4.

### VI.3.5 Propriétés radiatives

Les propriétés radiatives sont directement obtenues à partir de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ dont nous venons de discuter et des expressions données dans Sec. III.5.4. En suivant la même démarche que présentée dans les deux chapitres précédents, il n'y a aucune difficulté à obtenir les formulations intégrales et les algorithmes correspondant aux sections efficaces $(\sigma_{sca}, \sigma_{ext}, \sigma_{abs})$ et à la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ (ce travail est reporté en Annexe I.3). Notamment, pour $W_{sca}$ (et $\sigma_{sca}$), la gestion de la non-linéarité quadratique (voir notamment Sec. IV.1.3) conduit à échantillonner deux chemins $\vec{\Gamma}$ de la même façon que nous avions échantillonné deux chemins dans le cadre de l'approximation de Born (voir Sec. V.1.3).

### VI.3.6 Calcul systématique de sensibilités

Comme nous l'avons déjà mentionné dans les chapitres concernant l'approximation de Schiff (voir Sec. IV.1.6) et l'approximation de Born (voir Sec. V.1.5), à chaque fois que l'on calcule une grandeur, on calcule simultanément ses sensibilités. On rappelle qu'un calcul de sensibilités fournit des informations intéressantes pour optimiser un procédé ou pour propager l'incertitude d'un paramètre sur la grandeur. En suivant la même démarche que dans Secs. IV.1.6 et V.1.5, nous donnons en Annexe I.4 les expressions des fonctions poids des sensibilités de la matrice amplitude de diffusion et des propriétés radiatives par rapport aux indices $n_r$ et $\kappa_r$ ainsi qu'à la longueur d'onde $\lambda_e$.

### VI.3.7 Conclusion

Nous venons de concevoir des algorithmes de Monte Carlo originaux évaluant le champ électrique interne, le champ diffusé, la matrice amplitude de diffusion et les propriétés radiatives. Comme dans les chapitres concernant les approximations de Schiff (voir Chap. IV) et de Born (voir Chap. V), notre approche statistique bénéficie automatiquement des avantages de la méthode de Monte Carlo lors de l'étape d'implémentation : traitements directs des géométries complexes, calcul systématique de sensibilités et prise en compte de distributions statistiques de paramètres (taille, orientation, forme) sans augmentation significative du temps de calcul. Les résultats méthodologiques présentés dans ces chapitres s'appliquent de manière directe ici et nous ne reviendrons pas en détail sur la mise en œuvre. Notamment, dans la section suivante nous utilisons en pratique un seul algorithme évaluant simultanément toutes les grandeurs d'intérêt et leurs sensibilités,

comme cela a été illustré sur l'approximation de Schiff (voir Sec. IV.1.7) et utilisé dans le logiciel StarSchiff pour atteindre des temps de calcul remarquablement bas. À noter aussi que la distribution statistique de la forme des particules est simplement prise en compte par ajout d'une étape d'échantillonnage supplémentaire en début d'algorithme (comme dans Sec. IV.1.1.1, paragraphe intitulé "Ensemble de particules incluant une distribution de forme."), la mise œuvre numérique de cet échantillonnage des formes bénéficiant du récent travail d'optimisation [Weitz et al., 2016] mené en collaboration avec S. Weitz dans le cadre de cette thèse (voir Sec. IV.2.2).

## VI.4 Un premier choix pour les lois d'échantillonnages statistiques

### VI.4.1 Introduction

Dans cette section, il s'agit de mettre en œuvre numériquement les algorithmes précédemment construits. Pour cela, il nous faut choisir les lois d'échantillonnage statistiques utilisées dans nos simulations pour les positions et l'ordre du développement (ces lois étaient restées arbitraires dans le travail général de description statistique menée jusqu'à présent). Ces lois influent uniquement sur la convergence numérique des simulations (c'est-à-dire sur le nombre de réalisations nécessaires pour atteindre une précision donnée). Notre approche sera donc autant que possible pilotée par la dépendance de la fonction poids à la position et à l'ordre du développement, afin d'essayer de limiter l'écart-type des poids générés aléatoirement. Ce premier choix permettra de valider nos algorithmes (qui sont détaillés en Annexe I), mais il s'avérera insatisfaisant pour une résolution efficace du développement en série de Born dès lors que la taille des particules augmente. L'optimisation de ces lois de tirages à partir du principe de zéro-variance fera l'objet du prochain chapitre.

### VI.4.2 Densités de probabilité des variables aléatoires position

La première position aléatoire $\vec{R}_0$ est échantillonnée de manière uniforme sur le volume $\mathcal{V}_p$, comme au chapitre précédent : $p_{\vec{R}_0} = \frac{1}{V_p}$. Pour cette première position, nous n'avons pas besoin d'exclure une région $\mathcal{V}_\delta$. Puis, nous aurons à échantillonner successivement les positions aléatoires suivantes $\vec{R}_1$, $\vec{R}_2$, ... jusqu'à l'ordre du développement souhaité, formant ainsi un chemin au sein de la particule. Afin d'échantillonner un tel chemin, il nous faut générer les positions $\vec{r}_k$ dans le domaine $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$, c'est-à-dire dans le volume de la particule privé du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ centré autour de la position $\vec{r}_{k-1}$

(bien que nous l'ayons omis dans nos notations, la variable aléatoire $\vec{R}_k$ est conditionnée par la valeur prise par $\vec{R}_{k-1}$ : $\vec{R}_k \equiv \vec{R}_k|(\vec{R}_{k-1} = \vec{r}_{k-1})$). Nous avons choisi un volume d'exclusion sphérique centré en $\vec{r}_{k-1}$.

Pour générer la position $\vec{r}_k$, nous faisons le choix d'échantillonner le vecteur aléatoire $\vec{R}_k - \vec{r}_{k-1} = P_k\ \vec{\Omega}_k$ entre deux positions successives : une réalisation $\vec{\omega}_k$ de la direction aléatoire $\vec{\Omega}_k$ est échantillonnée, puis une réalisation $\rho_k$ de la distance aléatoire $P_k$ est échantillonnée et enfin, la position $\vec{r}_k$ est donnée par (voir Fig. VI.3) :

$$\vec{r}_k = \vec{r}_{k-1} + \rho_k\ \vec{\omega}_k \tag{VI.60}$$

où $\rho_k = ||\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}||$ et $\vec{\omega}_k = \frac{\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}}{||\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}||}$ est un vecteur unitaire. Il y a deux raisons à ce choix :

1. Gestion du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$. Le volume $\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$ étant une sphère de rayon $\delta$ centrée en $\vec{r}_{k-1}$, il suffira de restreindre le domaine de définition de $P_k$ aux valeurs $\rho_k > \delta$ pour exclure simplement $\mathcal{V}_\delta$ du domaine d'intégration (voir Fig. VI.3).
2. Dyade de Green. La dyade de Green dans nos poids est uniquement fonction de la distance $\rho_k$ entre les positions successives : $\bar{\bar{G}}(\vec{r}_k, \vec{r}_{k-1}) \equiv \bar{\bar{G}}(\rho_k)$. De plus, en procédant au changement de variable Eq. VI.60, nous faisons apparaître l'élément de volume : $d\vec{r}_k = \rho_k^2\, d\rho_k\, d\vec{\omega}_k$, où $d\vec{\omega}_k$ est l'élément d'angle solide autour de $\vec{\omega}_k$. Nous pouvons tirer avantage du terme $\rho_k^2$ dans cet élément de volume, afin de compenser le terme en $\frac{1}{\rho_k^2}$ dans la dyade de Green (voir Eq. III.68).

Formellement, ce changement de variable s'écrit :

$$\int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{n-1})} d\vec{r}_n p_{\vec{R}_k}(\vec{r}_k) \equiv \int_{4\pi} d\vec{\omega}_k p_{\vec{\Omega}_k}(\vec{\omega}_k) \int_\delta^{\rho_{max}(\vec{\omega}_k)} d\rho_k p_{P_k}(\rho_k) \rho_k^2 \tag{VI.61}$$

où

- $4\pi$ est l'angle solide total,
- $p_{\vec{\Omega}_k}(\vec{\omega}_k)$ est la densité de probabilité de la direction aléatoire $\vec{\Omega}_k$ entre deux positions successives,
- $\rho_{max}(\vec{\omega}_k)$ est la distance entre la position $\vec{r}_{k-1}$ et la frontière de la particule $\partial\mathcal{V}_p$ dans la direction $\vec{\omega}_k$ (voir Fig. VI.3) ; $\rho_{max}(\vec{\omega}_k)$ est obtenu à l'aide des outils de la synthèse d'image présentés dans Sec. V.2.1,
- $p_{P_k}(\rho_k)$ est la densité de probabilité de la distance aléatoire $P_k$ entre deux positions successives (celle-ci est comprise entre $\delta$ et $\rho_{max}(\vec{\omega}_k)$).

Il ne reste plus qu'à choisir les fonctions densités de probabilité $p_{\vec{\Omega}_k}(\vec{\omega}_k)$ et $p_{P_k}(\rho_k)$. Nous proposons ici un premier choix sur lequel nous reviendrons dans le chapitre suivant

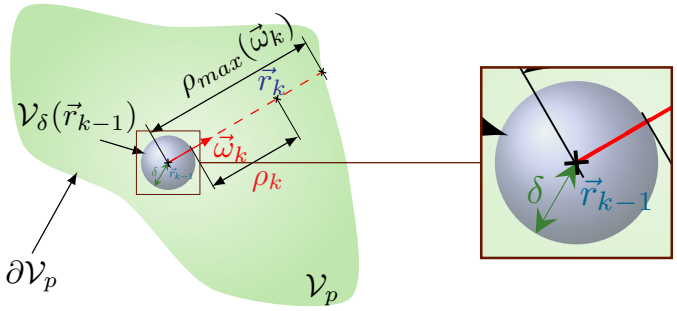



FIGURE VI.3 – Illustration de l'échantillonnage d'une position dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule privé du volume sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ représentant le volume exclu autour de la singularité (ici la position $\vec{r}_{k-1}$). $\rho_{max}(\vec{\omega}_k)$ correspond à la distance à la frontière $\partial\mathcal{V}_p$ de la particule dans la direction $\vec{\omega}_k$ depuis la position $\vec{r}_{k-1}$. $\rho_k$ est la distance échantillonnée entre $\delta$ et $\rho_{max}(\vec{\omega}_k)$. Le couple $\vec{w}_k$ et $\rho_k$ permet alors de déterminer une position $\vec{r}_k$.

afin de réduire les difficultés de convergence que nous observerons à la section VI.4.4. D'une part, nous choisissons d'échantillonner de façon isotrope une direction $\vec{\omega}_k$ :

$$p_{\Omega_k}(\vec{\omega}_k) = \frac{1}{4\pi} \tag{VI.62}$$

D'autre part, nous choisissons d'échantillonner de façon uniforme la distance $\rho_k$ :

$$p_{P_k}(\rho_k) = \frac{1}{\rho_{max}(\vec{\omega}_k) - \delta} \tag{VI.63}$$

À noter que, nous aurions pu également générer une distance $\rho_k$ en tenant compte du terme en $\rho_k^2$ présent dans l'élément de volume. Autrement dit, nous aurions pu échantillonner la position $\vec{r}_k$ uniformément dans le volume de la particule en utilisant la fonction densité de probabilité suivante [3] :

$$p_{P_k}(\rho_k) = \frac{3\rho_k^2}{\rho_{max}^3(\vec{\omega}_k) - \delta^3} \tag{VI.64}$$

Nous ne faisons pas ce choix ici car nous préférons conserver le terme en $\rho_k^2$ qui se simplifie avec une partie du dénominateur de la dyade de Green. Par contre, ce terme en $\rho_k^2$ doit bien sur être prise en compte dans les expressions des fonctions poids établies dans Sec. VI.3. Plus précisément, nous prendrons (voir Eq. VI.61)

$$p_{\vec{R}_k}(\vec{r}_k) = p_{\vec{\Omega}_k}(\vec{\omega}_k)\, p_{P_k}(\rho_k)\, \rho_k^2 = \frac{\rho_k^2}{4\pi\left(\rho_{max}(\vec{\omega}_k) - \delta\right)} \tag{VI.65}$$

dans l'expression Eq. VI.11 de $\bar{\bar{A}}$ qui intervient dans les fonctions poids.

La procédure d'échantillonnage d'une position $\vec{r}_k$ dans $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$ s'énonce :

3. La constante $\frac{3}{\rho_{max}^3(\vec{\omega}_k)-\delta^3}$ provient de la normalisation de la densité de probabilité.

**Algorithme 30: Échantillonnage d'une position $\vec{r}_n$ dans $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$**

- **Étape 1** : une direction $\vec{\omega}_k$ est échantillonnée de manière isotrope sur $4\pi$.
- **Étape 2** : une distance $\rho_n$ est uniformément échantillonnée sur $[\delta, \rho_{\max}(\vec{\omega}_k)]$.

### VI.4.3 Jeu de probabilités pour les ordres du développement

Nous allons spécifier ici les choix concernant les probabilités $\mathcal{P}_n$ que nous avons introduites dans Sec. VI.3 lors de la conception de nos algorithmes. On rappelle que l'introduction de ces probabilités permet, de façon tout à fait rigoureuse, de traiter la récursivité sans aucun impact sur la valeur de la grandeur que l'on cherche à estimer.

Nous nous plaçons ici dans le cas de particules homogènes. Cela nous permet de faire sortir les termes en $m_r$ de l'intégrale du champ électrique (voir Eq. VI.1) qui est alors donnée par :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_0) = 3k_e^2 \frac{m_r^2 - 1}{m_r^2 + 2} \iint\!\!\!\iint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \cdot \vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 + \frac{3}{2 + m_r^2} \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}_1) \tag{VI.66}$$

En injectant cette expression dans elle même, on peut écrire, en utilisant la notation en opérateur (comme nous l'avions fait dans Sec. VI.1) :

$$\vec{\mathscr{E}}^\dagger = \sum_{n=0}^{+\infty} \left[ \frac{m_r^2 - 1}{m_r^2 + 2} \right]^n \mathring{\bar{\bar{\mathcal{L}}}}^n \xi \vec{\mathscr{E}}_{inc} \tag{VI.67}$$

où l'opérateur $\mathring{\bar{\bar{\mathcal{L}}}}$ est défini tel que $\bar{\bar{\mathcal{L}}} = \left[ \frac{m_r^2-1}{m_r^2+2} \right] \mathring{\bar{\bar{\mathcal{L}}}}$. Toutefois, $\frac{m_r^2-1}{m_r^2+2}$ étant une grandeur complexe, nous ne pouvons pas prendre directement celle-ci comme probabilité $\mathcal{P}$ (qui doit être réelle). Par contre, au regard de la forme de $\frac{m_r^2-1}{m_r^2+2}$, nous choisissons de prendre :

$$\mathcal{P} = \frac{n_r^2 - 1}{n_r^2 + 2} \tag{VI.68}$$

Dans ce cas, nous avons bien une probabilité $\mathcal{P}$ réelle et comprise entre 0 et 1. Ici, plus l'indice $n_r$ sera petit, moins il y aura de chance d'aller explorer les termes d'ordre supérieur du développement en série de Born. À l'inverse, plus $n_r$ sera grand, plus il sera nécessaire d'aller explorer en profondeur le développement. À noter également que si les particules sont non-absorbantes, alors cette probabilité permet de simplifier la fonction poids (voir Eq. VI.28 après avoir remplacé le terme $\bar{\bar{A}}$ par son expression donnée par Eq. VI.11).

### VI.4.4 Résultats

Nous présentons ici les résultats numériques obtenus avec un algorithme de Monte Carlo utilisant les lois d'échantillonnages statistiques précédemment choisies. Cela nous

permettra notamment de valider nos résultats par comparaison avec des solutions de référence pour la sphère et le cylindre. Avant cela, le paragraphe suivant présente la démarche utilisée pour fixer la taille du volume d'exclusion dans nos simulations (la lecture de ce paragraphe n'est pas nécessaire à la compréhension des résultats de la section VI.4.4.2).

### VI.4.4.1 Influence de la taille du volume d'exclusion

La valeur du rayon $\delta$ du volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ utilisée dans une simulation résulte d'un compromis entre précision et difficultés numériques dues à la singularité de la dyade de Green. Le volume d'exclusion consiste en effet à négliger la contribution d'une petite partie $\mathcal{V}_\delta$ de la particule, située autour de la singularité. Cette contribution est couramment négligée dans les méthodes de résolution en volume car d'une part, elle tend rapidement vers zéro lorsque $\delta \to 0$ et d'autre part sa valeur, très faible, est extrêmement délicate à évaluer numériquement. En pratique, il est donc possible de trouver une valeur de $\delta$ telle que cette approximation produise une erreur négligeable, tout en contournant la difficulté numérique de la singularité. Nous présentons ici la valeur utilisée dans les simulations de ce chapitre.

Comme mentionné dans Sec. III.5.2, un critère donné dans la littérature pour fixer la valeur de $\delta$ est [Yaghjian, 1980] :

$$\delta \lesssim \frac{\lambda_e}{4\pi} \tag{VI.69}$$

où $\lambda_e$ est la longueur d'onde incidente. Toutefois, lorsque la taille $r_{eq}$ de la particule est plus petite que la longueur d'onde (autrement dit pour des paramètres de taille $x$ inférieurs à $2\pi \simeq 6$), le critère précédent s'avèrera optimiste. Par exemple, si l'on considère une sphère de rayon $r_{eq} = 0.08\,\mu m$ soumise à un rayonnement incident de longueur d'onde $\lambda_e = 0.5\,\mu m$ ($x \approx 1$), alors le critère précédent suggère de prendre un rayon de volume exclu maximal de l'ordre de $0.04\,\mu m$, soit la moitié du rayon de la particule, ce qui reste trop grand. Si maintenant (toujours avec $\lambda_e = 0.5\,\mu m$) on considère une sphère de rayon $r_{eq} = 0.008$ ($x \approx 0.1$), alors le volume exclu maximal devient plus grand que la particule. Nous proposons alors d'introduire un critère supplémentaire pour éviter à minima cette dernière situation. Ce critère fait intervenir la taille de la particule et est donné par :

$$\delta \lesssim r_{eq} \tag{VI.70}$$

Pour les petites tailles de particules, c'est-à-dire $r_{eq} < \lambda_e$ (soit $x < 2\pi \approx 6$), nous considérons que les deux critères Eqs. VI.69 et VI.70 doivent être vérifiés.

Nous allons maintenant déterminer de manière empirique, sur des simulations, à quel point le rayon $\delta$ du volume exclu doit être petit devant le rayon $r_{eq}$ de la particule. Pour cela, nous nous intéressons au rapport $\Delta$ entre les deux rayons :

$$\Delta = \frac{r_{eq}}{\delta} \Leftrightarrow \delta = \frac{r_{eq}}{\Delta} \tag{VI.71}$$

La valeur de $\Delta$ est maintenant ajustée afin de trouver un bon compromis entre précision et difficultés numériques.

Fig. VI.4 montre la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ calculée à l'aide du développement de Born résolu par la méthode de Monte Carlo pour trois rayons $\delta$ du volume d'exclusion (*i.e.* trois paramètres $\Delta$) différents. Lorsque $\Delta = 20$, les résultats obtenus ne se superposent pas avec la courbe de référence fournie par T-Matrix. Cela nous indique que le volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ n'est pas suffisamment petit. À l'inverse, lorsque $\Delta = 50$ (le rayon $\delta$ du volume d'exclusion est divisé par 2.5 par rapport à celui où $\Delta = 20$), les résultats se rapprochent de la référence mais nous observons des difficultés numériques puisque l'on se rapproche davantage de la singularité (la barre d'erreur devient plus importante). Dans ce cas, il est nécessaire de faire un plus grand nombre de réalisations de l'algorithme de Monte Carlo pour améliorer la précision du résultat et réduire sa barre d'erreur comme le montre Fig. VI.5, au détriment d'un temps de calcul plus élevé. Un bon compromis nous semble être obtenu lorsque $\Delta = 35$ puisque les résultats obtenus se superposent plutôt bien avec la référence T-Matrix avec un écart type associé assez correcte. Nous utiliserons cette valeur pour les simulations présentées dans la section suivante. Ainsi le rayon du volume exclu est 35 fois plus petit que le rayon équivalent de la sphère en volume de la particule considérée. Outre le fait qu'il vérifie le critère $\delta \lesssim r_{eq}$, il vérifie également le critère de Yaghjian (voir Eq. VI.69).

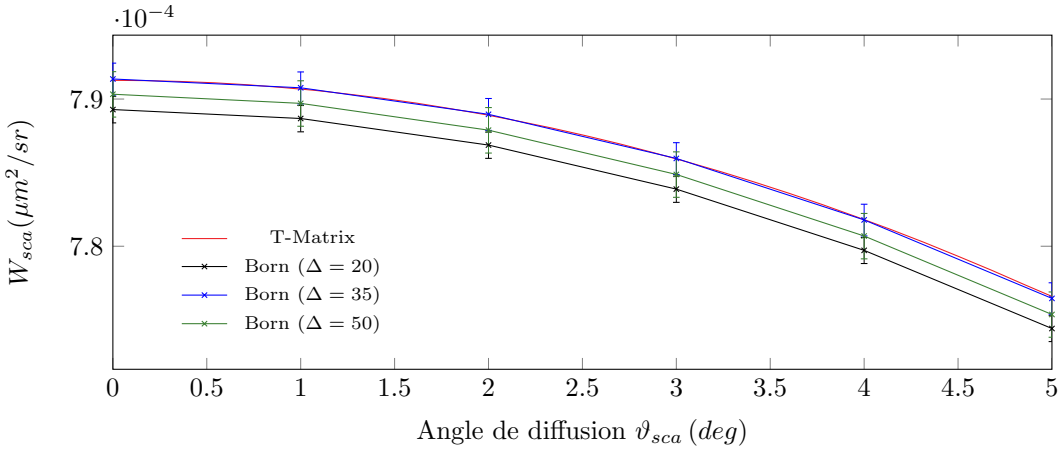



FIGURE VI.4 – Influence du rayon $\delta$ du volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$. Trois paramètres $\Delta$ sont considérés ($\Delta = 20, \Delta = 35$ et $\Delta = 50$) permettant de définir trois rayons $\delta$ de volume d'exclusion (voir Eq. VI.71). La particule considérée est un cylindre avec les paramètres suivants : $\bar{x} = 2$, $m_r = 1.05 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.56\,\mu m$, $R = 0.363$, $N = 10^6$.

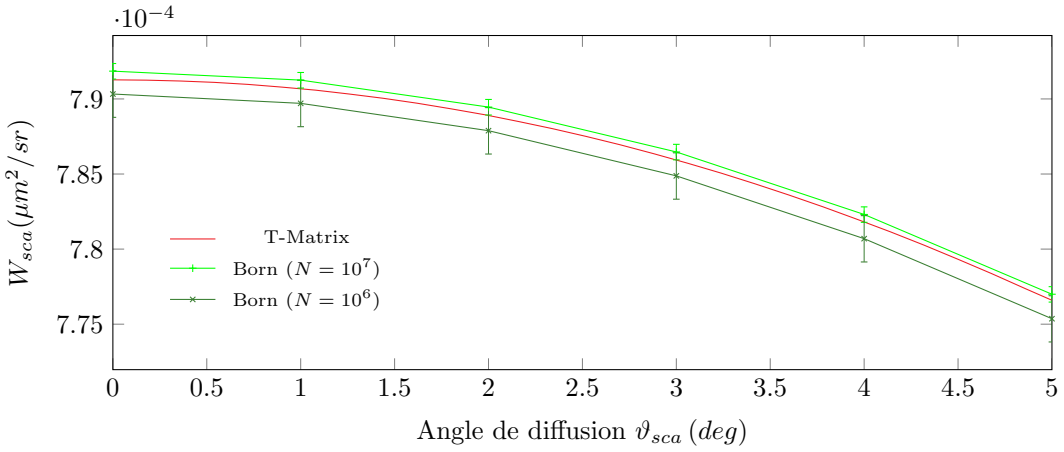



FIGURE VI.5 – Influence du nombre de réalisations $N$ de l'algorithme de Monte Carlo sur le rayon $\delta$ du volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$. La particule considérée est un cylindre avec les paramètres suivants : $\bar{x} = 2$, $m_r = 1.05 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.56\,\mu m$, $R = 0.363$, $\Delta = 50$.

### VI.4.4.2 Validations sur des particules sphériques et cylindriques

Dans cette section, nous proposons une validation de nos algorithmes de Monte Carlo résolvant le développement en série de Born. Nous considérons une suspension de particules homogènes, homothétiques et distribuées selon une loi log-normal (voir Eq. IV.160). Les paramètres pour les simulations ont été choisis de sorte que nous soyons toujours dans le rayon de convergence du développement en série de Born (le développement est ici solution de l'équation de Fredholm de départ). Les résultats obtenus sont comparés à partir de ceux de référence fournis par le code T-Matrix disponible en ligne à l'adresse suivante : www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko [Mishchenko et al., 2002]. Fig. VI.6 montre les sections efficaces de diffusion $\sigma_{sca}$ et d'extinction $\sigma_{ext}$ en fonction du paramètre de taille $\bar{x}$ pour une suspension de particules cylindriques. Figs. VI.7 et VI.8 représentent la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ (première colonne) et en fonction du paramètre de taille $\bar{x}$ (seconde colonne) pour respectivement une suspension de particules sphéroïdales et cylindriques. Pour les trois figures, nous tenons compte des distributions de taille (loi log-normale) et d'orientation. Sur ces courbes, on constate que les résultats obtenus avec notre code de Monte Carlo résolvant le développement en série de Born sont en accord avec ceux de références fournis par T-Matrix. Ils sont également plus précis que les résultats obtenus à partir de notre code de Monte Carlo résolvant l'approximation de Born (voir Chap. V) que nous avons ajouté sur les figures concernant $W_{sca}$ (voir Figs. VI.7 et VI.8).

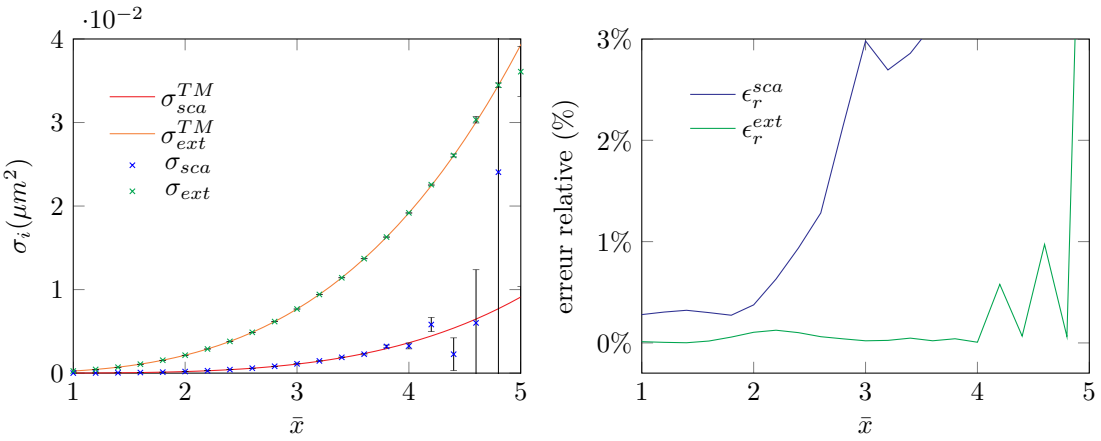



FIGURE VI.6 – Sections efficaces de diffusion $\sigma_{sca}$ et d'extinction $\sigma_{ext}$ d'une suspension de particules cylindriques homothétiques et homogènes en fonction du paramètre de taille $\bar{x} = k_e \bar{r}_{eq}$. Les distributions de taille (loi log-normale) et d'orientation des particules sont prises en compte. Comparaison des résultats obtenus entre notre code de Monte Carlo résolvant le développement en série de Born et un code de référence T-Matrix. Le graphique de droite fournit les erreurs relatives. Paramètres : $m_r = 1.02 - 0.005i$, $R = 0.7$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $s = 1.18$, $\delta = \frac{r_{eq}}{35}$, $N = 10^6$.

Toutefois, comme nous pouvons le constater sur Figs. VI.6, VI.7 et VI.8, des difficultés de convergence apparaissent dès lors que le paramètre de taille augmente. Graphiquement, cela se traduit par des barres d'erreurs importantes sur le résultat estimé. Ces problèmes de variances peuvent être diminués en utilisant le principe de zéro-variance qui fait l'objet du prochain chapitre.

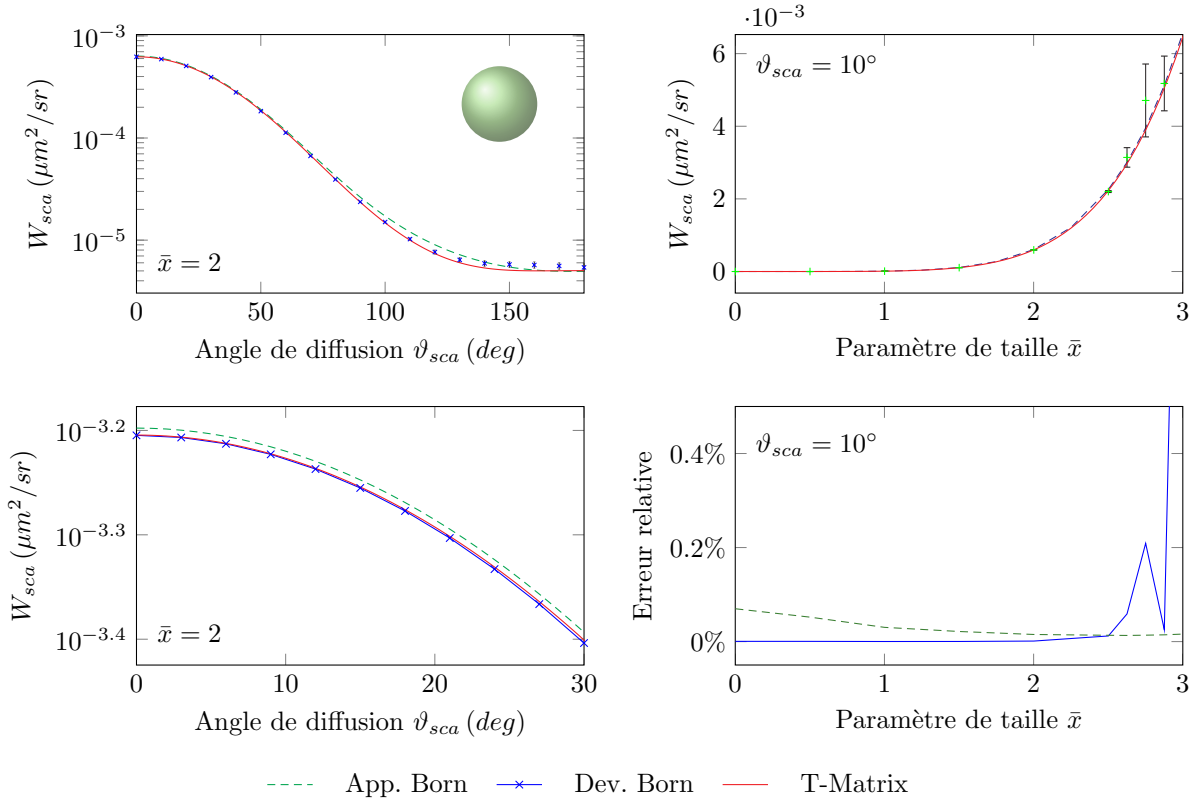



FIGURE VI.7 – Section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ d'une suspension de particules sphériques en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ (colonne de gauche) et du paramètre de taille $\bar{x}$ (colonne de droite). Les distributions de taille (loi log-normale) et d'orientation des particules sont prises en compte. Comparaison des résultats obtenus entre notre code de Monte Carlo résolvant le développement en série de Born et un code de référence T-Matrix. Les résultats obtenus par notre code de Monte Carlo résolvant l'approximation de Born (voir Chap. V) sont également ajoutés. Paramètres : $m_r = 1.05 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $s = 1.18$, $N = 10^7$, $\delta = \frac{r_{eq}}{35}$.

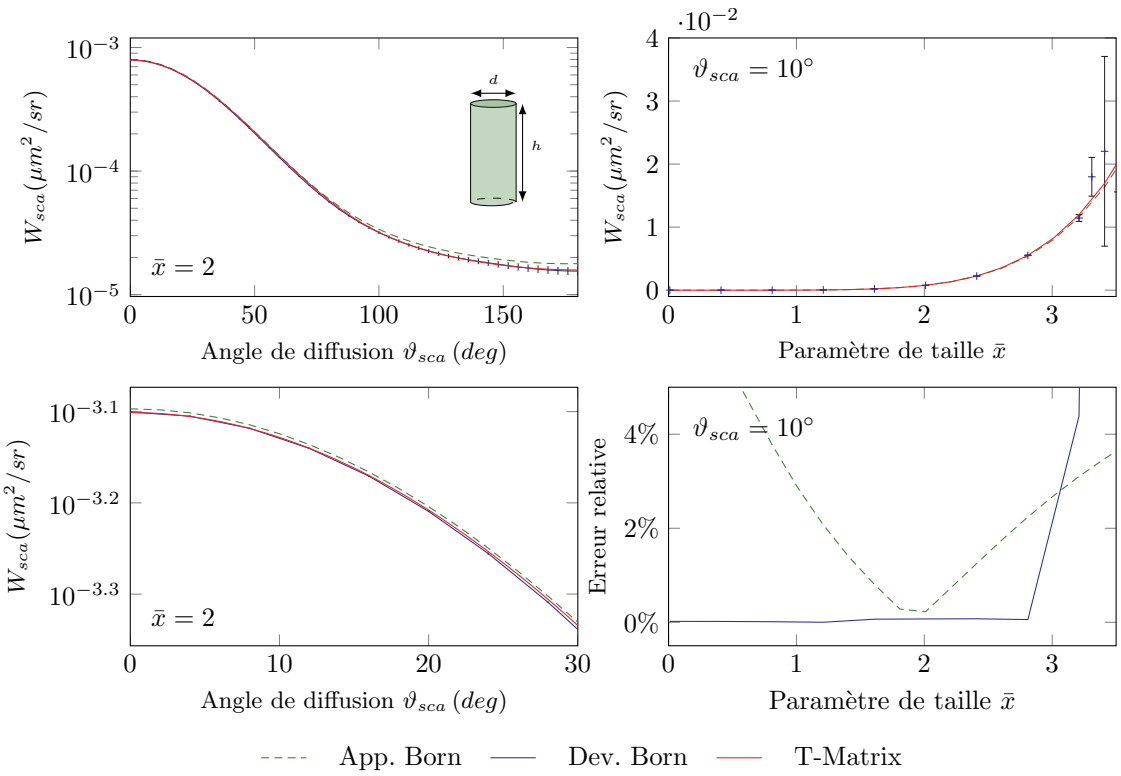



FIGURE VI.8 – Section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ d'une suspension de particules cylindriques en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ (colonne de gauche) et du paramètre de taille $\bar{x}$ (colonne de droite). Les distributions de taille (loi log-normale) et d'orientation des particules sont prises en compte. Comparaison des résultats obtenus entre notre code de Monte Carlo résolvant le développement en série de Born et un code de référence T-Matrix. Les résultats obtenus par notre code de Monte Carlo résolvant l'approximation de Born (voir Chap. V) sont également ajoutés. Paramètres : $m_r = 1.05 - 0.005i$, $R = 0.463$, $\lambda_e = 0.56\,\mu m$, $s = 1.1374$, $N = 10^7$, $\delta = \frac{r_{eq}}{35}$.

## VI.5 Conclusion

La principale proposition de ce chapitre est une formalisation statistique du problème de diffusion électromagnétique, appliquée au développement en série de Born. Cette lecture statistique aboutit à une formulation en intégrale de chemins qui ouvre un nouveau potentiel interprétatif du problème physique. Ce travail a été mené en toute généralité, sans faire d'hypothèse sur la géométrie ou sur l'hétérogénéité des particules. En plus des images physiques qui en émanent, la traduction algorithmique de cette formulation statistique nous a permis de concevoir des simulations originales du problème de diffusion par la méthode de Monte Carlo.

Nous avons choisi de ne pas insister sur la mise en œuvre informatique, mais comme pour les approximations de Schiff et de Born dans les chapitres précédents, nos algorithmes sont codés dans un environnement de développement rendant automatiquement accessible la parallélisation et les outils de la synthèse d'image pour le suivi de chemins

en géométrie complexe. En pratique, les simulations que nous avons présentées ont été obtenues en spécifiant la géométrie des particules dans un fichier CAO, sans avoir à modifier notre algorithme en fonction de la géométrie simulée. Dans ce chapitre nous avons étudié des géométries simples (cylindres et sphères) pour valider nos résultats à l'aide de solutions de référence, mais les mêmes algorithmes peuvent directement être utilisés pour simuler n'importe quelle géométrie (dès lors qu'un fichier CAO définissant cette géométrie est accessible). De la même manière, nous avons choisi de ne pas insister sur la prise en compte des distributions de taille et d'orientation des particules, ainsi que sur le calcul systématique de sensibilité, qui ont été détaillés dans les chapitres précédents. Ici encore, ces avantages de la méthode de Monte Carlo sont directement accessibles : les résultats de simulation présentés dans ce chapitre prennent en compte des distributions taille/orientation, sans augmentation significative du temps de calcul par rapport à l'étude d'une particule déterministe unique ; les sensibilités sont quant à elles reportées dans l'annexe I.

Le travail de formulation et de résolution numérique mené dans ce chapitre n'est pas restreint au seul développement en série de Born. Il sera, à terme, directement utilisable pour l'étude et la mise en œuvre d'autres développements permettant d'adresser des particules plus grandes et à plus fort contraste [Kleinman et al., 1990; Pankratov et al., 1995; Gao and Torres-Verdín, 2006; Osnabrugge et al., 2016]. Toutefois, nous avons identifié qu'une première étape pour aller dans cette direction correspond à l'optimisation de la convergence numérique de nos algorithmes, ce qui fait l'objet du chapitre suivant. En effet, si la statistique d'échantillonnage des chemins choisis dans ce chapitre nous a permis d'obtenir un premier jeu de résultats validant notre approche, elle mène par contre à des difficultés de convergence numérique dès que la taille des particules augmente. Nous verrons dans le chapitre suivant que l'optimisation des algorithmes nécessitera une compréhension fine de la nouvelle interprétation en espace de chemins que nous proposons, afin d'être en mesure, à terme, de simuler une statistique de chemins pertinente au regard du problème physique.

# CHAPITRE VII

# Optimisation des algorithmes par application du principe de zéro-variance

Dans le chapitre précédent, nous avons observé des difficultés de convergence numérique lors de l'évaluation du développement en série de Born, notamment lorsque le paramètre de taille de la particule augmente. En réponse, l'objectif du présent chapitre est d'engager un travail d'optimisation des algorithmes. Pour cela, nous allons poser un cadre pour l'application du principe de zéro-variance dans le cas du développement en série de Born. La démarche pour concevoir un algorithme à variance nulle sera mise en œuvre sur le premier terme du développement en série de Born. Nous obtiendrons ainsi une optimisation de l'algorithme de Monte Carlo évaluant l'approximation de Born (ou de Rayleigh-Gans-Debye). Enfin, nous dégagerons quelques perspectives de travail pour appliquer une telle approche aux termes d'ordres supérieurs de la série. Les résultats de ce chapitre exploratoire posent des bases pour aller, à terme, vers la simulation de paramètres de taille et de contrastes d'indice croissants, ce qui est un verrou bien identifié dans la littérature.

## VII.1 Introduction

La résolution numérique du développement de Born est un problème difficile car les fonctions que nous intégrons sont fortement oscillantes [Li et al., 2010], et ce d'autant plus que le paramètre de taille augmente. Les intégrandes dans le développement en série de Born sont en effet constituées de produits de dyades de Green de nombre d'onde $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$, et le nombre de leur "périodes" au sein du domaine d'intégration $\mathcal{V}_p$ (le volume de la particule) est directement lié au paramètre de taille. Dans la littérature, le calcul d'intégrales avec des intégrandes fortement oscillantes apparaît comme un véritable défi et ce malgré les différentes méthodes existantes [Ma and Xu, 2015]. Pour cette raison, des approximations spécifiques ont été développées, comme nous l'avons déjà rencontré dans le cadre de l'approximation de Schiff avec la méthode des phases stationnaires qui permet de ne pas tenir compte des régions de fortes oscillations dont la contribution à

l'intégrale est négligeable (voir Sec. III.6). Ici, nous proposons d'utiliser une technique de Monte Carlo permettant de mieux gérer ces intégrandes oscillantes, tout en produisant un calcul exact. Plus précisément il s'agit d'optimiser les procédures d'échantillonnage des chemins au sein de la particule, puisque les choix simples que nous avons fait au chapitre précédent ne sont pas adaptés pour ce type de comportement. Il nous faut déterminer un échantillonnage qui reflète davantage la physique du problème étudié, afin de capter les oscillations. Pour ce faire, nous allons utiliser une technique, dite de réduction de variance, qui est connue sous le nom de principe de zéro-variance.

Nous avons déjà vu qu'à chaque fois qu'une grandeur est estimée par la méthode de Monte Carlo, nous disposons également de l'incertitude associée à l'estimation de la grandeur. Cette incertitude peut-être réduite dès lors que l'on augmente le nombre de réalisations : multiplier par 100 le nombre de réalisations permet de diviser par 10 l'incertitude initiale. Cependant, procéder de cette façon peut s'avérer particulièrement lourd et inefficace, puisque cela entraîne inévitablement une augmentation du temps de calcul. Dans la littérature, il existe diverses techniques alternatives permettant de réduire l'incertitude associée à l'estimation d'une grandeur sans avoir recours à augmenter le nombre de réalisations. Ces techniques, connues sous le nom de techniques de réduction de variance, sont recensées dans les références suivantes [Hammersley and Handscomb, 1964; Dunn and Shultis, 2012; Kleijnen et al., 2013]. Parmi ces techniques, on trouve le principe de zéro-variance ou variance nulle [Assaraf and Caffarel, 1999], qui est connue depuis les débuts de la méthode de Monte Carlo et a été utilisé à de nombreuses reprises dans différents travaux de notre équipe de recherche [De la Torre, 2011; Dauchet et al., 2013; Delatorre et al., 2014; Galtier, 2014]. Les algorithmes à zéro-variance sont des algorithmes tels qu'à chaque réalisation, le poids de Monte Carlo correspond exactement à la valeur de la grandeur recherchée. Autrement dit, il ne suffit que d'une seule réalisation pour obtenir une estimation exacte de la grandeur à évaluer. En pratique, ceci signifie que de tels algorithmes ne sont pertinents que lorsque l'on connaît une expression analytique de la grandeur, c'est-à-dire lorsque l'estimation de ladite grandeur par la méthode de Monte Carlo est inutile. Cependant, suivre une démarche de type variance nulle est très intéressante puisqu'elle fournit des informations essentielles pour orienter, de façon pertinente, le choix des fonctions densités de probabilité (PDF). Autrement dit, une approche zéro-variance sert de guide en vue d'optimiser les procédures d'échantillonnages, et ainsi réduire l'incertitude associée à la grandeur à estimer. Une des premières étapes d'une approche zéro-variance est d'écrire (même si le calcul est difficile) formellement une expression analytique de la grandeur que l'on cherche à évaluer par la méthode de Monte Carlo. Ceci permet alors de définir une PDF optimisée idéale. La seconde étape consiste à se rapprocher de cette PDF optimale pour améliorer la convergence des algorithmes.

Dans la suite, nous allons détailler la démarche pour concevoir un algorithme de type zéro-variance à partir de la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion dans le cadre de l'approximation de Born. Indépendamment du cadre de validité de cette approximation, ce choix est double. D'une part, il permet de faire comprendre, sur un exemple simple, comment le principe de zéro-variance est utilisé pour traiter les intégrandes oscillantes de manière efficace. D'autre part, puisque l'intégrale considérée correspond à l'ordre zéro du développement en série de Born, cela constitue la première étape en vue d'appliquer une démarche de type zéro-variance sur les termes d'ordres supérieurs de la série. Ces termes sont plus délicats à traiter et ils correspondent à un enjeu conséquent qui dépasse le cadre de la présente thèse. Toutefois, nous présenterons quelques pistes dans Sec. VII.3 pour appliquer le principe de zéro-variance à ces termes.

## VII.2 Approximation de Born

Dans cette section, nous allons appliquer le principe de zéro-variance en travaillant sur la matrice amplitude de diffusion de l'approximation de Born. Dans un premier temps, nous prenons une particule sphérique homogène isolée. Dans une telle configuration, nous allons pouvoir déterminer une fonction densité de probabilité optimale puisque l'on connait une solution analytique. Dans un second temps, le principe de zéro-variance sera appliqué pour une particule sphéroïdale homogène isolée (voir Sec. VII.2.2). Cela nous permettra alors de déterminer une fonction densité de probabilité optimisée pour l'échantillonnage d"une position au sein du volume de la particule, réduisant ainsi la variance de l'algorithme.

### VII.2.1 Cas d'une particule sphérique homogène isolée

#### VII.2.1.1 Matrice amplitude de diffusion

Considérons une particule sphérique homogène et isolée de rayon $R_s$ et de volume $\mathcal{V}_p$. Dans le cadre de l'approximation de Born, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ est donnée par Eq. V.8. Pour une particule homogène, elle s'écrit sous la forme (on a seulement sorti le terme $m_r^2 - 1$ de l'intégrale) :

$$\bar{\bar{S}} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2 - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{VII.1}$$

où la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$ est donnée par Eq. V.9 que l'on rappelle ci-dessous :

$$P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} = \begin{bmatrix} \cos\theta_s \cos\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + \sin\theta_s \sin\theta_i & \cos\theta_s \sin(\varphi_s - \varphi_i) \\ -\cos\theta_i \sin(\varphi_s - \varphi_i) & \cos(\varphi_s - \varphi_i) \end{bmatrix} \tag{VII.2}$$

Dans là mesure où nous allons travailler sur une particule sphérique isolée, les angles $\varphi_i$ et $\varphi_s$ sont quelconques ; on prend $\varphi_i = \varphi_s = 0$. Ceci simplifie l'expression de la matrice $P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}}$ :

$$P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} = \begin{bmatrix} \cos\vartheta_{sca} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{VII.3}$$

où l'on a posé $\cos\vartheta_{sca} = \cos\theta_s \cos\theta_i + \sin\theta_s \sin\theta_i$ avec $\vartheta_{sca}$ l'angle de diffusion. Ainsi, en injectant Eq. VII.3 dans Eq. VII.1, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ devient diagonale :

$$\bar{\bar{S}} = \begin{bmatrix} S_{11} & 0 \\ 0 & S_{22} \end{bmatrix} \tag{VII.4}$$

Les éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ sont donnés par :

$$S_{11} = S_{22} \cos\vartheta_{sca} \tag{VII.5}$$

$$S_{22} = -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2 - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \tag{VII.6}$$

Dans la suite, nous allons nous concentrer plus particulièrement sur l'élément $S_{22}$ de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ donnée par Eq. VII.6 (l'élément $S_{11}$ se déduit directement de $S_{22}$ (voir Eq. VII.5)). Bien évidemment, pour une particule sphérique, l'intégrale contenue dans Eq. VII.6 ne pose aucune difficulté et peut-être calculée analytiquement (voir Sec. II.1.3.1). L'idée ici est de concevoir un algorithme de type zéro-variance en cherchant la fonction densité de probabilité optimale, c'est-à-dire celle qui retranscrit la solution analytique. Cela permet de mettre en évidence la partie de l'intégrale pour laquelle les oscillations, qui génèrent de la variance, sont importantes. Avant d'appliquer le principe de zéro-variance, nous allons reformuler l'intégrale Eq. VII.6 en utilisant une technique de réduction du domaine d'intégration (que nous avons déjà rencontré dans Sec. IV.1.4).

### VII.2.1.2 Optimisation par réduction du domaine d'intégration

Nous reformulons ici Eq. VII.6 de sorte à obtenir une intégrale simple au lieu d'une intégrale triple. L'objectif ici est d'isoler l'intégrale dont l'intégrande ne va porter que sur une variable de dimension liée à la taille de la particule. Dans un premier temps, il va s'agir de construire une position $\vec{r}_0 \in \mathcal{V}_p$ en vue d'écrire l'intégrale $S_{22}$ sous la forme d'une intégrale sur la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule. Pour y parvenir, notons $\mathcal{Q}$ le plan passant par le centre $O$ de la sphère de rayon $R_s$ et perpendiculaire à la direction $\vec{e}_\xi = \frac{\vec{e}_s - \vec{e}_i}{\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|}$ qui correspond à la bissectrice entre $\vec{e}_s$ et $-\vec{e}_i$ (voir Fig. VII.1). La surface projetée $\mathcal{P}$ de la sphère sur ce plan $\mathcal{Q}$ est un disque ($\mathcal{P}$ correspond également à

l'intersection entre le plan $\mathcal{Q}$ et le volume $\mathcal{V}_p$ de la sphère). Notons $\vec{s}$ une position sur le disque de rayon $R_s$. Par construction, on a :

$$\vec{s} \in \mathcal{P} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{s} \cdot \vec{e}_\xi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{s} \cdot (\vec{e}_s - \vec{e}_i) = 0 \tag{VII.7}$$

Considérons maintenant une droite $\mathcal{D}$ passant par $\vec{s}$ et parallèle à la direction $\vec{e}_\xi$ (voir Fig. VII.1). Notons $A(\vec{s})$ et $B(\vec{s})$ les points d'intersections entre cette droite $\mathcal{D}$ et la sphère de volume $\mathcal{V}_p$. On définit alors une position $\vec{r}_0$ sur le segment $[A(\vec{s}), B(\vec{s})]$ telle que :

$$\vec{r}_0 = \vec{s} + \xi \vec{e}_\xi = \vec{s} + \xi \frac{\vec{e}_s - \vec{e}_i}{\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|} \tag{VII.8}$$

avec $\xi = \|\vec{r}_0 - \vec{s}\|$. Par construction, la position $\vec{r}_0$ appartient au volume $\mathcal{V}_p$ de la particule.

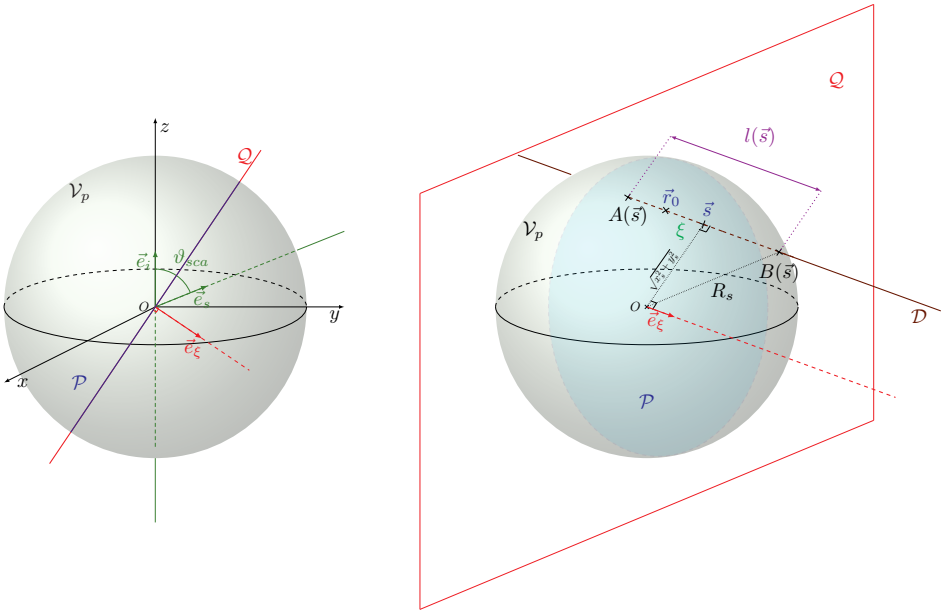



FIGURE VII.1 – Représentation des notations utilisées pour la construction d'une position $\vec{r}_0$ au sein du volume d'une particule sphérique. Le vecteur $\vec{e}_\xi$ est la bissectrice entre la direction d'observation $\vec{e}_s$ et l'opposé de la direction incidente $-\vec{e}_i$. $\mathcal{Q}$ est le plan passant par le centre de la sphère de volume $\mathcal{V}_p$ et perpendiculaire à la direction $\vec{e}_\xi$. La surface projetée de la sphère sur ce plan $\mathcal{Q}$ est notée $\mathcal{P}$. Enfin, $\mathcal{D}$ est la droite passant par une position $\vec{s} \in \mathcal{P}$ et perpendiculaire au plan $\mathcal{Q}$ ; elle intersecte la sphère en deux points notés $A(\vec{s})$ et $B(\vec{s})$. $\vartheta_{sca}$ est l'angle de diffusion formé par les vecteurs incident $\vec{e}_i$ et d'observation $\vec{e}_s$.

En injectant Eq. VII.8 dans Eq. VII.6, puis en utilisant Eq. VII.7, la formulation intégrale de $S_{22}$ s'écrit :

$$\begin{aligned} S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) &= -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2-1)\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{ik_e(\vec{e}_s-\vec{e}_i)\cdot\vec{r}_0}d\vec{r}_0 \\ &\overset{\text{(VII.8)}}{=} -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2-1)\iint_{\mathcal{P}}\int_{A(\vec{s})}^{B(\vec{s})} e^{ik_e(\vec{e}_s-\vec{e}_i)\cdot\left(\vec{s}+\xi\frac{\vec{e}_s-\vec{e}_i}{\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\right)}d\xi d\vec{s} \\ &\overset{\text{(VII.7)}}{=} -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2-1)\iint_{\mathcal{P}}\int_{A(\vec{s})}^{B(\vec{s})} e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\xi}d\xi d\vec{s} \\ &= -\frac{k_e(m_r^2-1)}{4\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\iint_{\mathcal{P}}\left[e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|B(\vec{s})}-e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|A(\vec{s})}\right]d\vec{s} \end{aligned} \tag{VII.9}$$

Nous venons donc de réduire d'une dimension le domaine d'intégration qui est désormais restreint à la surface projetée $\mathcal{P}$ de la particule. Il est possible de faire encore mieux en effectuant un changement de variable comme nous allons le voir dans la suite.

Par construction et dans le cas d'une sphère, la position $\vec{s}$ se trouve au milieu du segment $[A(\vec{s}),B(\vec{s})]$. En notant $(x_s,y_s)$ les coordonnées de $\vec{s}$, on obtient

$$B(\vec{s}) = -A(\vec{s}) = R_s\sqrt{1-\frac{x_s^2}{R_s^2}-\frac{y_s^2}{R_s^2}} = \frac{l(\vec{s})}{2} \tag{VII.10}$$

où $l(\vec{s})$ représente la distance entre $A(\vec{s})$ et $B(\vec{s})$ (voir Fig. VII.1). En injectant Eq. VII.10 dans Eq. VII.9, il vient :

$$\begin{aligned} S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) &= -\frac{k_e(m_r^2-1)}{4\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\iint_{\mathcal{P}}\underbrace{\left[e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}}-e^{-ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}}\right]}_{2i\sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}\right)}d\vec{s} \\ &= -i\frac{k_e(m_r^2-1)}{2\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\iint_{\mathcal{P}}\sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}\right)d\vec{s} \end{aligned} \tag{VII.11}$$

En effectuant le changement de variable $x_s = R_s\rho\cos\phi$ et $y_s = R_s\rho\sin\phi$, l'intégrale Eq. VII.11 s'écrit

$$S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = -i\frac{k_e(m_r^2-1)}{2\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\int_0^{2\pi}\int_0^1\sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\rho)}{2}\right)R_s^2\rho d\rho d\phi \tag{VII.12}$$

où en utilisant Eq. VII.10, $l(\rho)$ s'écrit :

$$l(\rho) = 2R_s\sqrt{1-\rho^2} \tag{VII.13}$$

L'intégrande étant indépendante de la variable $\phi$, l'intégrale sur $\phi$ est donc analytique et vaut $2\pi$. On obtient alors :

$$S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = -i\frac{k_eR_s^2(m_r^2-1)}{\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\int_0^1\rho\sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\rho)}{2}\right)d\rho \tag{VII.14}$$

Nous venons encore une fois de réduire la dimension du domaine d'intégration : il ne reste plus qu'une intégrale sur la variable réduite $\rho$. Dans la suite, nous allons nous concentrer sur cette intégrale afin d'y appliquer le principe de zéro-variance et construire l'algorithme correspondant. Plutôt que de travailler avec Eq. VII.14, nous préférons travailler dans la suite avec la formulation suivante :

$$S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -i\frac{x^3(m_r^2 - 1)}{u_s} \int_0^1 \rho \sin\left(u_s\sqrt{1-\rho^2}\right) d\rho \tag{VII.15}$$

où l'on a remplacé $\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|$ par $\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\| = 2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$, et où l'on a introduit le paramètre de taille $x = k_e R_s$ et la quantité $u_s = 2x\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$.

### VII.2.1.3 Optimisation par application du principe de zéro-variance

Dès lors que l'on envisage d'appliquer une démarche de type zéro-variance c'est que nous avons des difficultés de convergence lors de l'estimation de l'intégrale. C'est bien le cas avec l'intégrale précédente (voir Eq. VII.15) puisque l'intégrande notée $f(\rho) = \rho\sin\left(u_s\sqrt{1-\rho^2}\right)$, est une fonction oscillante qui oscille d'autant plus que le paramètre de taille $x$ augmente (voir Fig. VII.2). Ces fortes oscillations, qui sont plus importantes au bord de la particule (voir Fig. VII.2), entraînent des difficultés de convergence car il est difficile d'évaluer la moyenne d'une grandeur qui oscille autour d'une valeur nulle. En pratique, ceci se traduit, à un nombre de réalisations donné, par une augmentation significative de l'écart type (ou de manière équivalente de la variance). Tout l'enjeu de

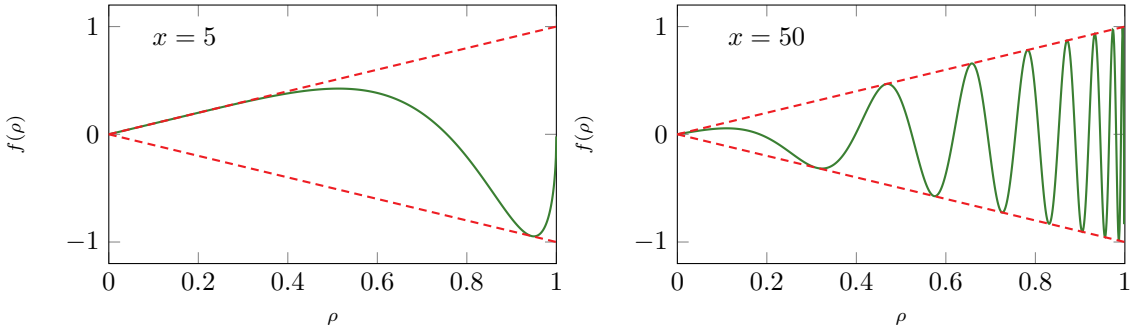



FIGURE VII.2 – Tracé de la fonction $f(\rho)$ avec $x = 5$ (à gauche) et $x = 50$ (à droite), et $\vartheta_{sca} = 10°$. Les courbes en traits pointillés représentent les fonctions majorante et minorante de la fonction $f$ : $f_{maj}(\rho) = \rho$ et $f_{min}(\rho) = -\rho$

cette sous-section est donc de mieux gérer ces comportements oscillatoires, qui ne sont pas restreints à la forme sphérique, afin de réduire la variance de nos algorithmes. Autrement dit, une bonne compréhension des oscillations doit nous permettre d'optimiser les procédures d'échantillonnages, et par suite améliorer la convergence des algorithmes. C'est ce que nous allons voir dans la suite en appliquant une approche de type zéro-variance.

**Reformulation intégrale en utilisant une variable de contrôle.** Avant d'appliquer le concept de zéro-variance, il est nécessaire de s'assurer que l'intégrande (ici $f(\rho)$) de l'intégrale $S_{22}$ ne change pas de signe sur le domaine d'intégration. En effet, si ce n'est pas le cas, nous ne pouvons pas écrire à partir de cette formulation intégrale une fonction densité de probabilité (PDF) optimale (par définition une PDF est toujours positive). Or, ici $f$ étant une fonction sinus, elle oscille donc en changeant de signe. Pour contourner cette contrainte, il est possible d'utiliser une variable de contrôle permettant de construire une intégrande de signe constant pour laquelle nous pourrons écrire une PDF optimale. Pour ce faire, on remarque que la fonction $f$ est bornée, et par conséquent qu'elle est majorée et minorée. En particulier, elle est minorée par $f_{min}(\rho) = -\rho$ (voir Fig. VII.2). En utilisant $f_{min}$ comme variable de contrôle, on peut écrire $f$ comme $f = -f_{min} + (f_{min} - f)$. Ceci permet alors d'écrire $S_{22}$ sous la forme :

$$S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -i\frac{x^3(m_r^2 - 1)}{u_s}\left[\int_0^1 f_{min}(\rho)d\rho + \int_0^1 \left[-f_{min}(\rho) + f(\rho)\right] d\rho\right] \tag{VII.16}$$

La première intégrale ne pose aucune difficulté particulière et vaut $-\frac{1}{2}$. La seconde intégrale possède une intégrande positive nous permettant, cette fois-ci, d'envisager une approche de type zéro-variance. Cela est détaillé dans les paragraphes suivants.

**Construction de la PDF optimale à l'aide du principe de zéro-variance.** Concentrons nous sur la seconde intégrale de Eq. VII.16, notée $\mathcal{K}$ :

$$\mathcal{K} = \int_0^1 [-f_{min}(\rho) + f(\rho)]d\rho = \int_0^1 h(\rho)d\rho = \int_0^1 \rho\left[1 + \sin\left(u_s\sqrt{1-\rho^2}\right)\right] d\rho \tag{VII.17}$$

où l'on a posé $h(\rho) = -f_{min}(\rho) + f(\rho) = \rho\left[1 + \sin\left(u_s\sqrt{1-\rho^2}\right)\right]$. Par construction, $h$ est une fonction positive et bornée (voir Fig. VII.3).

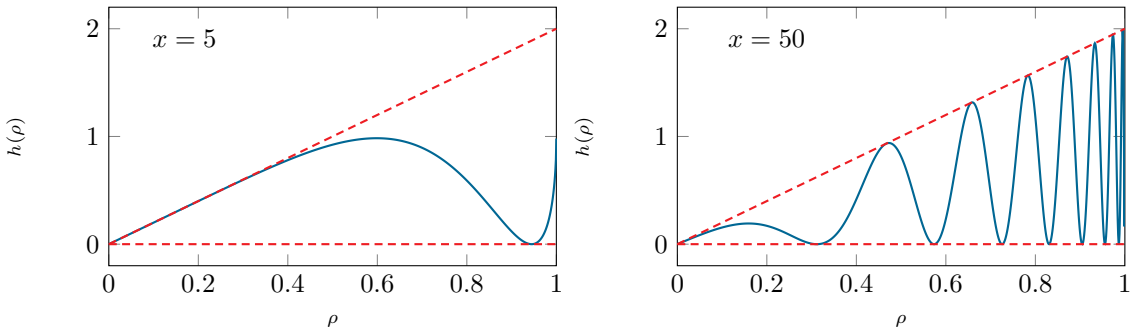



FIGURE VII.3 – Tracé de la fonction $h(\rho)$ avec $x = 5$ (à gauche) et $x = 50$ (à droite). Les courbes en traits pointillés représentent les fonctions majorante et minorante de la fonction $h$ : $h_{maj}(\rho) = 2\rho$ et $h_{min}(\rho) = 0$.

Tout d'abord, écrivons $\mathcal{K}$ comme une espérance. En suivant la même démarche adoptée tout au long du manuscrit, nous introduisons une variable aléatoire $P$ distribuée selon

$p_P(\rho)$. Puis, on multiplie et divise l'intégrande par la fonction densité de probabilité (PDF) arbitraire $p_P(\rho)$ de sorte à écrire :

$$\mathcal{K} = \int_0^1 d\rho \, p_P(\rho) \frac{h(\rho)}{p_P(\rho)} = \int_0^1 d\rho \, p_P(\rho) w_{\mathcal{K}}(\rho) \tag{VII.18}$$

où l'on a introduit la fonction poids donnée par :

$$w_{\mathcal{K}}(\rho) = \frac{h(\rho)}{p_P(\rho)} \tag{VII.19}$$

Puisque le choix de la PDF est arbitraire, nous pouvons toujours prendre la PDF optimale, notée $p^I_{P_{opt}}(\rho)$, définie par :

$$p^I_{P_{opt}}(\rho) = \frac{h(\rho)}{\displaystyle\int_0^1 h(\rho) d\rho} = \frac{h(\rho)}{\mathcal{K}} \tag{VII.20}$$

L'utilisation d'une telle PDF conduit à une variance nulle, c'est-à-dire à une estimation exacte de la grandeur considérée. En effet, en injectant Eq. VII.20 dans Eq. VII.19, le poids de Monte Carlo idéal $w^I_{\mathcal{K}}$ est égal à la grandeur $\mathcal{K}$ que l'on cherche à estimer :

$$w^I_{\mathcal{K}} = \frac{h(\rho)}{p^I_{P_{opt}}(\rho)} = \int_0^1 h(\rho) d\rho = \mathcal{K} \tag{VII.21}$$

L'expression du poids idéal Eq. VII.21 nous indique clairement que pour construire un algorithme à variance nulle, il est nécessaire de connaître la solution de la grandeur recherchée (ce qui est rarement le cas dès lors qu'une évaluation numérique est envisagée). Dans le présent exemple, judicieusement choisi pour montrer la démarche, l'intégrale $\mathcal{K}$ est analytique :

$$\mathcal{K} = \int_0^1 h(\rho) d\rho = \frac{1}{u_s^2} \left[ \frac{1}{2} u_s^2 + \sin u_s - u_s \cos u_s \right] \tag{VII.22}$$

où l'on rappelle que $u_s = 2x \sin \frac{\vartheta_{sca}}{2}$. La connaissance de cette solution analytique permet d'obtenir une expression explicite de la fonction densité de probabilité (PDF) optimale $p^I_{P,opt}(\rho)$ :

$$p^I_{P,opt}(\rho) = \frac{h(\rho)}{\mathcal{K}} = u_s^2 \rho \frac{1 + \sin(u_s \sqrt{1 - \rho^2})}{\frac{1}{2} u_s^2 + \sin u_s - u_s \cos u_s} \tag{VII.23}$$

Il va de soi que si l'on connait explicitement la PDF optimale, alors on connaît la solution de la grandeur recherchée ; il n'y a alors aucun intérêt à résoudre l'intégrale par la méthode de Monte Carlo. Toutefois, faisons comme si on souhaitait vraiment construire un algorithme de Monte Carlo estimant l'intégrale (l'idée ici est d'aller au bout de l'exemple et de voir si l'on est en mesure d'écrire l'algorithme correspondant). Pour y parvenir, il est

nécessaire de savoir échantillonner un nombre $\rho$ sur $[0, 1]$ selon cette PDF. Compte tenu de l'expression de cette PDF (voir Eq. VII.23), il n'est pas envisageable ici d'utiliser la méthode classique consistant à calculer la cumulée inverse de la PDF (voir Encart 5 dans Sec. IV.2.1.1) car nous ne disposons pas d'une expression analytique de cette cumulée. Pour contourner cette difficulté, nous pouvons utiliser la méthode dit de rejet. Ceci fait l'objet du paragraphe qui suit.

**Procédure d'échantillonnage par la méthode de rejet.** Afin d'échantillonner un nombre aléatoire $\rho$ suivant la fonction densité de probabilité donnée par Eq. VII.23, nous appliquons la méthode de rejet (voir Encart 8). Elle se déroule en trois étapes. La première étape consiste à échantillonner de façon uniforme $\rho$ sur un intervalle $[0, 1]$. La seconde étape consiste à échantillonner uniformément un nombre $h$ sur $[0, h_{max}]$, où $h_{max}$ est un majorant de la fonction $h$. Enfin, on termine par un test : si $h < h(\rho)$ alors on garde le tirage, sinon on le rejette et on revient à la première étape. Ceci est schématisé Fig. VII.4.

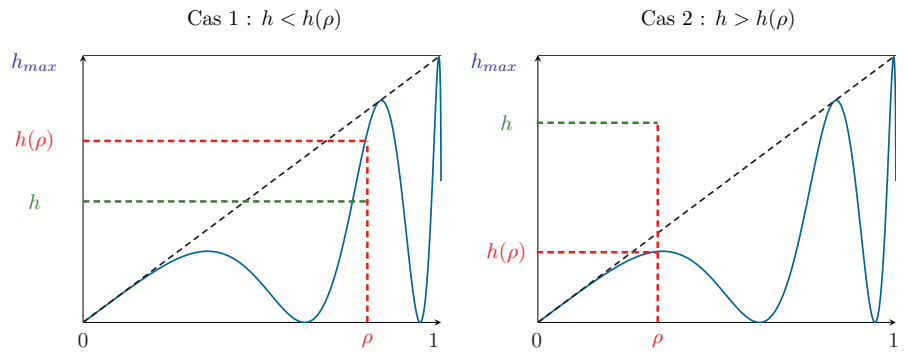



FIGURE VII.4 – Schématisation de la procédure d'échantillonnage par la méthode de rejet. Si $h < h(\rho)$ alors on est en dessous de la courbe : on garde ce tirage (Cas 1). Si $h > h(\rho)$, alors on se trouve au dessus de la courbe : on rejette le tirage (Cas 2).

**Encart 8: Procédure d'échantillonnage par la méthode de rejet**

La méthode de la cumulée inverse (voir Encart 5 dans Sec. IV.2.1.1) devient inutilisable dès lors que la fonction densité de probabilité (PDF) ne peut pas être intégrée analytiquement pour obtenir la cumulée ou si cette dernière est difficile à inverser. Pour contourner ce problème, il existe une approche alternative initialement proposée par VON NEUMANN [Neumann, 1951] et connue sous le nom de **méthode de rejet** [Dunn and Shultis, 2012].

Considérons une PDF $p_X(x)$ définie analytiquement sur l'intervalle $[a, b]$. Supposons que son intégrale sur le domaine $[a, b]$ ne soit pas analytique ou que la fonction

de répartition associée à cette PDF soit difficile à inverser. La méthode de rejet nous permet d'envisager une procédure d'échantillonnage en trois étapes :

1. un nombre aléatoire $x_i$ est uniformément échantillonné sur l'intervalle $[a, b]$.
2. un nombre $p$ est uniformément échantillonné sur $[0, M]$, où $M$ est un majorant de la PDF $p_X(x)$.
3. on réalise le test suivant : si $p < p_X(x_i)$ alors on garde le tirage, sinon on le rejette et on revient à la première étape.

On voit bien ici tout l'intérêt d'aller au bout de cet exemple (même s'il peut paraître à première vue inutile) dans la mesure où même si la PDF optimale est connue, il faut être capable d'expliciter la procédure d'échantillonnage d'un nombre suivant cette PDF.

**Algorithme zéro-variance pour l'évaluation de la grandeur $S_{22}$.** Maintenant que l'on sait échantillonner sur une PDF optimale, revenons, pour terminer l'exemple, sur la grandeur d'intérêt initiale $S_{22}$ en vue d'écrire explicitement l'algorithme zéro-variance de Monte Carlo. En injectant Eq. VII.18 (en prenant $p_P(\rho) = p_P^I(\rho)$ donnée par Eq. VII.20) dans Eq. VII.16, puis en utilisant Eq. VII.21, l'élément $S_{22}$ de la matrice amplitude de diffusion s'écrit

$$\begin{aligned} S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) &= -i\frac{x^3(m_r^2-1)}{u_s}\left[-\frac{1}{2} + \int_0^1 d\rho\, p_{P,opt}^I(\rho)\frac{h(\rho)}{p_{P,opt}^I(\rho)}\right] \\ &= -i\frac{x^3(m_r^2-1)}{u_s}\int_0^1 d\rho\, p_{P,opt}^I(\rho)\left[-\frac{1}{2} + \mathcal{K}\right] \\ &= \int_0^1 d\rho\, p_{P,opt}^I(\rho) w_{22}^I \end{aligned} \tag{VII.24}$$

avec le poids de Monte Carlo idéal $w_{22}^I$ :

$$w_{22}^I = -i\frac{x^3(m_r^2-1)}{u_s}\left[-\frac{1}{2} + \mathcal{K}\right] = -ix^3(m_r^2-1)\frac{1}{u_s^3}\left[\sin u_s - u_s \cos u_s\right] = S(\vec{e}_i, \vec{e}_s) \tag{VII.25}$$

où l'on a utilisé l'expression analytique de $\mathcal{K}$ fournie par Eq. VII.22.

L'algorithme de Monte Carlo à variance nulle estimant l'amplitude de diffusion $S_{22}$ (Eq. VII.16) d'une particule sphérique homogène s'énonce de la manière suivante :

**Algorithme 31: Approximation de Born - Principe de zéro-variance appliqué à une particule sphérique homogène isolée**

- **Étape 1** : une distance $\rho$ est échantillonnée selon $p^I_{P,opt}(\rho)$ :
  - **Étape 1.1** : une distance $\rho$ est uniformément échantillonnée sur $[0, 1]$.
  - **Étape 1.2** : un nombre $h$ est uniformément échantillonné sur $[0, h_{max}]$ selon la fonction densité de probabilité $p_H(h) = \frac{1}{h_{max}}$.
  - **Étape 1.3** : Si $h < h(\rho)$, alors on garde le tirage, sinon on rejette puis on revient à l'étape 1.
- **Étape 2** : le poids de Monte Carlo idéal $w^I$ est calculé en une seule réalisation (puisque le résultat est déjà connu analytiquement).

Contrairement à tous les algorithmes construits jusqu'ici, celui-ci fournit la solution de la grandeur $S_{22}$ en une seule réalisation.

**Conclusion.** La mise en application d'une approche zéro-variance appliquée à une particule sphérique nous a permis de déterminer une fonction densité de probabilité optimale. Nous pourrons réutiliser cette PDF lorsque l'on traitera le développement en série de Born (la première intégrale de ce développement est celle que nous venons d'étudier). Par ailleurs, dans la suite, nous proposons de l'utiliser pour l'étude de particules non-sphériques, restant toutefois proche d'une sphère (par exemple un sphéroïde peu allongé). En effet, si les déformations deviennent trop importantes, la PDF ne sera, à priori, pas assez pertinente. Dans la section suivante Sec. VII.2.2, nous proposons, dans un premier temps, d'utiliser cette PDF optimale (Eq. VII.23) pour la sphère sur un sphéroïde.

## VII.2.2 Application à une particule sphéroïdale homogène isolée

### VII.2.2.1 Matrice amplitude de diffusion

Dans cette section, nous considérons une particule sphéroïdale homogène de rapport d'élongation $R = \frac{a}{b}$ ($a$ et $b$ sont respectivement le demi-petit axe et le demi-grand axe du sphéroïde). On suppose que la direction incidente $\vec{e}_i$ est suivant l'axe de révolution du sphéroïde (l'axe $z$). Ainsi, du fait de la symétrie de la particule, les angles $\varphi_i$ et $\varphi_s$ sont quelconques ; on prend comme dans la sous-section précédente $\varphi_i = \varphi_s = 0$. Sous ces conditions, la matrice $\bar{\bar{S}}$ se simplifie et devient diagonale et ces éléments sont donnés par

Eqs. VII.5 et VII.6, que nous rappelons ci-dessous :

$$S_{11} = S_{22}\cos\vartheta_{sca} \tag{VII.26}$$

$$S_{22} = -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2-1)\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}d\vec{r}_0 \tag{VII.27}$$

#### VII.2.2.2 Optimisation par réduction du domaine d'intégration

Dans un premier temps, nous allons écrire l'intégrale de $S_{22}$ comme une intégrale simple afin de mettre en évidence l'intégrale qui est la principale source de variance due aux oscillations de l'intégrande. Pour y parvenir, nous procédons exactement de la même manière que cela a été fait précédemment sur la sphère. Plus précisément, on note $\mathcal{Q}$ le plan passant par le centre du sphéroïde et perpendiculaire à la direction $\vec{e}_\xi = \frac{\vec{e}_s-\vec{e}_i}{\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}$. La surface projetée $\mathcal{P}$ du sphéroïde sur le plan $\mathcal{Q}$ est une ellipse de demi-axes $\alpha(\chi)$ suivant l'axe des $x'$ et $a$ suivant l'axe des $y$, où $\chi$ est l'angle formé par les vecteurs unitaires $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_\xi$ (voir Fig. VII.5). Notons $\vec{s}$ une position sur cette ellipse. Par construction, on a :

$$\vec{s}\in\mathcal{P} \quad\Leftrightarrow\quad \vec{s}\cdot\vec{e}_\xi = 0 \quad\Leftrightarrow\quad \vec{s}\cdot(\vec{e}_s-\vec{e}_i) = 0 \tag{VII.28}$$

On considère également une droite $\mathcal{D}$ passant par $\vec{s}$ et parallèle à la direction $\vec{e}_\xi$. Cette droite intersecte le sphéroïde en deux points $A(\vec{s})$ et $B(\vec{s})$ (voir Fig. VII.5). On définit alors une position $\vec{r}_0$ sur le segment $[A(\vec{s}),B(\vec{s})]$ telle que :

$$\vec{r}_0 = \vec{s}+\xi\vec{e}_\xi = \vec{s}+\xi\frac{\vec{e}_s-\vec{e}_i}{\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|} \tag{VII.29}$$

avec $\xi = \|\vec{r}_0-\vec{s}\|$. Par construction, la position $\vec{r}_0$ appartient au volume $\mathcal{V}_p$ de la particule. En injectant Eq. VII.29 dans Eq. VII.27, puis en utilisant Eq. VII.28, l'intégrale $S_{22}$ s'écrit après calcul (qui sont identiques à ceux menés dans le cas d'une sphère) comme une intégrale sur la surface projetée $\mathcal{P}$ :

$$S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = -\frac{k_e(m_r^2-1)}{4\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\iint_{\mathcal{P}}\left[e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|B(\vec{s})}-e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|A(\vec{s})}\right]d\vec{s} \tag{VII.30}$$

Les quantités $A(\vec{s})$, $B(\vec{s})$ du segment $[A(\vec{s}),B(\vec{s})]$ et $\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|$ sont obtenues après des calculs géométriques :

$$A(\vec{s}) = -\frac{\beta}{2\alpha^2}-\frac{l(\vec{s})}{2} \tag{VII.31}$$

$$B(\vec{s}) = -\frac{\beta}{2\alpha^2}+\frac{l(\vec{s})}{2} \tag{VII.32}$$

$$\beta = 2b^2(1-R^2)x_s\sin\chi\cos\chi \tag{VII.33}$$

$$\alpha = \sqrt{b^2\sin^2\chi+a^2\cos^2\chi} \tag{VII.34}$$

$$l(\vec{s}) = \frac{2ab}{\alpha}\sqrt{1-\frac{x_s^2}{\alpha^2}-\frac{y_s^2}{a^2}} \tag{VII.35}$$

$$\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\| = 2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \tag{VII.36}$$

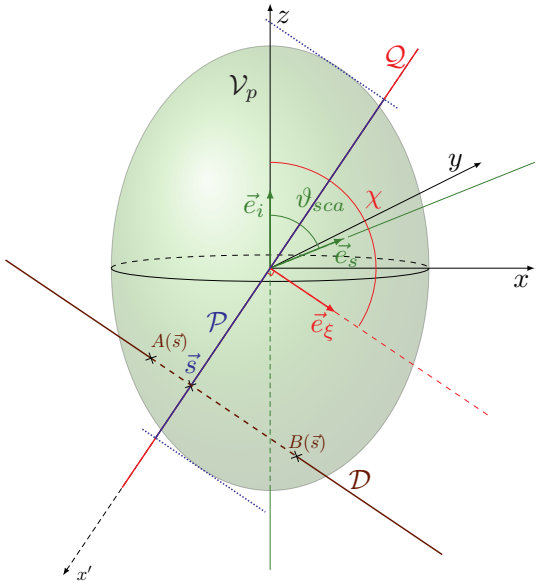



FIGURE VII.5 – Représentation des notations utilisées pour la construction d'une position $\vec{r}_0$ au sein du volume d'une particule sphéroïdale. Le vecteur $\vec{e}_\xi$ est la bissectrice entre la direction d'observation $\vec{e}_s$ et l'opposé de la direction incidente $-\vec{e}_i$. $\mathcal{Q}$ est le plan passant par le centre du sphéroïde de volume $\mathcal{V}_p$ et perpendiculaire à la direction $\vec{e}_\xi$. La surface projetée du sphéroïde sur ce plan $\mathcal{Q}$ est notée $\mathcal{P}$. Enfin, $\mathcal{D}$ est la droite passant par une position $\vec{s} \in \mathcal{P}$ et perpendiculaire au plan $\mathcal{Q}$ ; elle intersecte le sphéroïde en deux points notés $A(\vec{s})$ et $B(\vec{s})$. $\vartheta_{sca}$ est l'angle de diffusion et $\chi$ est l'angle formé par l'axe $z$ et le vecteur $\vec{e}_\xi$.

En injectant les expressions de $A(\vec{s})$ et $B(\vec{s})$ (voir Eqs. VII.31 et VII.32) dans Eq. VII.30, on obtient :

$$\begin{aligned} S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) &= -\frac{k_e(m_r^2-1)}{4\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\iint_{\mathcal{P}} e^{-ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{\beta}{2\alpha^2}} \underbrace{\left[e^{ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}} - e^{-ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}}\right]}_{=2i\sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}\right)} \\ &= -i\frac{k_e(m_r^2-1)}{2\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\iint_{\mathcal{P}} e^{-ik_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{\beta}{2\alpha^2}} \sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\vec{s})}{2}\right) d\vec{s} \end{aligned} \tag{VII.37}$$

En effectuant le changement de variable $x_s = \alpha(\chi)\rho\cos\phi$ et $y_s = a\rho\sin\phi$, il vient :

$$S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = -i\frac{k_e(m_r^2-1)}{2\pi\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|}\int_0^{2\pi}\int_0^1 e^{-i\delta\rho\cos\phi}\sin\left(k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{l(\rho)}{2}\right)\rho d\rho d\phi \tag{VII.38}$$

avec la longueur $l$ donnée par (après avoir introduit le changement de variable dans Eq. VII.35) :

$$l(\rho) = \frac{2ab}{\alpha}\sqrt{1-\rho^2} \tag{VII.39}$$

Nous avons également introduit la quantité $\delta$ définie par

$$\delta = k_e\|\vec{e}_s-\vec{e}_i\|\frac{\beta}{2\alpha^2\rho\cos\phi} = \mathring{u}_1(1-R^2)\frac{\sin\chi\cos\chi}{\sqrt{1+(R^2-1)\cos^2\chi}} \tag{VII.40}$$

où l'on a utilisé Eqs. VII.33, VII.34 et VII.36, et introduit la quantité :

$$\mathring{u}_1 = k_e b \|\vec{e}_s - \vec{e}_i\| = 2k_e b \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \tag{VII.41}$$

L'intégrale sur $\phi$ est analytique et est donnée par

$$\int_0^{2\pi} e^{-i\delta\rho\cos\phi} d\phi = 2\pi J_0(\delta\rho) \tag{VII.42}$$

où $J_0(\delta\rho)$ est la fonction de Bessel d'ordre 0. En utilisant Eq. VII.42, Eq. VII.38 devient :

$$S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -i\frac{k_e(m_r^2-1)}{\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|}\int_0^1 J_0(\delta\rho)\sin\left(k_e\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|\frac{l(\rho)}{2}\right)\rho d\rho \tag{VII.43}$$

Nous avons une nouvelle fois réduit la dimension du domaine d'intégration ; il ne reste plus qu'une intégrale simple sur la variable $\rho$. Dans la suite, nous allons résoudre cette intégrale par la méthode de Monte Carlo en utilisant la fonction densité de probabilité que nous avons déterminé sur la sphère. Pour des commodités de notations et afin de faire explicitement apparaître la dépendance de $l$ à $\rho$, nous préférons travailler avec la formulation qui suit (plutôt que d'utiliser directement avec Eq. VII.43) :

$$S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -ik_e^2\frac{ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2-1)\int_0^1 J_0(\delta\rho)\sin\left(\frac{a}{\alpha}\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}\right)\rho d\rho \tag{VII.44}$$

où l'on a utilisé les relations Eqs. VII.39 et VII.41.

### VII.2.2.3 Résolution de l'intégrale $S_{22}$ en utilisant la PDF optimale construite sur une particule sphérique

**Formulation intégrale et expressions des PDFs.** Afin de calculer numériquement l'intégrale Eq. VII.44 par la méthode de Monte Carlo, nous introduisons une fonction densité de probabilité arbitraire $p_P(\rho)$ de sorte que $S_{22}$ s'écrive :

$$S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = \int_0^1 d\rho p_P(\rho)\underbrace{\frac{-ik_e^2\frac{ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2-1)J_0(\delta\rho)\sin\left(\frac{a}{\alpha}\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}\right)\rho}{p_P(\rho)}}_{=w_{22}} \tag{VII.45}$$

où $w_{22}$ est le poids de Monte Carlo donné par :

$$w_{22} = \frac{-ik_e^2\frac{ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2-1)J_0(\delta\rho)\sin\left(\frac{a}{\alpha}\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}\right)\rho}{p_P(\rho)} \tag{VII.46}$$

Puisque la PDF est arbitraire nous pouvons choisir de prendre celle qui a été déterminée sur la sphère de rayon $R_s$ donnée par Eq. VII.23 que nous rappelons ci-dessous :

$$p^I_{P,opt}(\rho) = u_s^2\rho\frac{1+\sin(u_s\sqrt{1-\rho^2})}{\frac{1}{2}u_s^2 + \sin u_s - u_s\cos u_s} \tag{VII.47}$$

avec $u_s = 2k_e R_s \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$. Cette PDF est optimale pour une sphère de rayon $R_s$, mais pas dans le cas d'un sphéroïde (on ne notera alors plus l'exposant $I$ dans la suite). Par contre, la question à laquelle on souhaite répondre est la suivante : est-ce que cette PDF optimale pour la sphère, fournit une meilleure convergence, par rapport à une PDF uniforme, lorsqu'elle est utilisée pour un sphéroïde ? Si c'est le cas, alors nous pourrons, à priori, adapter cette PDF pour n'importe quelle autre forme non sphérique proche d'une sphère. Sinon, il faudra refaire une étude permettant de trouver une meilleure PDF.

Afin d'utiliser l'expression de la PDF donnée par Eq. VII.47, il convient de remplacer le rayon $R_s$ de la sphère par un ou des paramètres liés aux dimensions du sphéroïde. Dans ce qui suit, nous proposons de regarder deux situations :

1. la première consiste à remplacer $R_s$, qui intervient dans $u_s = 2k_e R_s \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$, par le demi-grand axe $b$ du sphéroïde. Ceci revient à prendre la PDF qui serait optimale pour une sphère de rayon $b$ qui englobe le sphéroïde. Pour cette situation, la PDF optimisée, notée $p_{P_{opt,\mathring{u}_1}}(\rho)$, est obtenue en remplaçant $u_s$ dans Eq. VII.47 par $\mathring{u}_1 = 2k_e b \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$. On a alors :

$$p_{P_{opt,\mathring{u}_1}}(\rho) = \frac{1+\sin\left(\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}\right)}{\displaystyle\int_0^1 (1+\sin(\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}))d\rho} = \mathring{u}_1^2\rho\frac{1+\sin\left(\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}\right)}{\frac{1}{2}\mathring{u}_1^2+\sin\mathring{u}_1-\mathring{u}_1\cos\mathring{u}_1} \quad \text{(VII.48)}$$

2. la seconde consiste à remplacer $R_s$ par la quantité $\frac{ab}{\alpha}$. Ceci revient à prendre la PDF qui serait optimale pour une sphère de rayon $\frac{ab}{\alpha}$. Pour cette situation, la PDF optimisée, notée $p_{P_{opt,\mathring{u}_2}}(\rho)$, est obtenue en remplaçant $u_s$ dans Eq. VII.47 par $\mathring{u}_2 = \frac{a}{\alpha}\mathring{u}_1 = 2k_e\frac{ab}{\alpha}\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$. On a alors :

$$p_{P_{opt,\mathring{u}_2}}(\rho) = \frac{1+\sin\left(\mathring{u}_2\sqrt{1-\rho^2}\right)}{\displaystyle\int_0^1 (1+\sin(\mathring{u}_2\sqrt{1-\rho^2}))d\rho} = \mathring{u}_2^2\rho\frac{1+\sin\left(\mathring{u}_2\sqrt{1-\rho^2}\right)}{\frac{1}{2}\mathring{u}_2^2+\sin\mathring{u}_2-\mathring{u}_2\cos\mathring{u}_2} \quad \text{(VII.49)}$$

Quelque soit la situation envisagée, en utilisant la méthode de rejet (voir Encart 8), nous savons échantillonner un nombre $\rho$ selon ces deux PDFs. Avant de donner l'algorithme qui en découle, réécrivons la fonction poids $w_{22,j}$ ($j = 1$ pour désigner la première situation 1 et $j = 2$ pour la seconde) en injectant Eq. VII.48 (respectivement Eq. VII.49) dans Eq. VII.46 :

$$w_{22,j} = -ik_e^2\frac{ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2-1)J_0(\delta\rho)\sin\left(\frac{a}{\alpha}\mathring{u}_j\sqrt{1-\rho^2}\right)\frac{\frac{1}{2}\mathring{u}_j^2+\sin\mathring{u}_j-\mathring{u}_1\cos\mathring{u}_j}{\mathring{u}_j^2(1+\sin(\mathring{u}_j\sqrt{1-\rho^2}))} \quad \text{(VII.50)}$$

**Algorithme.** L'algorithme de Monte Carlo estimant l'élément $S_{22}$ de la matrice amplitude de diffusion d'une particule sphéroïdale homogène isolée s'énonce de la manière suivante :

**Algorithme 32: Estimation de $S_{22}$ en utilisant une PDF optimisée**

- **Étape 1** : une distance $\rho$ est échantillonnée sur $[0,1]$ suivant la fonction densité de probabilité optimisée $p_{P_{opt},\mathring{u}_j}(\rho)$ donnée par Eq. VII.48 ou Eq. VII.49 :
  - **Étape 1.1** : une distance $\rho$ est uniformément échantillonnée sur $[0,1]$.
  - **Étape 1.2** : un nombre $h$ est uniformément échantillonné sur $[0, h_{max}]$ selon la fonction densité de probabilité $p_H(h) = \frac{1}{h_{max,j}}$, $h_{max,j}$ étant un majorant de la fonction $h_j(\rho) = 1 + \sin(\mathring{u}_j\sqrt{1-\rho^2})$.
  - **Étape 1.3** : Si $h < h_j(\rho)$, alors on garde le tirage, sinon on rejette puis on revient à la première étape.
- **Étape 2** : le poids de Monte Carlo $w_{\mathring{u}_j}$ est calculé suivant Eq. VII.50.

**Résultats.** On considère une particule sphéroïdale de rapport d'élongation $R = 0.9$ (sphéroïde peu allongé). Fig. VII.6 représente l'estimation de l'écart type $\text{std}_{(\Re eS_{22})^\star}$ associée à l'estimation $(\Re eS_{22})^\star$ de la partie réelle de $S_{22}$ en fonction du paramètre de taille. On pourrait également faire de même pour la partie imaginaire, mais cela n'apporte pas d'informations supplémentaires dans la mesure où les mêmes tendances sont observées. Sur cette figure, on compare l'écart type obtenu pour les trois choix de fonctions densités de probabilité : les deux PDFs dîtes optimisées $p_{P_{opt,\mathring{u}_1}}$ (Eq. VII.48) et $p_{P_{opt,\mathring{u}_2}}$ (Eq. VII.49) ainsi qu'une PDF uniforme $p_{P_{unif}}(\rho) = 1$. On constate alors que l'écart type obtenu en utilisant les PDFs optimisées est plus faible que celui obtenu avec une PDF uniforme, du moins jusqu'à un paramètre de taille $x \approx 80$. Fig. VII.7 représente l'estimation de l'écart type $\text{std}_{(\Re eS_{22})^\star}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ pour quatre configurations. Globalement, l'utilisation des PDFs qualifiées d'optimisées semblent fournir une meilleure précision pour des petits paramètres de taille, des petits angles de diffusion et des faibles élongations (cas de la figure en haut à gauche). Toutefois l'amélioration de la précision n'est pas vraiment significative devant celle obtenue avec une PDF uniforme. Par conséquent, les PDFs dîtes optimisées, construites à partir de la PDF idéale pour une sphère, ne sont pas complètement satisfaisantes. Ceci signifie qu'elles ne permettent pas suffisamment de rendre compte de la physique du problème car elles ne captent pas correctement les oscillations. Autrement dit, la PDF introduite dans la formulation intégrale Eq. VII.60 ne simplifie pas vraiment l'expression du poids de Monte Carlo ; seul le terme $\rho$ en préfacteur de la fonction sinus est simplifié, alors que c'est justement cette fonction sinus qui est

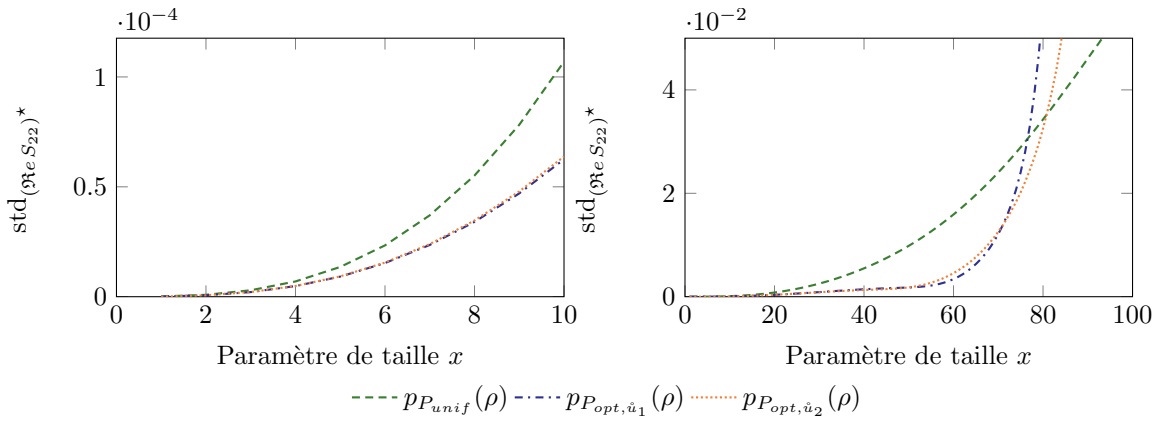



FIGURE VII.6 – Comparaison de l'écart type $\text{std}_{(\Re e\, S_{22})^\star}$ en fonction du paramètre de taille $x$ obtenu avec deux PDFs optimisées $p_{P_{opt,\mathring{u}_1}}(\rho)$ et $p_{P_{opt,\mathring{u}_2}}(\rho)$, et une PDF uniforme $p_{P_{unif}}(\rho)$. Étude réalisée sur une particule sphéroïdale. Paramètres : $R = 0.9$, $m_r = 1.02 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $\vartheta_{sca} = 3°$ et $N = 10^6$.

à l'origine des oscillations. Partant de ce constat, une façon de procéder serait de proposer une reformulation intégrale de $S_{22}$ afin de faire explicitement apparaître dans l'intégande une PDF possédant la même forme que la PDF idéale de la sphère. En particulier, il faudrait faire apparaître, dans cette intégrande, un terme de la forme $1 + \sin()$ qui se simplifierait avec le même terme provenant de la PDF. L'intérêt ici est que la principale source d'oscillation n'apparaît plus dans la fonction poids. C'est ce que nous proposons de faire dans la suite.

#### VII.2.2.4 Application du principe de zéro-variance

**Reformulation de l'intégrale et recherche d'une PDF optimisée.** Repartons de Eq. VII.44 que nous rappelons ci-dessous :

$$S_{22}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -ik_e^2 \frac{ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2 - 1) \int_0^1 J_0(\delta\rho) \sin\left(\frac{a}{\alpha}\mathring{u}_1\sqrt{1-\rho^2}\right) \rho d\rho \tag{VII.51}$$

Notons $\mathcal{T}$ l'intégrale

$$\mathcal{T} = \int_0^1 J_0(\delta\rho) \sin\left(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2}\right) \rho d\rho \tag{VII.52}$$

où l'on a posé

$$\mathring{u} = \frac{a}{\alpha}\mathring{u}_1 \tag{VII.53}$$

En utilisant le fait que $\sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2}) = \left[\sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2}) + 1\right] - 1$, on peut décomposer l'intégrale $\mathcal{T}$ sous la forme suivante :

$$\mathcal{T} = -\int_0^1 \rho J_0(\delta\rho) d\rho + \int_0^1 J_0(\delta\rho) \left[\sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2}) + 1\right] \rho d\rho \tag{VII.54}$$

La première intégrale est analytique (voir [Weisstein, 2003], équation (42) p. 201) :

$$\int_0^1 \rho J_0(\delta\rho) d\rho = 2\pi \frac{J_1(\delta)}{\delta} \tag{VII.55}$$

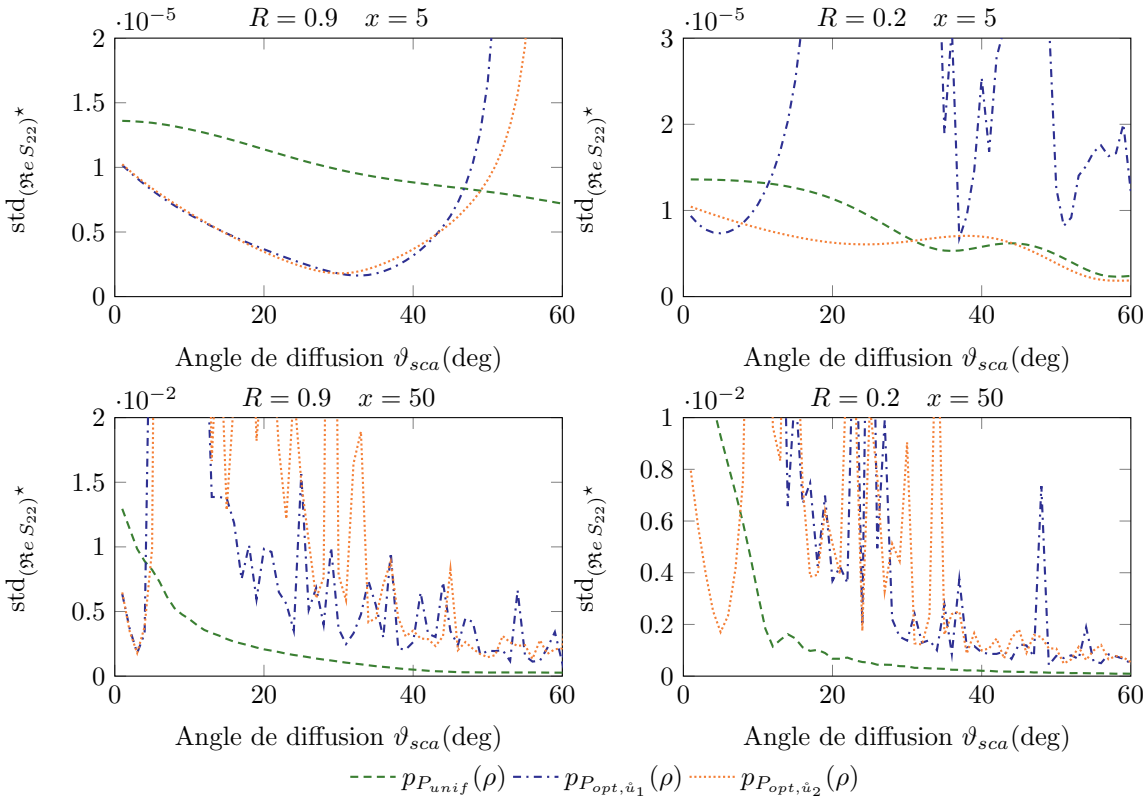



FIGURE VII.7 – Comparaison de l'écart type $\text{std}_{(\Re e\, S_{22})^\star}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ obtenu avec deux PDFs optimisées $p_{P_{opt,\mathring{u}_1}}(\rho)$ et $p_{P_{opt,\mathring{u}_2}}(\rho)$, et une PDF uniforme $p_{P_{unif}}(\rho)$. Étude réalisée sur une particule sphéroïdale. La première colonne correspond à une particule sphéroïdale d'élongation $R = 0.9$, la seconde à un rapport d'élongation $R = 0.2$. La première ligne correspond à un paramètre de taille de $x = 5$, la seconde à $x = 50$. Paramètres : $m_r = 1.02 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$ et $N = 10^6$.

où $J_1$ est la fonction de Bessel cylindrique régulière d'ordre 1. D'une part, en injectant Eq. VII.55 dans Eq. VII.54, et d'autre part en introduisant (dans l'intégrale restante) une fonction densité de probabilité $p_P(\rho)$, on obtient :

$$\mathcal{T} = -2\pi \frac{J_1(\delta)}{\delta} + \int_0^1 d\rho\, p_P(\rho) \frac{\rho\left[\sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2}) + 1\right] J_0(\delta\rho)}{p_P(\rho)} \tag{VII.56}$$

Sous cette forme, l'intégrale présente dans Eq. VII.56 nous ramène quasiment au travail sur zéro-variance qui a été mené précédemment sur la sphère (voir Sec. VII.2.1). En effet, l'intégrande fait notamment intervenir le terme $\rho[1 + \sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2})]$. Or, d'après l'étude mené sur la sphère, on sait que l'intégrale de ce terme sur $[0, 1]$ est analytique. Ceci est une information importante puisque cela va nous permettre de construire une fonction densité de probabilité (PDF) optimisée. Plus précisément, cette PDF optimisée est donnée par :

$$p_{P_{opt,\mathring{u}}}(\rho) = \frac{\rho[1 + \sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2})]}{\displaystyle\int_0^1 \rho[1 + \sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2})]d\rho} = \mathring{u}^2 \frac{\rho[1 + \sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2})]}{\frac{1}{2}\mathring{u}^2 + \sin\mathring{u} - \mathring{u}\cos\mathring{u}} \tag{VII.57}$$

avec $\mathring{u}$ donnée par Eq. VII.53. En injectant Eq. VII.57 dans Eq. VII.56, l'intégrale $\mathcal{T}$ s'écrit :

$$\mathcal{T} = -2\pi\frac{J_1(\delta)}{\delta} + \int_0^1 d\rho\, p_{P_{opt,\mathring{u}}}(\rho)\frac{1}{\mathring{u}^2}\left(\frac{1}{2}\mathring{u}^2 + \sin\mathring{u} - \mathring{u}\cos\mathring{u}\right)J_0(\delta\rho) \tag{VII.58}$$

On constate alors que le terme $\rho[1+\sin(\mathring{u}\sqrt{1-\rho^2})]$ présent initialement dans l'intégrande s'est simplifié avec celui présent dans la PDF optimisée. Par conséquent la dépendance à $\rho$ n'intervient plus que dans la fonction de Bessel $J_0$. En utilisant le fait que $\int_0^1 d\rho\, p_{P_{opt,\mathring{u}}}(\rho) = 1$, il est possible d'écrire $\mathcal{T}$ sous la forme suivante :

$$\mathcal{T} = \int_0^1 d\rho\, p_{P_{opt,\mathring{u}}}(\rho)\left[-2\pi\frac{J_1(\delta)}{\delta} + \frac{1}{\mathring{u}^2}\left(\frac{1}{2}\mathring{u}^2 + \sin\mathring{u} - \mathring{u}\cos\mathring{u}\right)J_0(\delta\rho)\right] \tag{VII.59}$$

En injectant cette expression dans Eq. VII.51, on en déduit la formulation intégrale de $S_{22}$ :

$$S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = \int_0^1 d\rho\, p_{P_{opt,\mathring{u}}}(\rho)\underbrace{\frac{-ik_e^2ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2-1)\left[-2\pi\frac{J_1(\delta)}{\delta} + \frac{1}{\mathring{u}^2}\left(\frac{1}{2}\mathring{u}^2 + \sin\mathring{u} - \mathring{u}\cos\mathring{u}\right)J_0(\delta\rho)\right]}_{=w_{22}} \tag{VII.60}$$

avec $w_{22}$ la fonction poids donnée par :

$$w_{22} = -ik_e^2\frac{ab\alpha}{\mathring{u}_1}(m_r^2-1)\left[-2\pi\frac{J_1(\delta)}{\delta} + \frac{1}{\mathring{u}^2}\left(\frac{1}{2}\mathring{u}^2 + \sin\mathring{u} - \mathring{u}\cos\mathring{u}\right)J_0(\delta\rho)\right] \tag{VII.61}$$

**Algorithme.** Tout comme ce qui a été fait précédemment, l'échantillonnage de $\rho$ selon la PDF optimisée se fait par la méthode de rejet (voir Encart 8). Ainsi, l'algorithme correspondant à la formulation intégrale Eq. VII.60 est identique à celui donné précédemment ; il suffit juste de remplacer $\mathring{u}_j$ par $\mathring{u}$ et de prendre Eq. VII.61 pour calculer le poids de Monte Carlo.

**Résultats.** Dans ce paragraphe, nous allons comparer les résultats obtenus sur l'estimation de l'écart type associé à l'estimation de la quantité $S_{22}$ en utilisant, d'une part, la PDF optimisée $p_{P_{opt,\mathring{u}}}(\rho)$ (voir Eq. VII.57), et d'autre part, une PDF uniforme notée $p_{P_{unif}}(\rho) = 1$. Fig. VII.8 représente l'écart type $\text{std}_{(\Re\text{e}\, S_{22})^\star}$ en fonction du paramètre de taille $x$. On constate que l'utilisation de la PDF optimisée permet de réduire de façon très significative la variance comparée à l'utilisation d'une PDF uniforme. Plus précisément, au regard de l'échelle sur les courbes, on constate qu'il y a au moins trois ordres de grandeur de gagnés. Fig. VII.9 représente l'écart type $\text{std}_{(\Re\text{e}\, S_{22})^\star}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ pour deux paramètres de taille ($x = 5$ et $x = 50$) et deux rapports d'élongation

($R = 0.2$ et $R = 0.9$). On constate alors, pour les configurations considérées, que l'utilisation de la PDF optimisée $p_{P_{opt,\hat{u}}}(\rho)$ permet de réduire significativement l'écart type pour les petits angles de diffusion et reste tout à fait acceptable pour les plus grands angles puisque l'écart type obtenu reste très proche de celui obtenu avec une PDF uniforme.

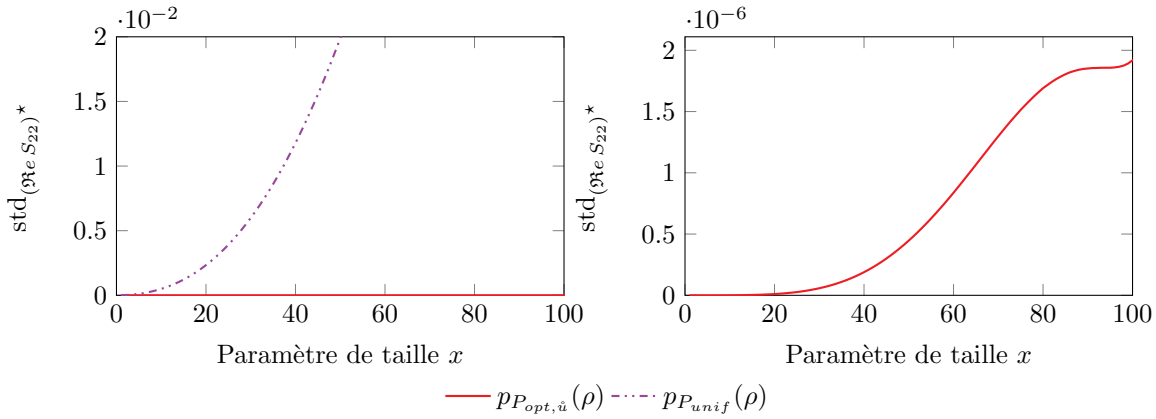



FIGURE VII.8 – Comparaison de l'écart type $\text{std}_{(\Re e\, S_{22})^\star}$ en fonction du paramètre de taille $x$ obtenu avec une PDF optimisée $p_{P_{opt,\hat{u}}}(\rho)$ et une PDF uniforme $p_{P_{unif}}(\rho)$. Étude réalisée sur une particule sphéroïdale. Paramètres : $R = 0.9$, $m_r = 1.02 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$, $\vartheta_{sca} = 3°$ et $N = 10^6$.

À l'issue de cette section, nous avons vu que l'utilisation d'une démarche de type zéro-variance permet de réduire significativement la variance des algorithmes, du moins pour les particules sphériques et sphéroïdales. À ce jour, la question reste encore ouverte pour généraliser ce qui a été fait ici sur des géométries complexes. L'une des difficultés est que contrairement au sphéroïde, nous ne disposons plus de données géométriques analytiques telles que les longueurs de traversées. Cela nous empêche notamment de calculer analytiquement l'intégrale angulaire sur $\phi$ comme nous l'avions fait pour le sphéroïde, ce qui nous avait permis d'isoler la source de variance. Ceci est dû au fait que la longueur de traversée dépendra également de la variable angulaire $\phi$ (en plus de celle de $\rho$). Il convient également de généraliser l'approche zéro-variance aux autres termes de la série de Born. C'est l'objet de la section suivante où nous montrerons notamment les difficultés rencontrées pour appliquer une telle approche.

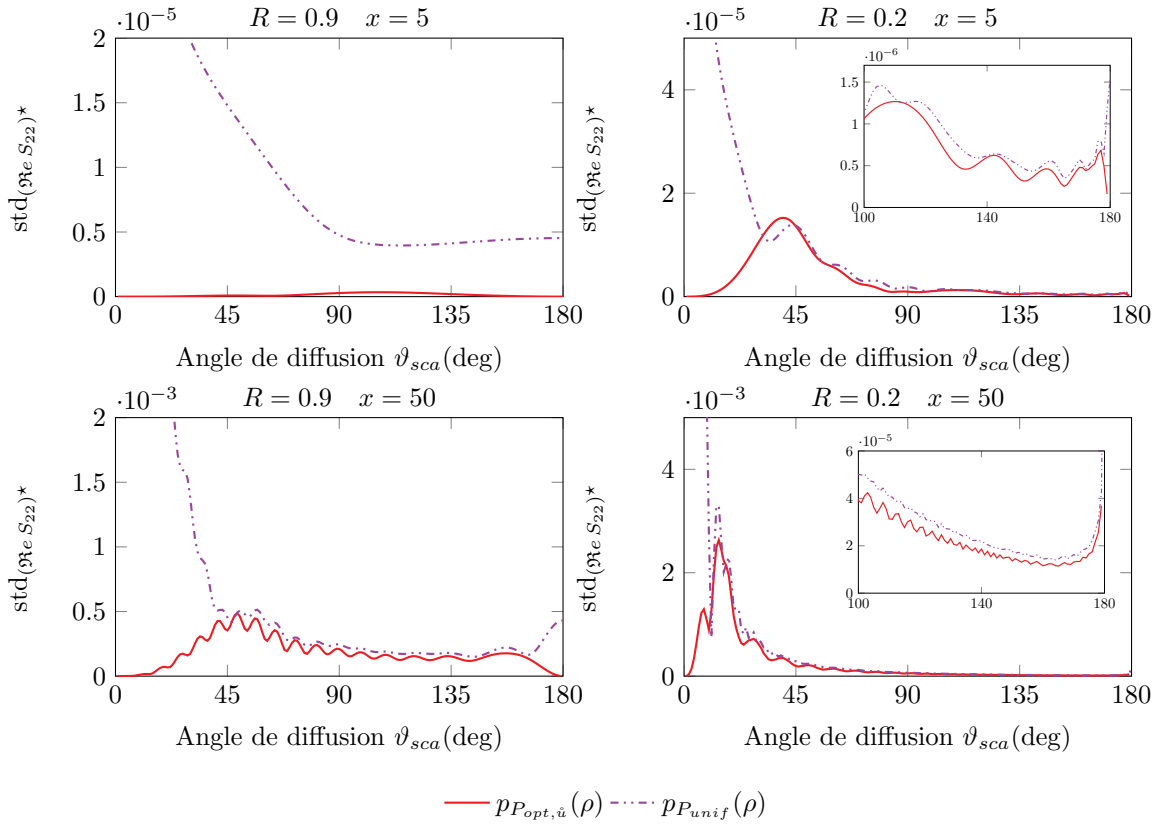



FIGURE VII.9 – Comparaison de l'écart type $\text{std}_{(\Re e\, S_{22})^\star}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ obtenu avec une PDF optimisée $p_{P_{opt,\hat{u}}}(\rho)$ et une PDF uniforme $p_{P_{unif}}(\rho)$. Étude réalisée sur une particule sphéroïdale. La première colonne correspond à une particule sphéroïdale d'élongation $R = 0.9$, la seconde à un rapport d'élongation $R = 0.2$. La première ligne correspond à un paramètre de taille de $x = 5$, la seconde à $x = 50$. Paramètres : $m_r = 1.02 - 0.005i$, $\lambda_e = 0.45\,\mu m$ et $N = 10^6$.

## VII.3 Vers une optimisation du développement en série de Born

L'objectif est ici de dégager quelques pistes de travail permettant de suivre une démarche de type zéro-variance pour traiter les termes d'ordres supérieurs à zéro de la série de Born. Il nous semble qu'une première étape devrait consister en l'optimisation d'un algorithme évaluant le développement de Born sous l'approximation scalaire des ondes (voir Sec. III.6). En utilisant les PDF optimisées pour l'approximation scalaire, on devrait déjà obtenir une réduction significative de la variance lors de l'évaluation du développement du champ vectoriel. Dans la suite, en plus d'utiliser l'approximation scalaire des ondes, nous nous concentrerons uniquement sur les intégrales (sans tenir compte des préfacteurs dans le développement de Born). Ces intégrales sont les seules responsables des difficultés de convergence numérique observées. Nous notons $\mathcal{B}_n$ le terme intégral d'ordre $n$. Par

exemple, le terme d'ordre 0 est donnée par :

$$\mathcal{B}_0 = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 \, e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} \tag{VII.62}$$

Cette intégrale intervient dans l'approximation de Born. En particulier, elle intervient dans le calcul de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ que nous avons étudiée précédemment. Elle a donc déjà fait l'objet d'une étude de type zéro-variance (voir Sec. VII.2). Les termes d'ordre supérieur présentent un schéma intégral différent. Dans le terme d'ordre zéro, la fonction de Green est prise sous l'hypothèse de champ lointain, ce qui simplifie l'expression. Dans les termes d'ordres supérieurs, il n'y a pas de simplification et nous avons donc la fonction de Green qui est notamment fonction de la distance $\|\vec{r}_q - \vec{r}_{q-1}\|$ entre deux positions successives. Le terme intégral d'ordre 1 s'écrit :

$$\mathcal{B}_1 = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 \, e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \, \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|}}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|} e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_1} \tag{VII.63}$$

En effectuant un changement de variable, il est possible de faire apparaître l'intégrale $\mathcal{B}_0$ dans l'expression de $\mathcal{B}_1$. En posant $\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + \rho_{01}\vec{\omega}_{01}$, avec $\rho_{01} = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|$ et $\vec{\omega}_{01} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_0}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|}$, l'élément de volume $d\vec{r}_1$ devient $d\vec{r}_1 = \rho_{01}^2 d\rho_{01} d\vec{\omega}_{01}$ et on obtient :

$$\mathcal{B}_1 = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 \, e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \iint_{4\pi} d\vec{\omega}_{01} \int_0^{l(\vec{r}_0,\vec{\omega}_{01})} d\rho_{01}\rho_{01}^2 \frac{e^{-ik_e\rho_{01}}}{\rho_{01}} e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0} e^{-ik_e\rho_{01}\vec{e}_i\cdot\vec{\omega}_{01}} \tag{VII.64}$$

En réorganisant les termes, il vient :

$$\mathcal{B}_1 = \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 \, e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}}_{\equiv\mathcal{B}_0} \underbrace{\iint_{4\pi} d\vec{\omega}_{01} \int_0^{l(\vec{r}_0,\vec{\omega}_{01})} d\rho_{01}\rho_{01} e^{-ik_e\rho_{01}(1+\vec{e}_i\cdot\vec{\omega}_{01})}}_{\equiv\mathcal{I}_1(\vec{r}_0)} \tag{VII.65}$$

où $l(\vec{r}_0, \vec{\omega}_{01})$ correspond à la distance de la première intersection entre la demi-droite d'origine $\vec{r}_0$ et de direction $\vec{\omega}_{01}$, et la frontière de la particule. La première intégrale (sur le volume de la particule) est identique au terme $\mathcal{B}_0$ d'ordre zéro pour lequel nous avons déjà utilisé le principe de zéro-variance pour obtenir une fonction densité de probabilité optimisée (même optimale dans le cas d'une sphère). Par contre, l'intégrale $\mathcal{I}_1(\vec{r}_0)$ nécessite un travail d'optimisation. À l'ordre $n = 2$, on a :

$$\mathcal{B}_2 = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 \, e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \, \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|}}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_0\|} e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_1} \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_2 \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|}}{\|\vec{r}_2 - \vec{r}_1\|} e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_2} \tag{VII.66}$$

En utilisant le même changement de variable que précédemment, avec $\vec{r}_2 = \vec{r}_1 + \rho_{12}\vec{\omega}_{12} = \vec{r}_0 + \rho_{01}\vec{\omega}_{01} + \rho_{12}\vec{\omega}_{12}$ et en réorganisant les termes, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_2 = &\underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 \, e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}}_{\equiv\mathcal{B}_0} \underbrace{\iint_{4\pi} d\vec{\omega}_{01} \int_0^{l(\vec{r}_0,\vec{\omega}_{01})} d\rho_{01}\,\rho_{01} e^{-ik_e\rho_{01}(1+\vec{e}_i\cdot\vec{\omega}_{01})}}_{\equiv\mathcal{I}_1(\vec{r}_0)} \\ &\times \underbrace{\iint_{4\pi} d\vec{\omega}_{12} \int_0^{l(\vec{r}_1,\vec{\omega}_{12})} d\rho_{12}\,\rho_{12} e^{-ik_e\rho_{12}(1+\vec{e}_i\cdot\vec{\omega}_{12})}}_{\mathcal{I}_2(\vec{r}_1,\vec{r}_0)}\end{aligned} \tag{VII.67}$$

Dans le terme $\mathcal{B}_2$, nous remarquons que le schéma intégral $\mathcal{I}$ se répète à l'identique. C'est encore vrai pour les termes d'ordres supérieurs. Ce constat est très intéressant dans la mesure où si l'on sait optimiser l'intégrale $\mathcal{I}_1$ (voir Eq. VII.65), alors on devrait rapidement être capable de faire de même pour les intégrales intervenant dans les termes d'ordres supérieurs. De plus, on remarque que l'intégrale sur la distance $\rho$ dans l'intégrale $\mathcal{I}$ possède une solution analytique, ce qui est à la base de l'approche zéro-variance :

$$\mathcal{I} = \iint_{4\pi} d\vec{\omega} \frac{1}{k_e^2(1+\vec{e}_i\cdot\vec{\omega})^2} \left[(1 + i\,k_e\,l(\vec{r},\vec{\omega})(1+\vec{e}_i\cdot\vec{\omega}))\, e^{-i\,k_e\,l(\vec{r},\vec{\omega})(1+\vec{e}_i\cdot\vec{\omega})} - 1\right] \quad \text{(VII.68)}$$

Pour aller plus loin dans l'application de l'approche zéro-variance sur le terme intégral $\mathcal{I}$ et construire une PDF optimisée pour les directions $\vec{\omega}$, il faudrait postuler une équation paramétrique pour la géométrie de la particule. En effet, l'intégrande dépend de la direction $\vec{\omega}$ via $l(\vec{r},\vec{\omega})$, c'est-à-dire via la géométrie de la particule. Cela nous empêche de calculer analytiquement l'intégrale sur $\vec{\omega}$ en toute généralité, exactement comme dans le cas de notre travail sur l'approximation de Born. Il faudra ici aussi suivre les mêmes étapes, en menant une première étude sur la sphère par exemple.

Nous sommes ici confrontés à une nouvelle difficulté. Elle provient du fait que l'intégrande dans $\mathcal{I}$ est une fonction de nombres complexes et il ne semble pas possible de mettre cette intégrande sous la forme d'une grandeur réelle (ou en partie) comme nous avions pu le faire dans le cas du terme $\mathcal{B}_0$ (nous avions utilisé notamment le fait que $\exp(-i\alpha) - \exp(i\alpha) = 2i\sin\alpha$). Une particularité de notre travail sur des grandeurs complexes avec la méthode de Monte Carlo est que nos algorithmes évaluent toujours simultanément au moins deux grandeurs : la partie réelle du champ électrique et sa partie imaginaire. Or, avec l'approche zéro-variance on construit des PDFs optimisées pour évaluer une seule grandeur. En effet, toute la démarche est basée sur un travail de formulation de la grandeur recherchée. On pourra donc déterminer une première fonction densité de probabilité optimisée pour l'évaluation de la partie réelle de $\mathcal{I}$ et une seconde pour sa partie imaginaire. Toutefois, si l'utilisation de la première PDF réduit la variance sur la partie réelle, elle peut aussi éventuellement dégrader la variance sur la partie imaginaire (et inversement). Une fois ces deux PDF obtenues (ce qui constitue vraisemblablement une première étape incontournable), il faudra, soit mener un travail spécifique pour savoir laquelle de ces PDF utiliser dans chaque termes $\mathcal{I}_1$, $\mathcal{I}_2$, ... en fonction de la grandeur que l'on souhaite évaluer au final, soit envisager de reformuler les intégrales de départ afin de traiter séparément les parties réelles et imaginaires avec leur PDF optimisée respectives. L'évaluation des propriétés radiatives, qui sont des grandeurs réelles, nous semble un bon premier objet d'étude. En particulier, la section efficace d'extinction, qui à partir du théorème optique s'exprime en fonction de la partie réelle du champ diffracté dans la direction avant, semble être un point de départ intéressant.

## VII.4 Conclusion

Dans ce chapitre, il a été question du principe de zéro-variance pour traiter la source de variance qui, ici, est due aux oscillations de l'intégrande qui sont d'autant plus importantes que le paramètre de taille est grand. Nous avons vu que suivre une telle approche permet de construire, à partir de considérations physiques et mathématiques sur la forme de la solution, une fonction densité de probabilité (PDF) optimisée permettant de diminuer la variance de l'algorithme. Cette démarche appliquée aux formulations intégrales de l'approximation de Born (indépendamment de son cadre de validité) pour une particule sphéroïdale a permis d'obtenir une PDF optimisée permettant de traiter de très grands paramètres de taille contrairement à une simple PDF uniforme.

En ce qui concerne les termes d'ordre supérieur dans le développement en série de Born, nous avons fait apparaître un schéma intégral qui se répète à l'identique à chaque ordre. Ainsi, la question de la réduction de la variance de l'algorithme évaluant le développement en série de Born se résume en la recherche d'une PDF optimisée pour ce schéma intégral seulement, ce qui est encourageant. Cependant, nous avons mis en évidence un enjeu conséquent d'une telle optimisation. Il faudra être en mesure d'optimiser une intégrale complexe, contrairement au cas de l'approximation de Born où nous avions réussi à nous ramener à une intégrale réelle (ce qui ne semble pas le cas ici). Or, la réduction conjointe de la variance sur les parties réelle et imaginaire avec une seule PDF optimisée semble difficilement envisageable. Il faudra dans un premier temps établir une PDF optimisée réduisant la variance de la partie réelle, et une seconde pour la partie imaginaire. Ensuite, on pourra se concentrer sur l'optimisation d'un algorithme évaluant une propriété radiative (*i.e.* une grandeur réelle) et déterminer si l'utilisation de ces PDFs aux différents étages de la formulation intégrale permet de réduire la variance, ou envisager de séparer le traitement des parties réelles et imaginaires.

# CHAPITRE VIII

# Conclusion

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude de la diffusion d'une onde électromagnétique par une suspension de particules non-sphériques, qui représente un enjeu majeur dans divers domaines de l'ingénierie et de la recherche (biomédical, astrophysique, océanographie, ...). En particulier, dans le domaine de l'ingénierie de la photosynthèse, ce type d'étude est nécessaire pour déterminer les propriétés radiatives des micro-organismes photosynthétiques afin d'optimiser les photobioréacteurs pour la production de biocarburants et de molécules d'intérêt qui seront séparées dans des bioraffineries. Cela requiert l'utilisation de dispositifs expérimentaux hautement spécialisés (chambre anéchoïque de l'Institut Fresnel, par exemple) ou des codes de calculs performants résolvant les équations de Maxwell. En particulier, nous avons vu que les méthodes numériques usuelles résolvant ces équations rencontrent des difficultés à la fois pour traiter des particules à géométries complexes et des distributions statistiques de paramètres tels que la taille, l'orientation ou la forme des particules. Ces limitations de calcul bien connues dans la littérature conduisent, dans de nombreuses études, à avoir recours à des approximations. Bien que ces dernières simplifient le modèle du problème de diffusion onde-particule, leurs implémentations numériques sont loin d'être évidentes notamment lorsqu'il s'agit de traiter des particules à géométries complexes, avec des distributions de taille, d'orientation et de forme.

L'objectif de cette thèse a été d'explorer, pour la première fois, la faisabilité d'utiliser la méthode de Monte Carlo (très employée en transfert radiatif) pour résoudre de manière statistique des formulations intégrales du champ électromagnétique, déduites des équations de Maxwell, en vue de calculer les propriétés radiatives. En particulier, nous avons entrepris la résolution de trois formulations intégrales qui sont bien documentées dans la littérature : l'approximation de Schiff, l'approximation de Born (aussi connue sous le nom d'approximation de Rayleigh-Gans-Debye) et le développement en série de Born qui représente le modèle complet.

Notre démarche a alors été de reformuler chacune des trois formulations intégrales afin d'écrire celles qui permettent de concevoir les algorithmes de Monte Carlo incluant les

avancées les plus récentes de la méthode grâce aux travaux de l'équipe Starwest (`http://www.starwest.ups-tlse.fr/`). En tant que méthode statistique, cette approche originale a permis de traiter directement les distributions statistiques de taille, d'orientation et de forme des particules pour un coût supplémentaire en temps de calcul négligeable devant celui obtenu avec une particule isolée. À titre d'illustration, le temps de calcul pour estimer toutes les propriétés radiatives (les trois sections efficaces, ainsi que la fonction de phase et sa cumulée tabulées pour 1000 angles) avec l'approximation de Schiff pour 35 longueurs d'onde se situe généralement autour de la minute et peut aller jusqu'à vingt minutes pour les micro-algues de grande taille qui sont les plus délicates à traiter, telles qu'*Arthospira platensis* (spiruline). Pour comparaison, le calcul des propriétés radiatives à une seule longueur d'onde pour un cylindre droit modélisant cette même micro-algue prenait un mois et demi il y a quelques années avec un code Matlab compilé développé à l'Institut Pascal. De plus, dans cette thèse la gestion de la géométrie complexe se fait à l'aide des outils de la synthèse d'images qui à partir d'un fichier CAO (Conception Assistée par Ordinateur) permettent de calculer de manière efficace les intersections entre un rayon lumineux et les objets qui interagissent avec celui-ci. Ici, nous avons utilisés ces outils pour suivre des chemins (et non des rayons lumineux) qui apparaissent dans les formulations statistiques que nous proposons. Il est à noter que cette méthodologie permet de séparer l'algorithme des données (géométries, morphologies des particules, ...) : on parle d'orthogonalité des données. En pratique, cela signifie qu'une fois l'algorithme résolvant le problème physique est codé, il peut être exécuté pour n'importe quelle géométrie de particule sans avoir à le modifier (il suffit de modifier le fichier CAO). Par ailleurs, à chaque fois que l'on évalue une grandeur, nos algorithmes incluent systématiquement le calcul de sensibilités. Ce dernier se fait sans augmentation significative du temps de calcul. Cela s'avère pratique pour aborder des problèmes d'optimisation de procédés ou pour propager l'incertitude d'un paramètre sur une grandeur considérée tel que nous l'avons vu avec les travaux communs avec l'Institut Fresnel (voir Sec. IV.3.2).

Les outils développés lors de ce travail, ont permis de résoudre complètement l'approximation de Born, y compris ses variantes, ainsi que l'approximation de Schiff. Plus précisément, nos algorithmes sont en mesure d'estimer les champs électriques (interne et diffusé) et la matrice amplitude de diffusion. Ce premier point est déjà très satisfaisant puisque c'est la première fois que notre équipe de recherche entreprend l'évaluation de grandeurs vectorielles et matricielles de nombres complexes par la méthode de Monte Carlo. En pratique, nous obtenons une estimation simultanée de la partie réelle et de la partie imaginaire de la grandeur. Outre ces grandeurs, nos algorithmes estiment également simultanément les propriétés radiatives d'une suspension de particules homogènes ténues avec des géométries complexes ainsi que leurs sensibilités par rapport à la longueur

d'onde, aux parties réelle et imaginaire de l'indice de réfraction. Pour les propriétés radiatives, nos algorithmes prennent en compte bien entendu les distributions statistiques de taille, d'orientation et de forme. Ces outils répondent dès à présent aux besoins de la communauté scientifique des photobioréacteurs qui cherche à connaître précisément les propriétés radiatives des micro-algues. Cette communauté dispose actuellement du logiciel Star-Schiff qui est un outil de calcul basé sur l'approximation de Schiff et qui a été développé par MésoStar suite aux travaux menés lors cette thèse. Dans le cadre de l'approximation de Born, l'algorithme est en place et validé. Il reste à présent l'étape de développement du logiciel.

Hormis le travail mené sur les approximations de Born et de Schiff, nous avons étudié le développement en série de Born qui est une solution exacte des équations de Maxwell. Nous avons établie une formulation originale en espace de chemin pour cette série, qui permet de déduire un algorithme de Monte Carlo pour sa résolution rigoureuse, sans avoir besoin de tronquer le développement. Toutefois, à ce stade, nous observons des difficultés de convergence numérique qui augmentent avec la taille de la particule. Nous avons identifié que ces difficultés deviennent d'autant plus délicates que l'ordre du développement est élevé. Certes, à l'issue de ce travail, nous ne sommes pas en mesure de fournir des résultats suffisamment précis pour toutes les configurations pour lesquelles la série de Born est définie, mais nous avons identifié la source de variance (les oscillations croissantes des champs internes avec le paramètre de taille) et exploré la façon dont nous pouvons réduire ces difficultés. Une des pistes que nous avons commencé à entreprendre est l'utilisation du principe de zéro-variance. À noter que si les nombres complexes ne posaient aucune difficulté pour l'évaluation d'une grandeur, ils deviennent une spécificité importante dans l'utilisation d'une approche de type zéro-variance.

Enfin, en ce qui concerne les perspectives de ce travail, elles sont nombreuses. Parmi elles, il va s'agir de lever le verrou bien identifié du calcul des propriétés radiatives pour des grandes particules à fort contraste d'indice. Ces dernières intéressent en particulier la communauté du génie des photo-procédés pour l'étude des photoréacteurs mettant en œuvre des particules solides telles que les semi-conducteurs. Nous avons exploré quelques pistes de recherche pour y parvenir. Dans un premier temps, il serait nécessaire d'appliquer le principe de zéro-variance au développement en série de Born pour améliorer la convergence des algorithmes. Une fois que cela sera en place, les développements utilisant des séries à rayon de convergence étendue (voir les séries proposées par Kleinman, Pankratov, Osnabrugge...) pourront être utilisées.

Une autre piste d'étude pouvant faire suite à cette thèse concerne le traitement des particules hétérogènes (c'est-à-dire avec un indice de réfraction de la particule non constant).

En ce qui concerne l'approximation de Born et le développement en série de Born, le travail formel a été donné dans ce manuscrit. Par contre, il reste à mener la mise en œuvre. Cela ne pose pas de difficultés particulières, si ce n'est celle de la gestion de la donnée. Par exemple, il faut connaître l'indice de réfraction en toute position du volume de la particule. Dans le cadre de l'approximation de Schiff, des travaux ont été initiés lors du post-doctorat de Guillaume Terree sur une particule sphérique avec une inclusion sphérique. Il convient d'étendre ce travail à d'autres géométries, en particulier celle du sphéroïde. Ceci permettrait de poursuivre l'interaction avec les collègues de l'Institut Fresnel qui ont préparé des particules analogues sphéroïdales contenant une hétérogénéité sphérique. Leurs résultats seront d'une aide très précieuse lors des phases de validations des algorithmes.

Concernant la modélisation des photo-procédés, la description statistique et les outils disponibles à la fin de cette thèse permettent déjà d'initier une réflexion sur la mise au point d'une stratégie de résolution unifiée du modèle multi-échelles du procédé (une thèse abordant ce sujet débute actuellement à l'Institut Pascal). Il s'agira de concevoir une formulation statistique d'un modèle de photo-procédés, en incluant la physique du transfert radiatif dans les systèmes de captation solaire et au sein du réacteur, ainsi que l'interaction onde-particule (traitée ici) et le couplage aux réactions de photosynthèse. En résolvant numériquement cette formulation par la méthode de Monte Carlo, nous espérons des gains en temps calcul considérables par rapport à une approche séquentielle (obtention des propriétés radiatives, puis résolution de l'équation de transfert radiatif, ...). L'idée est d'exploiter les mêmes avantages qui nous ont permis d'obtenir des temps de calcul identiques pour la simulation d'une particule isolée ou d'une suspension comportant une distribution statistique de paramètres (taille, forme, orientation).

Enfin, l'une des difficultés que nous avons rencontrée tout au long de ce manuscrit est la présence d'oscillations importantes dans les intégrandes. Ces dernières proviennent de la transformée de Fourier menant à écrire les équations de Maxwell dans le régime harmonique. Par conséquent, une piste qui mériterait d'être explorée est la résolution par la méthode de Monte Carlo des équations de Maxwell dans le domaine temporel.

# ANNEXE A

## Approche de Lorenz-Mie

Considérons une particule sphérique homogène de rayon $R_s$ et d'indice de réfraction complexe $m_p$ soumise à un rayonnement incident de nombre d'onde $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$. Les champs électrique $\vec{\mathscr{E}}$ et magnétique $\vec{\mathscr{H}}$ vérifient les équations de Maxwell et sont respectivement solutions des deux équations d'ondes vectorielles suivantes :

$$\vec{\triangle}\vec{\mathscr{E}} + k_e^2\vec{\mathscr{E}} = \vec{0} \tag{A.1}$$

$$\vec{\triangle}\vec{\mathscr{H}} + k_e^2\vec{\mathscr{H}} = \vec{0} \tag{A.2}$$

En supposant que pour une fonction scalaire $\psi$ donnée et un vecteur constant arbitraire $\vec{u}$ homogène à une longueur, on construit un vecteur $\vec{M}$ tel que $\vec{M} = \overrightarrow{\text{rot}}\,(\vec{u}\psi)$ impliquant que sa divergence est nulle, soit $\text{div}\,\vec{M} = 0$. À partir d'identités vectorielles, il est possible de montrer la relation suivante [Bohren and Huffman, 1983] :

$$\vec{\triangle}\vec{M} + k_e^2\vec{M} = \overrightarrow{\text{rot}}\,\left[\vec{u}(\triangle\psi + k_e^2\psi)\right] \tag{A.3}$$

Ainsi, $\vec{M}$ est solution de l'équation d'onde vectorielle si $\psi$ est solution de l'équation d'onde scalaire $\triangle\psi + k_e^2\psi = 0$. On arrive aux mêmes conclusions en introduisant également un second vecteur, noté $\vec{N}$, défini tel que $\vec{N} = \frac{\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{M}}{k_e}$ et vérifiant les mêmes propriétés que le vecteur $\vec{M}$. Ceci permet d'expliquer pourquoi, pour résoudre l'équation d'onde vectorielle, il convient de résoudre, dans un premier temps, l'équation d'Helmholtz scalaire. Pour résoudre cette équation dans le cas d'une particule sphérique, on utilise naturellement les coordonnées sphériques $(r, \theta, \varphi)$ ce qui permet d'écrire l'équation d'onde scalaire sous la forme :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + k^2\psi = 0 \tag{A.4}$$

On cherche alors les solutions sous la forme $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, ce qui conduit à un système de trois équations indépendantes :

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[k^2r^2 - n(n+1)\right]R = 0 \tag{A.5}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta = 0 \tag{A.6}$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi = 0 \tag{A.7}$$

où $m$ et $n$ sont deux entiers positifs ou nuls. La résolution de chacune de ces équations permet d'obtenir les fonctions $R, \Theta$ et $\Phi$, puis l'expression générale de la fonction $\psi$ qui correspond à la combinaison linéaire de ces deux équations qui sont chacune solution de Eq. A.3 :

$$\begin{aligned} \mathring{\psi}_{mn}^{(s)} &= \cos(m\varphi) P_n^m(\cos\theta) z_n^{(s)}(k_e r) \\ \check{\psi}_{mn}^{(s)} &= \sin(m\varphi) P_n^m(\cos\theta) z_n^{(s)}(k_e r) \end{aligned} \tag{A.8}$$

où les fonctions $P_n^m(cos\theta)$ sont les polynômes de Legendre associés, $z_n^{(1)} = j_n$ et $z_n^{(2)} = y_n$ désignent les fonctions de Bessel sphériques respectivement de première espèce et de seconde espèce. $z_n^{(3)} = h_n^{(1)}$ et $z_n^{(4)} = h_n^{(2)}$ désignent les fonctions de Hankel respectivement de premier et second ordre. Sur la base de Eq. A.8 et des définitions de $\vec{M}$ et $\vec{N}$ en posant $\vec{u} = \vec{r}$, on construit quatre vecteurs :

$$\begin{aligned} \vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(s)} &= \overrightarrow{\text{rot}}\,(\vec{r}\mathring{\psi}_{mn}^{(s)}) \\ \vec{M}_{\check{\psi}_{mn}}^{(s)} &= \overrightarrow{\text{rot}}\,(\vec{r}\check{\psi}_{mn}^{(s)}) \\ \vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(s)} &= \frac{1}{k_e}\overrightarrow{\text{rot}}\,(\vec{r}\mathring{\psi}_{mn}^{(s)}) \\ \vec{N}_{\check{\psi}_{mn}}^{(s)} &= \frac{1}{k_e}\overrightarrow{\text{rot}}\,(\vec{r}\check{\psi}_{mn}^{(s)}) \end{aligned} \tag{A.9}$$

Par la suite, les champs électrique $\vec{\mathscr{E}}$ et magnétique $\vec{\mathscr{H}}$ sont développés en harmoniques sphériques vectorielles en utilisant une combinaison linéaire des quatre précédents vecteurs (Eq. A.9) sous la forme suivante (par exemple pour le champ électrique incident) :

$$\vec{\mathscr{E}}_{inc} = \mathscr{E}_0 \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[ A_{mn}\vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(1)} + B_{mn}\vec{M}_{\check{\psi}_{mn}}^{(1)} + C_{mn}\vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(1)} + D_{mn}\vec{N}_{\check{\psi}_{mn}}^{(1)} \right] \tag{A.10}$$

où les coefficients $A_{mn}, B_{mn}, C_{mn}$ et $D_{mn}$ sont des constantes. Ces coefficients sont déterminés à partir des propriétés d'orthogonalités qui existent entre les fonctions $\vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}, \vec{M}_{\check{\psi}_{mn}}$, $\vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}}$ et $\vec{N}_{\check{\psi}_{mn}}$. Plus précisément, les couples $(\vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}, \vec{M}_{\check{\psi}_{mn}})$, $(\vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}, \vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}})$, $(\vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}, \vec{N}_{\check{\psi}_{mn}})$, $(\vec{M}_{\check{\psi}_{mn}}, \vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}})$, $(\vec{M}_{\check{\psi}_{mn}}, \vec{N}_{\check{\psi}_{mn}})$ et $(\vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}}, \vec{N}_{\check{\psi}_{mn}})$ sont orthogonaux, c'est-à-dire qu'il vérifie $\iint_{4\pi} \vec{U} \cdot \vec{V} d\vec{\omega} = 0$. Par conséquent, les coefficients $A_{mn}$, $B_{mn}$, $C_{mn}$ et $D_{mn}$ sont facilement calculés en utilisant des relations similaires à celle de $A_{mn}$ donnée pour exemple :

$$A_{mn} = \frac{\displaystyle\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \vec{\mathscr{E}}_{inc} \cdot \vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(1)} \sin\theta d\theta d\phi}{\displaystyle\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |\vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(1)}|^2 \sin\theta d\theta d\phi} \tag{A.11}$$

En utilisant ce qui précède ainsi que l'orthogonalité des fonctions sinus et cosinus, il est possible de montrer que $\forall (m,n) \in \mathbb{N}^2\ \vec{M}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(1)} = \vec{N}_{\check{\psi}_{mn}}^{(1)} = 0$. Pour les mêmes raisons, les vecteurs $\vec{M}_{\check{\psi}_{mn}}^{(1)}$ et $\vec{N}_{\mathring{\psi}_{mn}}^{(1)}$ s'annulent également, exceptés pour $m = 1$ [Bohren and

Huffman, 1983]. De plus, puisque le champ incident est fini à l'origine, la fonction de Bessel sphérique de première espèce $j_n$ apparaît la plus appropriée pour définir les fonctions $\mathring{\psi}_{1n}$ et $\check{\psi}_{1n}$ (voir Eq. A.8). Par conséquent, après calcul, des coefficients $B_{1n}$ et $C_{1n}$, on en déduit les expressions des développements en harmoniques sphériques des champs incidents électrique $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ et magnétique $\vec{\mathscr{H}}_{inc}$ :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{inc} &= \mathscr{E}_0 \sum_{n=1}^{+\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ \vec{M}^{(1)}_{\check{\psi}_{1n}} + i\vec{N}^{(1)}_{\mathring{\psi}_{1n}} \right] \\ \vec{\mathscr{H}}_{inc} &= -\frac{k_e}{\omega\mu_0} \mathscr{E}_0 \sum_{n=1}^{+\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ \vec{M}^{(1)}_{\mathring{\psi}_{1n}} - i\vec{N}^{(1)}_{\check{\psi}_{1n}} \right]\end{aligned} \tag{A.12}$$

En suivant la même démarche et en utilisant les mêmes raisons d'orthogonalité que pour le champ incident, il est possible d'écrire le développement en harmoniques sphériques du champ interne à la particule. En tenant compte des propriétés optiques de la particule, ce développement se met sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{int} &= \mathscr{E}_0 \sum_{n=1}^{+\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ m_r c_n \vec{M}^{(1)}_{\check{\psi}_{1n}} + i m_r d_n \vec{N}^{(1)}_{\mathring{\psi}_{1n}} \right] \\ \vec{\mathscr{H}}_{int} &= -\frac{m_r k_e}{\omega\mu_0} \mathscr{E}_0 \sum_{n=1}^{+\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ m_r d_n \vec{M}^{(1)}_{\mathring{\psi}_{1n}} - i m_r c_n \vec{N}^{(1)}_{\check{\psi}_{1n}} \right]\end{aligned} \tag{A.13}$$

où $c_n$ et $d_n$ sont deux coefficients donnés par :

$$c_n = \frac{m_r \Psi'_n(m_r x)\zeta_n(x) - m_r \Psi_n(x)\zeta'_n(x)}{m_r \Psi'_n(m_r x)\zeta_n(x) - \Psi_n(m_r x)\zeta'_n(x)} \tag{A.14}$$

$$d_n = \frac{m_r \Psi'_n(m_r x)\zeta_n(x) - m_r \Psi_n(x)\zeta'_n(x)}{\Psi'_n(m_r x)\zeta_n(x) - m_r \Psi_n(m_r x)\zeta'_n(x)} \tag{A.15}$$

où l'on a posé $x = k_e R_s$ le paramètre de taille. Les fonctions $\Psi_n(z)$ et $\zeta_n(z)$ sont les fonctions de Riccati-Bessel définies respectivement par $\Psi_n(z) = z j_n(z)$ et $\zeta_n(z) = z h_n^{(2)}(z)$. $\Psi'_n(z)$ et $\zeta'_n(z)$ désignant leurs dérivées par rapport à la variable $z$.

Enfin, en ce qui concerne le champ diffusé, les fonctions de Hankel apparaissent les plus adaptées pour définir les fonction $\mathring{\psi}_{1n}$ et $\check{\psi}_{1n}$ du fait de leur comportement asymptotique. Compte tenu de la convention de signe choisie ($e^{i\omega t}$), la fonction de Hankel de seconde espèce $h_n^{(2)}$ est utilisée correspondant à une onde sphérique sortante. Ainsi, les développements en harmoniques sphériques des champs diffusés électrique et magnétique

s'écrivent :

$$\begin{aligned}\vec{\mathscr{E}}_{sca} &= \mathscr{E}_0 \sum_{n=1}^{+\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ -a_n \vec{M}^{(4)}_{\check{\psi}_{1n}} - i b_n \vec{N}^{(4)}_{\mathring{\psi}_{1n}} \right] \\ \vec{\mathscr{H}}_{sca} &= -\frac{k_e}{\omega \mu_0} \mathscr{E}_0 \sum_{n=1}^{+\infty} (-i)^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ -b_n \vec{M}^{(4)}_{\mathring{\psi}_{1n}} + i a_n \vec{N}^{(4)}_{\check{\psi}_{1n}} \right]\end{aligned} \tag{A.16}$$

où les coefficients $a_n$ et $b_n$ sont donnés par :

$$a_n = \frac{\Psi'_n(m_r x)\Psi(x) - m_r \Psi_n(m_r x)\Psi'_n(x)}{\Psi'_n(m_r x)\zeta_n(x) - m_r \Psi_n(m_r x)\zeta'_n(x)} \tag{A.17}$$

$$b_n = \frac{m_r \Psi'_n(m_r x)\Psi(x) - \Psi_n(m_r x)\Psi'_n(x)}{m_r \Psi'_n(m_r x)\zeta_n(x) - \Psi_n(m_r x)\zeta'_n(x)} \tag{A.18}$$

Une fois les expressions de tous les champs obtenues, il est possible de déduire les éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ de la matrice amplitude de diffusion qui font notamment intervenir les coefficients $a_n$ (Eq. A.17) et $b_n$ (Eq. A.18) :

$$\begin{aligned}S_{11} &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ a_n \pi_n(\cos\theta) + b_n \tau_n(\cos\theta) \right] \\ S_{22} &= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \left[ b_n \pi_n(\cos\theta) + a_n \tau_n(\cos\theta) \right]\end{aligned} \tag{A.19}$$

où l'on a posé $\pi_n(\cos\theta) = \frac{P^1_n(\cos\theta)}{\sin\theta}$ et $\tau_n(\cos\theta) = \frac{dP^1_n(\cos\theta)}{d\theta} = \cos\theta\, \pi_n(\cos\theta) - \sin^2\theta\, \frac{d\pi_n(\cos\theta)}{d\cos\theta}$. En utilisant Eq. A.19 et les définitions des propriétés radiatives (voir Sec. I.2.4.3), on en déduit les propriétés radiatives d'une particule sphérique isolée. Après calcul, on obtient :

$$\hat{\sigma}_{ext} = \frac{2\pi}{k_e^2} \sum_{n=1}^{+\infty} (2n+1) \Re e[a_n + b_n] \tag{A.20}$$

$$\hat{\sigma}_{sca} = \frac{2\pi}{k_e^2} \sum_{n=1}^{+\infty} (2n+1) \left[ |a_n|^2 + |b_n|^2 \right] \tag{A.21}$$

pour les sections efficaces d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ et de diffusion $\hat{\sigma}_{sca}$, et

$$\hat{W}_{sca} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} \frac{2l+1}{n(l+1)} \left[ (a_n a_l^* + b_l b_l^*)(\tau_n \tau_l + \pi_n \pi_l) + (a_n b_l^* + a_l^* b_n)(\tau_n \pi_l + \pi_n \tau_l) \right] \tag{A.22}$$

pour la section efficace différentielle de diffusion.

# ANNEXE B

# Méthode EBCM - Extended Boundary Condition Method

***Remarque importante*** : Dans cette annexe concernant la méthode T-Matrix, nous utiliserons la convention $e^{-i\omega t}$ afin de respecter ce qui est fait la plupart du temps dans la littérature par les différents auteurs travaillant sur cette méthode. On aurait également pu écrire les équations à venir en remplaçant $i$ par $-i$ afin de respecter notre propre convention, à savoir $e^{+i\omega t}$ mais l'intérêt est limité ici puisqu'il ne s'agit que d'utiliser la méthode et non de la développer.

## B.1 Principe de l'approche T-Matrix

Considérons une particule quelconque soumise à une onde électromagnétique plane incidente. L'interaction onde-particule donne naissance à une onde diffusée. La méthode T-Matrix est basée sur la décomposition des champs incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ et diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}$ en harmoniques sphériques vectorielles comme suit :

$$\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[ a_{mn} \mathrm{Rg}\vec{M}_{mn}(k_e\vec{r}) + b_{mn} \mathrm{Rg}\vec{N}_{mn}(k_e\vec{r}) \right] \tag{B.1}$$

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[ p_{mn} \vec{M}_{mn}(k_e\vec{r}) + q_{mn} \vec{N}_{mn}(k_e\vec{r}) \right] \tag{B.2}$$

où $\vec{r} = r\vec{e}_r$ et les vecteurs $\mathrm{Rg}\vec{M}_{mn}, \vec{M}_{mn}, \mathrm{Rg}\vec{N}_{mn}$ et$\vec{N}_{mn}$ sont des vecteurs champs définis par Eq. B.3 [Mishchenko, 1991; Mishchenko et al., 1996, 2002]. Les vecteurs $\vec{M}_{mn}$ et $\vec{N}_{mn}$ assurent que le champ diffusé satisfait à la condition de rayonnement à l'infini ($i.e$ respecte la décroissance en $1/r$ du champ diffusé lorsque $r \to +\infty$). Le préfixe Rg indique que l'on utilise les fonctions de Bessel de première espèce $j_n$. L'absence de préfixe indique que l'on

utilise les fonctions de Hankel de première espèce $h_n^{(1)}$.

$$\begin{aligned}
\vec{M}_{mn}(k_e r,\theta,\varphi) &= (-1)^m d_n h_n^{(1)}(k_e r)\vec{C}_{mn}(\theta)e^{im\varphi}\\
\mathrm{Rg}\vec{M}_{mn}(k_e r,\theta,\varphi) &= (-1)^m d_n j_n(k_e r)\vec{C}_{mn}(\theta)e^{im\varphi}\\
\vec{N}_{nm}(k_e r,\theta,\varphi) &= (-1)^m d_n \left[\frac{n(n+1)}{k_e r}h_n^{(1)}(k_e r)\vec{P}_{mn}(\theta)+\frac{1}{k_e r}\frac{\mathrm{d}\left[k_e r h_n^{(1)}(k_e r)\right]}{\mathrm{d}(k_e r)}\vec{B}_{mn}(\theta)\right]e^{im\varphi}\\
\mathrm{Rg}\vec{N}_{mn}(k_e r,\theta,\varphi) &= (-1)^m d_n \left[\frac{n(n+1)}{k_e r}j_n(k_e r)\vec{P}_{mn}(\theta)+\frac{1}{k_e r}\frac{\mathrm{d}\left[k_e r j_n(k_e r)\right]}{\mathrm{d}(k_e r)}\vec{B}_{mn}(\theta)\right]e^{im\varphi}\\
\vec{B}_{mn}(\theta) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(d_{0m}^n(\theta)\right)\vec{e}_\theta+\frac{im}{\sin\theta}d_{0m}^n(\theta)\vec{e}_\varphi\\
\vec{C}_{mn}(\theta) &= \frac{im}{\sin\theta}d_{0m}^n(\theta)\vec{e}_\theta-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(d_{0m}^n(\theta)\right)\vec{e}_\varphi\\
\vec{P}_{mn}(\theta) &= d_{0m}^n(\theta)\vec{e}_r\\
d_n &= \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi n(n+1)}}
\end{aligned} \tag{B.3}$$

Les fonctions $d_{lm}^n(\theta)$, qui interviennent dans ces relations, sont les fonctions $d$ de Wigner définies par :

$$\begin{aligned}
&d_{lm}^n(\theta) = A_{lm}^n(1-\cos\theta)^{\frac{l-m}{2}}(1+\cos\theta)^{-\frac{l+m}{2}}\frac{d^{n-m}}{(d\cos\theta)^{n-m}}\left[(1-\cos\theta)^{n-l}(1+\cos\theta)^{n+l}\right],\\
&\text{pour } n \geqslant max(|l|,|m|)\\
&d_{lm}^n(\theta) = 0,\ \text{pour } n \leqslant max(|l|,|m|)
\end{aligned} \tag{B.4}$$

où l'on a posé

$$A_{lm}^n = \frac{(-1)^{n-m}}{2^n}\sqrt{\frac{(n+m)!}{(n-l)!(n+l)!(n-m)!}}$$

Pour une onde plane incidente $\vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) = \vec{\mathscr{E}}_{inc,0}e^{ik_e\vec{r}\cdot\vec{e}_i}$ (avec la convention $e^{-i\omega t}$), les coefficients $a_{mn}$ et $b_{mn}$ du développement en harmoniques sphériques vectorielles de ce champ incident (Eq. B.1) sont donnés par [Mishchenko, 1991; Mishchenko et al., 2002; Tsang et al., 2000]

$$a_{mn} = 4\pi(-1)^m i^n d_n \vec{C}_{mn}^*(\theta_i)\vec{\mathscr{E}}_{inc}e^{-im\varphi_i} \tag{B.5}$$

$$b_{mn} = 4\pi(-1)^m i^{n-1} d_n \vec{B}_{mn}^*(\theta_i)\vec{\mathscr{E}}_{inc}e^{-im\varphi_i} \tag{B.6}$$

où $*$ désigne le conjugué d'un nombre complexe. La linéarité des équations de Maxwell ainsi que la linéarité des conditions aux limites impliquent que les coefficients $p_{mn}$ et $q_{mn}$ (Eq. B.2) du champ diffusé sont reliés linéairement aux coefficients $a_{mn}$ (Eq. B.5) et

$b_{mn}$ (Eq. B.6) du champ incident via la matrice $\bar{\bar{T}}$ [Waterman, 1971; Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002] :

$$p_{mn} = \sum_{n'=1}^{+\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \left[ T^{11}_{mnm'n'} a_{m'n'} + T^{12}_{mnm'n'} b_{m'n'} \right] \tag{B.7}$$

$$q_{mn} = \sum_{n'=1}^{+\infty} \sum_{m'=-n'}^{n'} \left[ T^{21}_{mnm'n'} a_{m'n'} + T^{22}_{mnm'n'} b_{m'n'} \right] \tag{B.8}$$

qui sous forme matricielle s'écrit :

$$\begin{bmatrix} \vec{p} \\ \vec{q} \end{bmatrix} = \bar{\bar{T}} \begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\bar{T}}^{11} & \bar{\bar{T}}^{12} \\ \bar{\bar{T}}^{21} & \bar{\bar{T}}^{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{bmatrix} \tag{B.9}$$

Ceci signifie que le vecteur colonne des coefficients $\vec{p}$ et $\vec{q}$ de la décomposition du champ diffusé est obtenu en multipliant la matrice $\bar{\bar{T}}$ par le vecteur colonne des coefficients $\vec{a}$ et $\vec{b}$ de la décomposition du champ incident. Cette équation est la base de l'approche T-Matrix. Si la matrice $\bar{\bar{T}}$ est entièrement connue alors le champ diffusé ainsi que la matrice amplitude de diffusion peuvent être calculés. Il reste donc à savoir comment faire pour déterminer cette matrice $\bar{\bar{T}}$. Il existe différentes méthodes pour déterminer cette matrice dont l'originale, introduite par Waterman, est Extended Boundary Condition Method (EBCM) ou Null Field Method (NFM) [Waterman, 1965; Barber and Hill, 1990; Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002]. Plus tard, d'autres méthodes ont fait leurs apparitions telles que la méthode IIM (*Invariant Imbedding Method*) [Johnson, 1988], la méthode de séparation des variables utilisant une décomposition en base de fonctions sphéroïdales [Schulz et al., 1998], la méthode des moments des dipôles discrets (*Discrete Dipole Moment Method*) [Mackowski, 2002] ou encore la méthode PMM (*Point-Matching Method*) [Nieminen et al., 2003]. Dans la suite, nous présenterons brièvement la méthode EBCM qui est largement repris dans la littérature [Barber and Hill, 1990; Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002; Rother and Kahnert, 2014] et qui, en plus d'être la méthode historique, est toujours très utilisée.

## B.2 Méthode EBCM - Extended Boundary Condition Method

La méthode EBCM permet de calculer la matrice $\bar{\bar{T}}$ à partir d'une formulation intégrale en surface du champ diffusé. Plus précisément, cette matrice $\bar{\bar{T}}$ est donnée par :

$$\bar{\bar{T}} = -(\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}})\bar{\bar{Q}}^{-1} \tag{B.10}$$

où les éléments des matrices $\bar{\bar{Q}}$ et $\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}$ sont des intégrales de surface sur la particule qui pourront être évaluées numériquement. Par la suite, les éléments de la matrice $\bar{\bar{T}}$ sont des intégrales sur la surface de la particule dont les intégrandes font intervenir les produits vectoriels des fonctions harmoniques sphériques [Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002]. La matrice $\bar{\bar{T}}$ ne dépend que des caractéristiques physiques et géométriques de la particule : forme, paramètre de taille, indice de réfraction relatif, longueur d'onde et orientation par rapport à un repère de référence. En particulier, ceci signifie que la matrice $\bar{\bar{T}}$ est indépendante de la direction de propagation et de l'état de polarisation du champ incident ainsi que du champ diffusé. Ainsi, la matrice $\bar{\bar{T}}$ est calculée qu'une seule fois, et peut alors être utilisée pour calculer les propriétés de diffusion et d'absorption de la particule pour n'importe quels état de polarisation et direction de propagation du champ incident (c'est-à-dire n'importe quelle orientation de la particule). Ceci présente un immense avantage par rapport à d'autres méthodes numériques telles que DDA (*Discrete Dipole Approximation*, voir Sec. II.1.2.3) qui nécessite de refaire le calcul à chaque nouveau champ incident.

La méthode EBCM permet de calculer la matrice $\bar{\bar{T}}$ à partir d'une formulation intégrale en surface du champ diffusé. La détermination de ce champ diffusé passe par l'utilisation du second théorème de Green vectorielle-dyadique qui est donné par [Tai, 1987] :

$$\iiint_{\mathcal{V}} \left[ \vec{P} \cdot \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \bar{\bar{Q}} - (\overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \vec{P}) \cdot \bar{\bar{Q}} \right] d\vec{r} = \oiint_{\partial\mathcal{V}} \left[ (\vec{n} \wedge \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \vec{P}) \cdot \bar{\bar{Q}} + (\vec{n} \wedge \vec{P}) \cdot \overrightarrow{\mathrm{rot}}\, \bar{\bar{Q}} \right] d\vec{s} \tag{B.11}$$

avec $\partial\mathcal{V}$ la surface fermée du volume $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^3$, $\vec{n}$ un vecteur unitaire normale sortant et $d\vec{s}$ désigne un élément de surface. $\vec{P}$ et $\bar{\bar{Q}}$ sont deux fonctions, respectivement vectorielle et matricielle (dyadique), continues et différentiables sur le volume $\mathcal{V}$.

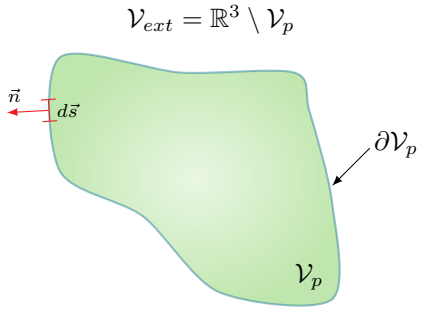



FIGURE B.1 – Représentation des notations pour l'utilisation du second théorème de Green vectorielle-dyadique. Une particule occupe un volume $\mathcal{V}_p$ de l'espace $\mathbb{R}^3$. $\mathcal{V}_{ext} = \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_p$ représente la région de l'espace privée de la particule. $d\vec{s}$ est un élément de la surface $\partial\mathcal{V}_p$ délimitant le volume de la particule et $\vec{n}$ un vecteur normal à la dite surface.

Dans notre cas, considérons une particule de volume $\mathcal{V}_p$ placée dans l'espace $\mathbb{R}^3$. Notons $\mathcal{V}_{ext} = \mathbb{R}^3 \setminus \mathcal{V}_p$ la région de l'espace privée de la particule (voir Fig. B.1). En vue d'appliquer le second théorème de Green vectorielle-dyadique (Eq. B.11), posons $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{ext}$. De ce fait, la surface fermée $\partial\mathcal{V}$ correspond alors à l'union de la surface fermée $\partial\mathcal{V}_p$ délimitant la particule et de la surface fermée à l'infini $\partial\mathbb{R}^3$, soit $\partial\mathcal{V} = \partial\mathbb{R}^3 \cup \partial\mathcal{V}_p$. Posons également $\vec{P} = \vec{\mathscr{E}}$ et $\bar{\bar{Q}} = \bar{\bar{G}}$, où $\bar{\bar{G}}$ est la dyade de Green définie par (avec la convention de la présente annexe) $\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}}{k_e^2}\right]\frac{e^{ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}}{4\pi\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}$. Ainsi, Eq. B.11 s'écrit :

$$\iiint_{\mathcal{V}_{ext}} \left[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)\cdot\overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0) - \left(\overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)\right)\cdot\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)\right] d\vec{r}_0 = \oiint_{\partial\mathbb{R}^3\cup\partial\mathcal{V}_p} \left[\left(\vec{n}\wedge\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0) + \left(\vec{n}\wedge\vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\overrightarrow{\text{rot}}\,\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0)\right] d\vec{s}_0 \quad \text{(B.12)}$$

Or, en utilisant le fait que $\vec{\mathscr{E}}$ et $\bar{\bar{G}}$ sont solutions des équations suivantes :

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}} - k_e^2\vec{\mathscr{E}} = \vec{0} \quad \text{(B.13)}$$

$$\overrightarrow{\text{rot}}\,\overrightarrow{\text{rot}}\,\bar{\bar{G}} - k_e^2\bar{\bar{G}} = \bar{\bar{1}}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \quad \text{(B.14)}$$

l'équation Eq. B.12 se simplifie :

$$\iiint_{\mathcal{V}_{ext}} \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)\cdot\bar{\bar{1}}\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)d\vec{r}_0 = \oiint_{\partial\mathbb{R}^3\cup\partial\mathcal{V}_p} \left[\left(\vec{n}\wedge\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0) + \left(\vec{n}\wedge\vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\overrightarrow{\text{rot}}\,\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0)\right] d\vec{s}_0 \quad \text{(B.15)}$$

Du fait de la présence de la fonction delta-Dirac, l'intégrale sur le volume vaut $\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})$ si $\vec{r} = \vec{r}_0 \in \mathcal{V}_{ext}$, sinon elle vaut $\vec{0}$. En utilisant l'équation de Maxwell-Faraday $\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\mathscr{E}} = i\omega\mu_0\vec{\mathscr{H}}$ (rappel convention de cette annexe $e^{-i\omega t}$), il vient

$$\left.\begin{array}{ll}\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) & \text{si } \vec{r}\in\mathcal{V}_{ext}\\ \vec{0} & \text{si } \vec{r}\notin\mathcal{V}_{ext}\end{array}\right\} = \oiint_{\partial\mathbb{R}^3\cup\partial\mathcal{V}_p} \left[i\omega\mu_0\left(\vec{n}\wedge\vec{\mathscr{H}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0) + \left(\vec{n}\wedge\vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\overrightarrow{\text{rot}}\,\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0)\right] d\vec{s}_0 \quad \text{(B.16)}$$

L'intégrale de surface peut s'écrire comme la somme de deux intégrales de surface : l'une sur la surface $\partial\mathbb{R}^3$ et l'autre sur $\partial\mathcal{V}_p$. Dans la mesure où la contribution du champ diffusé à l'infini est nulle, l'intégrale sur la surface à l'infini $\partial\mathbb{R}^3$ ne dépend donc pas de la particule et correspond au champ incident qui lui ne s'annule pas à l'infini. Ainsi,

$$\vec{\mathscr{E}}_{inc} = \oiint_{\partial\mathbb{R}^3} \left[i\omega\mu_0\left(\vec{n}\wedge\vec{\mathscr{H}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0) + \left(\vec{n}\wedge\vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0)\right)\cdot\overrightarrow{\text{rot}}\,\bar{\bar{G}}(\vec{s},\vec{s}_0)\right] d\vec{s}_0 \quad \text{(B.17)}$$

En utilisant Eq. B.17 et le fait que $\vec{\mathscr{E}} = \vec{\mathscr{E}}_{inc} + \vec{\mathscr{E}}_{sca}$, Eq. B.16 s'écrit :

$$\begin{cases} \vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}) = \oiint_{\partial\mathcal{V}_p} \left[ i\omega\mu_0 \left( \vec{n} \wedge \vec{\mathscr{H}}(\vec{s}_0) \right) \cdot \bar{\bar{G}}(\vec{s}, \vec{s}_0) + \left( \vec{n} \wedge \vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0) \right) \cdot \overrightarrow{\text{rot}}\, \bar{\bar{G}}(\vec{s}, \vec{s}_0) \right] d\vec{s}_0, \quad \text{si } \vec{r} \in \mathcal{V}_{ext} \\ \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) = -\oiint_{\partial\mathcal{V}_p} \left[ i\omega\mu_0 \left( \vec{n} \wedge \vec{\mathscr{H}}(\vec{s}_0) \right) \cdot \bar{\bar{G}}(\vec{s}, \vec{s}_0) + \left( \vec{n} \wedge \vec{\mathscr{E}}(\vec{s}_0) \right) \cdot \overrightarrow{\text{rot}}\, \bar{\bar{G}}(\vec{s}, \vec{s}_0) \right] d\vec{s}_0, \text{ si } \vec{r} \in \mathcal{V}_p \end{cases}$$

(B.18a)

(B.18b)

Eqs. B.18a et B.18b sont la base de la méthode EBCM pour déterminer la matrice $\bar{\bar{T}}$. Plus précisément, une fois que les champs $\vec{\mathscr{E}}$ et $\vec{\mathscr{H}}$ à la surface (extérieure) de la particule $\partial\mathcal{V}_p$ sont déterminés à l'aide de Eq. B.18b (puisque le champ incident est connu), il est possible de déterminer le champ diffusé qui est régit par l'équation Eq. B.18a. Pour ce faire, on utilise les relations de passage à la frontière qui nous indiquent notamment que le champ électrique tangentiel, *i.e.* $\vec{n} \wedge \vec{\mathscr{E}}$, est continu à la surface. Il en va de même pour le champ magnétique (en l'abscence de courant de surface). Ainsi, ces champs sont entièrement déterminés à partir du champ interne à la particule :

$$\vec{n} \wedge \vec{\mathscr{E}} = \vec{n} \wedge \vec{\mathscr{E}}_{int} \tag{B.19}$$

$$\vec{n} \wedge \vec{\mathscr{H}} = \vec{n} \wedge \vec{\mathscr{H}}_{int} \tag{B.20}$$

Afin de relier les coefficients $(p_{mn}, q_{mn})$ du champ diffusé (voir Eqs. B.7 et B.8) et les coefficients $(a_{mn}, b_{mn})$ (voir Eqs. B.5 et B.6), la dyade de Green $\bar{\bar{G}}$ ainsi que le champ interne $\vec{\mathscr{E}}_{int}$ sont également développés en harmoniques sphériques vectorielles [Tsang et al., 2000; Mishchenko et al., 2002] :

$$\vec{\mathscr{E}}_{int}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{m=-n}^{n} \left[ c_{mn} \text{Rg}\vec{M}_{mn}(k_p\vec{r}) + d_{mn} \text{Rg}\vec{N}_{mn}(k_p\vec{r}) \right] \tag{B.21}$$

où $k_p = k_e m_r(\vec{r})$ le nombre d'onde dans la particule et $m_r(\vec{r})$ l'indice complexe de réfraction relatif. La dyade de Green est quant à elle donnée par :

$$\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0) = ik_e \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} (-1)^m \begin{cases} \vec{M}_{-mn}(k_e r, \theta, \varphi) \otimes \text{Rg}\vec{M}_{mn}(k_e r_0, \theta_0, \varphi_0) & \\ \quad + \vec{N}_{-mn}(k_e r, \theta, \varphi) \otimes \text{Rg}\vec{N}_{mn}(k_e r_0, \theta_0, \varphi_0) & \text{si } r > r_0 \\ \text{Rg}\vec{M}_{-mn}(k_e r, \theta, \varphi) \otimes \vec{M}_{mn}(k_e r_0, \theta_0, \varphi_0) & \\ \quad + \text{Rg}\vec{N}_{-mn}(k_e r, \theta, \varphi) \otimes \vec{N}_{mn}(k_e r_0, \theta_0, \varphi_0) & \text{si } r < r_0 \end{cases}$$

(B.22)

où $\vec{r} \neq \vec{r}_0$. En injectant les équations Eqs. B.19, B.20, B.21 et B.22 dans Eq. B.18b, les coefficients $a_{mn}$ et $b_{mn}$ de la décomposition du champ incident sont reliés à ceux du champ

interne $c_{mn}$ et $d_{mn}$ par la matrice $\bar{\bar{Q}}$ :

$$\begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{bmatrix} = \bar{\bar{Q}} \begin{bmatrix} \vec{c} \\ \vec{d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\bar{Q}}^{11} & \bar{\bar{Q}}^{12} \\ \bar{\bar{Q}}^{21} & \bar{\bar{Q}}^{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{c} \\ \vec{d} \end{bmatrix} \tag{B.23}$$

En procédant de même avec Eq. B.18a, on relie les coefficients $p_{mn}$ et $q_{mn}$ de la décomposition du champ diffusé avec les coefficients $c_{mn}$ et $d_{mn}$ de la décomposition du champ interne par la matrice $-\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}$ :

$$\begin{bmatrix} \vec{p} \\ \vec{q} \end{bmatrix} = -\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}} \begin{bmatrix} \vec{c} \\ \vec{d} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}^{11} & \mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}^{12} \\ \mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}^{21} & \mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}^{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{c} \\ \vec{d} \end{bmatrix} \tag{B.24}$$

Finalement, en utilisant Eqs. B.23 et B.24, on en déduit que les coefficients du champ diffusé sont reliés à ceux du champ incident par :

$$\begin{bmatrix} \vec{p} \\ \vec{q} \end{bmatrix} = -\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}}\bar{\bar{Q}}^{-1} \begin{bmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{bmatrix} \tag{B.25}$$

Par comparaison avec l'équation Eq. B.9, on en déduit l'expression de la matrice $\bar{\bar{T}}$ :

$$\bar{\bar{T}} = -(\mathrm{Rg}\bar{\bar{Q}})\bar{\bar{Q}}^{-1} \tag{B.26}$$

# ANNEXE C

# Méthode DDA

Dans cette annexe, nous proposons de donner quelques compléments concernant le principe de la méthode DDA (*Discrete Dipole Approximation*) qui a été rapidement présentée dans Sec. II.1.2.3. On rappelle que l'idée principale de cette méthode est de remplacer le diffuseur (la particule) par un ensemble fini de dipôles qui sont en interactions entre eux et avec l'onde électromagnétique incidente. Afin d'éclaircir ce qui vient d'être dit, considérons une particule représentée par un ensemble de $N$ dipôles (voir Fig. C.1). Un dipôle $k$, $k \in [\![1, N]\!]$, est repéré par une position $\vec{r}_k$ et associé à un tenseur de polarisabilité $\bar{\bar{\alpha}}_k$. À la position $\vec{r}_k$ du dipôle $k$, le champ électrique $\vec{\mathscr{E}}_k = \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_k)$ correspond à la superposition du champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc,k} = \vec{\mathscr{E}}_{inc,}(\vec{r}_k)$ à la position $\vec{r}_k$ et aux contributions des champs diffusés par les $N-1$ autres dipôles :

$$\vec{\mathscr{E}}_k = \vec{\mathscr{E}}_{inc,k} - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{N} \bar{\bar{A}}_{kj} \vec{P}_j \tag{C.1}$$

où la quantité $-\bar{\bar{A}}_{kj}\vec{P}_j$ est le champ électrique à la position $\vec{r}_k$ qui est dû à la polarisation $\vec{P}_j = \bar{\bar{\alpha}}_j \vec{\mathscr{E}}_j$ du dipôle $j$ à la position $\vec{r}_j$. Sans donner les expressions des éléments de la matrice $\bar{\bar{A}}_{kj}$, qui sont explicités dans la référence [Draine and Flatau, 1994], il convient de noter que les éléments diagonaux de cette matrice dépendent de la polarisabilité et que les éléments non diagonaux ne dépendent que du nombre d'onde $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$, et de la distance entre deux dipôles $|\vec{r}_k - \vec{r}_j|$ [Draine, 1999]. En définissant $\bar{\bar{A}}_{kk} = \bar{\bar{\alpha}}_k^{-1}$, la matrice $\bar{\bar{A}}_{kj}$ est entièrement connue et tout l'enjeu maintenant est de calculer la polarisation $\vec{P}_j$ inconnue qui satisfait le système de $3N$ équations linéaires suivant :

$$\sum_{j=1}^{N} \bar{\bar{A}}_{kj} \vec{P}_j = \vec{\mathscr{E}}_{inc,k} \tag{C.2}$$

Une fois que Eq. C.2 est résolue et que toutes les polarisations $\vec{P}_j$ sont connues, il est possible d'obtenir les grandeurs relatives au problème de diffusion dont les sections efficaces d'extinction, d'absorption et de diffusion, la section efficace différentielle de diffusion ainsi que le champ diffusé [Draine, 1988; Draine and Flatau, 1994].

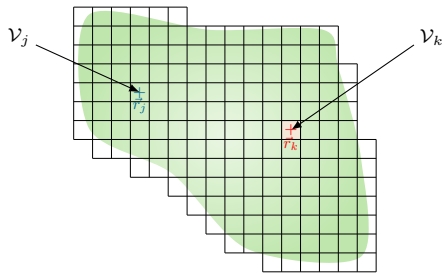



FIGURE C.1 – Discrétisation de la particule dans le cadre de la méthode DDA : exemple d'une discrétisation cubique.

Les fondements de la méthode DDA que nous venons brièvement d'exposer ont été très largement repris par les travaux de Draine et de ses collaborateurs [Draine, 1988; Draine and Flatau, 1994] qui ont développé davantage la méthode en mettant à disposition un code numérique en libre accès nommée DDSCAT [Draine and Flatau, 2013].

Une autre façon d'aborder la méthode DDA est de prendre pour point de départ la formulation intégrale volumique du champ diffusé qui est par suite discrétisée [Lakhtakia, 1992]. Ceci ne change en aucun cas les équations finales obtenues avec l'approche physique développée par Draine, mais permet d'avoir un regard mathématique détaillé de l'approximation pouvant fournir des éléments supplémentaires pour améliorer la méthode [Yurkin and Hoekstra, 2007]. Sans rentrer dans les détails de la méthode (le lecteur intéressé pourra se reporter à la référence suivante [Yurkin and Hoekstra, 2007]), nous allons toutefois en donner les grandes lignes. Ceci est d'autant plus intéressant ici dans la mesure où nous allons utiliser la même (ou quasiment) formulation intégrale volumique de départ. Le champ électrique à l'intérieur de la particule peut se mettre sous la formulation intégrale volumique générale suivante [Kahnert, 2003; Yurkin and Hoekstra, 2007] :

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) = \vec{\mathscr{E}}_{inc}(\vec{r}) + k_e^2 \iiint_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta} \bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\chi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0 + \bar{\bar{M}}(\mathcal{V}_\delta,\vec{r}) - \bar{\bar{L}}(\partial\mathcal{V}_\delta,\vec{r})\cdot\chi(\vec{r})\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \quad \text{(C.3)}$$

où l'on a posé :

$$\bar{\bar{L}}(\partial\mathcal{V}_\delta,\vec{r}) = -\oiint_{\partial\mathcal{V}_\delta} \frac{\vec{e}_r \otimes \vec{n}(\vec{s}_0)}{4\pi|\vec{r}-\vec{s}_0|} d\vec{s}_0 \quad \text{(C.4)}$$

et

$$\bar{\bar{M}}(\mathcal{V}_\delta,\vec{r}) = k_e^2 \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \left[\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\chi(\vec{r}_0)\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) - \bar{\bar{G}}_0(\vec{r},\vec{r}_0)\cdot\chi(\vec{r})\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})\right] d\vec{r}_0 \quad \text{(C.5)}$$

où $\chi$ est la susceptibilité électrique, $\bar{\bar{G}}$ la dyade de Green et $\bar{\bar{G}}_0$ la dyade de Green *statique* données par :

$$\bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}}{k_e^2}\right] \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}}{4\pi\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}$$
$$\bar{\bar{G}}_0(\vec{r},\vec{r}_0) = \frac{\overrightarrow{\text{grad}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}}{k_e^2} \left(\frac{1}{4\pi\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}\right)$$

Il s'agit ensuite de discrétiser la formulation Eq. C.3. Pour ce faire, considérons que le volume de la particule $\mathcal{V}_p$ est remplacé par $N$ sous-cellules (*i.e.* $N$ dipôles) $\mathcal{V}_j$, $j \in [\![1, N]\!]$, généralement identiques, de sorte que $\mathcal{V} = \bigcup_{j=1}^{N} \mathcal{V}_j$ et $\mathcal{V}_j \cap \mathcal{V}_k = \emptyset$ pour $j \neq k$. Considérons également que $\vec{r} \in \mathcal{V}_k$ et posons $\mathcal{V}_k = \mathcal{V}_\delta$. La taille des sous-cellules et le nombre de dipôles dépendent de la forme et de l'indice de réfraction de la particule ainsi que de la précision souhaitée [Wriedt et al., 2006]. La particule sera d'autant mieux représentée si les sous-cellules sont de très petites tailles devant la longueur d'onde, ce qui permettra d'avoir une bonne précision numérique au détriment du temps de calcul très longs. Il convient alors de trouver un bon compromis entre précision et temps de calcul afin de déterminer une taille appropriée de cellules suffisamment petites devant la longueur d'onde. Yurkin préconise de prendre une taille cellulaire de l'ordre de $\lambda_e/10$ [Yurkin and Hoekstra, 2007]. La discrétisation de Eq. C.3 permet alors d'écrire :

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) = \vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}) + k_e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{N} \iiint_{\mathcal{V}_j} \bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_j)\cdot\chi(\vec{r}_j)\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_j)d\vec{r}_j + \bar{\bar{M}}(\mathcal{V}_k,\vec{r}) - \bar{\bar{L}}(\partial\mathcal{V}_k,\vec{r})\cdot\chi(\vec{r})\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) \quad \text{(C.6)}$$

que l'on peut réécrire sous la forme :

$$\underbrace{\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}) - \bar{\bar{M}}(\mathcal{V}_k,\vec{r}) + \bar{\bar{L}}(\partial\mathcal{V}_k,\vec{r})\cdot\chi(\vec{r})\vec{\mathcal{E}}(\vec{r})}_{=\vec{\mathcal{E}}_{exc}(\mathcal{V}_k,\vec{r})} = \vec{\mathcal{E}}_{inc}(\vec{r}) + k_e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{N} \iiint_{\mathcal{V}_j} \bar{\bar{G}}(\vec{r},\vec{r}_j)\cdot\chi(\vec{r}_j)\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_j)d\vec{r}_j \quad \text{(C.7)}$$

Le terme à gauche de l'égalité, noté $\vec{\mathcal{E}}_{exc}(\mathcal{V}_k,\vec{r})$, est considéré comme étant le champ électrique qui excite le sous volume $\mathcal{V}_k$ [Lakhtakia and Mulholland, 1993; Kahnert, 2003]. Il correspond à la superposition du champ incident et des contributions, à la position $\vec{r}_k$, des champs électriques créés par les $N-1$ autres sous volumes $\vec{r}_j$, $j \neq k$. Sous l'hypothèse des grandes longueurs d'onde devant la taille de la sous-cellule (*long wave approximation*), le champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ et la susceptibilité électrique $\chi$ sont considérés comme constants dans chacune sous-cellules [Kahnert, 2003], ce qui se traduit par : $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_j) = \vec{\mathcal{E}}_j$ et $\chi(\vec{r}_j) = \chi_j$. Il est également d'usage de faire l'approximation que la dyade de Green $\bar{\bar{G}}$ est également constante au sein du sous-volume [Yurkin and Hoekstra, 2007]. Sous ces approximations et en utilisant le fait que $\vec{\mathcal{E}}_j = \left(\bar{\bar{I}} + (\bar{\bar{L}}_j - \bar{\bar{M}}_j)\bar{\bar{\chi}}_j\right)^{-1} \vec{\mathcal{E}}_j^{exc}$, le champ excité $\vec{\mathcal{E}}_{exc,k} = \vec{\mathcal{E}}_{exc}(\mathcal{V}_k,\vec{r})$

du $k^{ème}$ sous-volume, donné par Eq. C.7, s'écrit :

$$\vec{\mathscr{E}}_{exc,k} = \vec{\mathscr{E}}_{inc,k} + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq k}}^{N} \bar{\bar{G}}_{jk}\bar{\bar{\alpha}}_j\vec{\mathscr{E}}_{exc,j} \tag{C.8}$$

où $\bar{\bar{\alpha}}_j = V_j\chi_j\left(\bar{\bar{I}} + (\bar{\bar{L}}_j - \bar{\bar{M}}_j)\chi_j\right)^{-1}$ est le tenseur de polarisabilité, $V_j$ est le volume de la $j^{ème}$ cellule. On obtient, comme précédemment, un système de $3N$ équations linéaires qui va permettre de déterminer le champ excité dans chacun des sous-volumes. La connaissance de ce champ excité permet de calculer le moment dipolaire $\vec{p}_j$ de chacune des sous régions $\mathcal{V}_j$ via la relation $\vec{p}_j = \bar{\bar{\alpha}}_j\vec{\mathscr{E}}_{exc,j}$. Puis, une fois que ces moments dipolaires sont obtenus, il est alors possible d'obtenir le champ électrique diffusé, et par suite les propriétés radiatives.

# ANNEXE D

# Compléments sur l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye

## D.1 Expressions des facteurs de forme pour quelques géométries

### D.1.1 Facteur de forme d'une particule sphérique

L'objet de cette section est de démontrer, dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye, l'expression du facteur de forme $\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca})$ d'une particule sphérique de rayon $R_s$ et de volume $V_p = \frac{4}{3}\pi R_s^3$. Par définition, le facteur de forme est donné par :

$$\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca}) = \frac{1}{V_p} \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{ik_e(\vec{e}_s - \vec{e}_i)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \tag{D.1}$$

Dans la suite, nous introduisons la quantité $b = \vec{e}_q \cdot \vec{r}_0$ (voir Fig. D.1), où $\vec{e}_q = \frac{\vec{e}_s - \vec{e}_i}{\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|}$ est un vecteur unitaire. Ainsi, le facteur de forme $\mathcal{F}_{sph}$ d'une particule sphérique s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca}) &= \frac{1}{V_p} \int_{b=-R_s}^{R_s} \int_0^{\sqrt{R_s^2 - b^2}} \int_0^{2\pi} e^{ik_e\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|b} \rho db\, d\rho\, d\varphi \\
&= \frac{1}{V_p} \int_{b=-R_s}^{R_s} \pi R_s^2 (R_s^2 - b^2) e^{ik_e\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|b} db \\
&= \frac{1}{V_p} \int_{-1}^{1} \pi R_s^3 (1 - z^2) e^{ik_e R_s\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|z} dz
\end{aligned}$$

où l'on a effectué le changement de variable $b = zR_s$. Dans la suite, nous introduisons la quantité $u = x\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|$. Avec un peu de géométrie, nous avons :

$$\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|^2 = 2(1 - \cos\vartheta_{sca}) = 2\sin^2\frac{\vartheta_{sca}}{2} \tag{D.2}$$

Ainsi, en utilisant la relation précédente, il vient :

$$u = x\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\| = 2x\sin\frac{\theta_{sca}}{2} \tag{D.3}$$

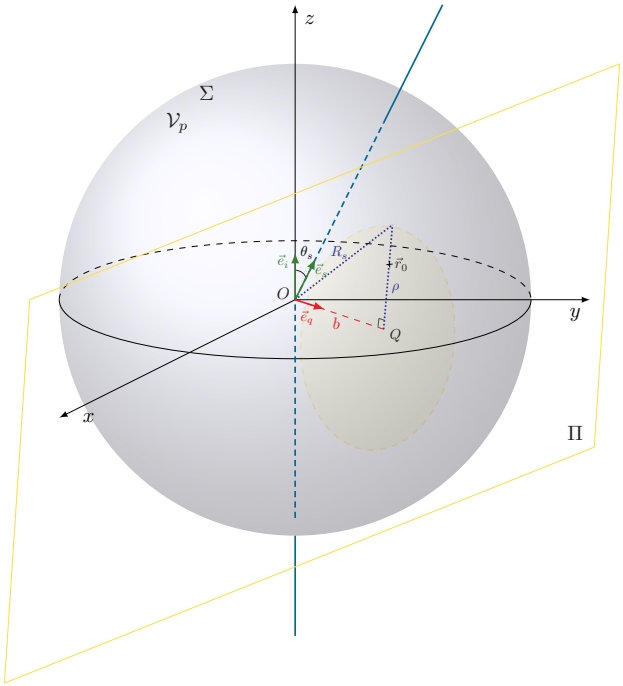



FIGURE D.1 – Représentation des notations utilisées pour le calcul du facteur de forme d'une particule sphérique $\Sigma$ de centre $O$, de rayon $R_s$ et de volume $V_p$. La quantité $b$ correspond à la distance $OQ$ où $Q$ est un point de la surface $\Sigma \cap \Pi$. $\Pi$ est le plan perpendiculaire à la bissectrice dirigée par $\vec{e}_q$ et passant par le point $\vec{r}_0$.

où $x = k_e R_s$ est le paramètre de taille de la particule sphérique. Ainsi, le facteur de forme s'écrit :

$$\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca}) = \frac{3}{4}\int_{-1}^{1}(1-z^2)e^{iuz}dz = \mathcal{F}_{sph}(u)$$

En décomposant le terme exponentiel sous la forme $e^{-iuz} = \cos(uz) - i\sin(uz)$, puis en utilisant les propriétés sur les intégrales de fonctions paire et impaire (notamment le fait que l'intégrale d'une fonction impaire sur l'intervalle $[-1,1]$ est nulle), il vient après deux intégrations par parties successives :

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_{sph}(u) &= \frac{3}{2}\int_0^1 (1-z^2)\cos(uz)dz = \frac{3}{2}\int_0^1 \cos(uz)dz - \frac{3}{2}\int_0^1 z^2\cos(uz)dz \\
&= \frac{3}{2}\frac{\sin u}{u} - \frac{3}{2}\left[\left[z^2\frac{\sin(uz)}{u}\right]_0^1 - \frac{2}{u}\int_0^1 z\sin(uz)dz\right] \\
&= -\frac{3}{u}\int_0^1 z\sin(uz)dz \\
&= \frac{3}{u}\left[-\left[z\frac{\cos(uz)}{u}\right]_0^1 + \frac{1}{u}\int_0^1\cos(uz)dz\right]
\end{aligned}$$

soit

$$\mathcal{F}_{sph}(u) = \frac{3}{u^3}\left[\sin u - u\cos u\right] \tag{D.4}$$

Introduisons les fonctions de Bessel $J_{-\frac{1}{2}}(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi u}}\cos u$ et $J_{\frac{1}{2}}(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi u}}\sin u$ ainsi que la relation de récurrence $J_{\frac{\alpha}{2}+1}(u) = \frac{1}{u}J_{\frac{\alpha}{2}}(u) - J_{\frac{\alpha}{2}-1}(u)$ avec $\alpha \in \mathbb{N}$. En particulier pour $\alpha = 1$, on obtient la relation suivante :

$$J_{\frac{3}{2}}(u) = \frac{1}{u}J_{\frac{1}{2}}(u) - J_{-\frac{1}{2}}(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi u^3}}\left[\sin u - u\cos u\right] \tag{D.5}$$

En injectant Eq. D.5 dans Eq. D.4, on en déduit que l'expression du facteur de forme pour une particule sphérique est donnée par :

$$\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca}) = \mathcal{F}_{sph}(u) = \sqrt{\frac{9\pi}{2u^3}}J_{\frac{3}{2}}(u) \tag{D.6}$$

### D.1.2 Facteurs de forme : sphéroïde et cylindre

Pour une particule sphéroïdale de rapport d'élongation $R = \frac{a}{b}$, le facteur de forme [Van de Hulst, 1957; Wyatt, 1968] s'écrit

$$\mathcal{F}_{sphde}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca}) = \sqrt{\frac{9\pi}{2u^3}}J_{\frac{3}{2}}(u) \tag{D.7}$$

où l'on a posé

$$u = 2k_e a \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\sqrt{1 + \left(\frac{1}{R^2} - 1\right)\cos^2\beta} \tag{D.8}$$

$$\cos\beta = -\cos\theta_0 \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} + \sin\theta_0 \cos\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\phi_{sca} \tag{D.9}$$

Pour une particule cylindrique, le facteur de forme $\mathcal{F}_{cyl}$ s'écrit :

$$\mathcal{F}_{cyl}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca}) = F(2k_e a \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\sin\beta)E(2k_e b \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\beta) \tag{D.10}$$

avec $\cos\beta$ donné par Eq. D.9 et

$$\begin{aligned} F(u) &= \frac{2}{u}J_1(u) \\ E(u) &= \sqrt{\frac{\pi}{2u}}J_{1/2}(u) \end{aligned} \tag{D.11}$$

où $J_1$ et $J_{1/2}$ sont les fonctions de Bessel respectivement d'ordre 1 et 1/2.

### D.1.3 Facteur de forme : cylindre avec extrémités sphériques

Le facteur de forme de la particule cylindrique avec extrémités sphériques, noté $\mathcal{F}_{cyl-hsph}$, est donné par [Shapovalov, 2015] :

$$\mathcal{F}_{cyl-hsph} = \frac{1}{V_p}\left[\mathcal{F}_{cyl}V_{cyl} + 2V_{hsph}\left(\mathcal{F}_{hsph}^{\mathfrak{Re}}\cos\left(\frac{k_3 H}{2}\right) - \mathcal{F}_{hsph}^{\mathfrak{Im}}\sin\left(\frac{k_3 H}{2}\right)\right)\right] \tag{D.12}$$

où $V_p = \pi R_s^2\left(H + \frac{4}{3}R_s\right)$ est le volume de la particule, $V_{cyl} = \pi R_s^2 H$ le volume du cylindre et $V_{hsph} = \frac{2}{3}\pi R_s^3$ le volume d'un hémisphère. $\mathcal{F}_{cyl}$ est le facteur de forme du cylindre donné par Eq. D.10, et $\mathcal{F}_{hsph} = \mathcal{F}_{hsph}^{\mathfrak{Re}} - i\mathcal{F}_{hsph}^{\mathfrak{Im}}$ le facteur de forme d'un hémisphère donné par :

$$\mathcal{F}_{hsph}^{\mathfrak{Re}} = \sqrt{\frac{9\pi}{2u}}\frac{J_{\frac{3}{2}}(u)}{u} \tag{D.13}$$

$$\mathcal{F}_{hsph}^{\mathfrak{Im}} = \frac{3}{k_4 R_s}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(k_3 R_s\cos t)J_1(k_4 R_s\sin t)\sin^2 t\,dt \tag{D.14}$$

avec $u = 2k_e R_s \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$, $k_3 = 2k_e\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\beta$ et $k_4 = 2k_e\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\sin\beta$, où $\cos\beta$ est donné par Eq. D.9. Le rapport d'élongation $R$ d'une telle particule est défini ici par :

$$R = \frac{R_s}{R_s + H/2} \tag{D.15}$$




FIGURE D.2 – Particule cylindrique avec extrémités sphériques de hauteur $H$ et de rayon $R_s$. Son rapport d'élongation $R$ est donné par $R = \frac{R_s}{R_s+H/2}$.

## D.2 Expression de l'efficacité de diffusion d'une particule sphérique

L'objet de cette section est de démontrer l'expression de l'efficacité de diffusion d'une particule sphérique de rayon $R_s$ dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye.

Pour ce faire, rappelons dans un premier temps l'expression de la section efficace de diffusion donnée par Eq. II.8, que nous rappelons ci-dessous :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \left(\frac{k_e^2}{2\pi}\right)^2 V_p^2 |m_r - 1|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})|^2 \frac{1 + \cos^2 \vartheta_{sca}}{2} \sin \vartheta_{sca} d\vartheta_{sca} d\phi_{sca} \quad \text{(D.16)}$$

où $V_p = \frac{4}{3}\pi R_s^3$ est le volume de la particule sphérique et $\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})$ est le facteur de forme qui pour une particule sphérique est donné par :

$$\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca}) = \mathcal{F}_{sph}(u) = \sqrt{\frac{9\pi}{2u^3}} J_{3/2}(u) = \frac{3}{u^3} \left[\sin u - u \cos u\right]$$

avec $u = 2x \sin \frac{\vartheta_{sca}}{2}$. Par conséquent, l'intégrande de $\hat{\sigma}_{sca}$ est indépendante de la variable $\phi_{sca}$. L'intégrale sur $\phi_{sca}$ est donc égale à $2\pi$, simplifiant l'expression de la section efficace de diffusion :

$$\hat{\sigma}_{sca} = \frac{4}{9}\pi x^4 R_s^2 |m_r - 1|^2 \int_0^{\pi} |\mathcal{F}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})|^2 (1 + \cos^2 \vartheta_{sca}) \sin \vartheta_{sca} d\vartheta_{sca} \quad \text{(D.17)}$$

L'efficacité de diffusion $\hat{Q}_{sca}$ étant donnée par $\hat{Q}_{sca} = \frac{\sigma_{sca}}{\pi R_s^2}$, il vient

$$\hat{Q}_{sca} = \frac{4}{9} x^4 |m_r - 1|^2 \mathcal{I} \quad \text{(D.18)}$$

où l'on a introduit l'intégrale $\mathcal{I}$ suivante :

$$\mathcal{I} = \int_0^{\pi} |\mathcal{F}_{sph}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca})|^2 (1 + \cos^2 \vartheta_{sca}) \sin \vartheta_{sca} d\vartheta_{sca} \quad \text{(D.19)}$$

En exprimant les termes $\sin \vartheta_{sca}$ et $1 + \cos^2 \vartheta_{sca}$ en fonction de la variable $u$, nous obtenons les relations suivantes :

$$\sin \vartheta_{sca} = 2 \sin \frac{\vartheta_{sca}}{2} \cos \frac{\vartheta_{sca}}{2} = \frac{u}{x} \cos \frac{\vartheta_{sca}}{2}$$

$$1 + \cos^2 \vartheta_{sca} = 1 + \left(1 - 2 \sin^2 \frac{\vartheta_{sca}}{2}\right)^2 = 2 - \frac{u^2}{x^2} + \frac{u^4}{4x^4}$$

Ainsi, en réalisant le changement de variable dans l'intégrale $\mathcal{I}$ (Eq. D.19), il vient

$$\mathcal{I} = \int_0^{\pi} \frac{u}{x^2} \left(2 - \frac{u^2}{x^2} + \frac{u^4}{4x^4}\right) \frac{9}{u^6} \left[\sin u - u \cos u\right]^2 du \quad \text{(D.20)}$$

En remarquant que $\left[\sin u - u \cos u\right]^2 = \frac{1}{2}\left[1 + u^2 + (u^2 - 1) \cos 2u - 2u \sin 2u\right]$, l'intégrale $\mathcal{I}$ peut également s'écrire

$$\mathcal{I} = \frac{9}{2x^2} \left[\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_3\right] \quad \text{(D.21)}$$

où l'on a introduit les intégrales suivantes :

$$\mathcal{I}_1 = 2 \int_0^{2x} \left[1 + u^2 + (u^2 - 1) \cos 2u - 2u \sin 2u\right] \frac{du}{u^5}$$

$$\mathcal{I}_2 = -\frac{1}{x^2} \int_0^{2x} \left[1 + u^2 + (u^2 - 1) \cos 2u - 2u \sin 2u\right] \frac{du}{u^3}$$

$$\mathcal{I}_3 = \frac{1}{4x^4} \int_0^{2x} \left[1 + u^2 + (u^2 - 1) \cos 2u - 2u \sin 2u\right] \frac{du}{u}$$

Ces trois intégrales sont calculées à l'aide d'intégrations par parties. Compte tenu du fait que les intégrandes ne sont pas définies en $u = 0$, nous noterons $\zeta$ la borne inférieure de ces intégrales et nous prendrons la limite lorsque $\zeta \to 0$ pour les évaluer. Après intégration par partie, il vient

$$\mathcal{I}_1 = \lim_{\zeta\to 0} 2\left[-\frac{1}{64x^4} - \frac{1}{8x^2} + \frac{\sin 4x}{16x^3} + \frac{\cos 4x}{64x^4} + \frac{1-\cos 2\zeta}{4\zeta^4} + \frac{1}{2a^2}\left(1 - \frac{\sin 2\zeta}{\zeta}\right)\right]$$
$$\mathcal{I}_2 = -\lim_{\zeta\to 0}\frac{1}{x^2}\left[\int_0^{2x}\frac{1-\cos 2u}{u}du - \frac{1}{8x^2} + \frac{\sin 4x}{2x} + \frac{\cos 4x}{8x^2} - 2 + \frac{1}{2\zeta^2}(1-\cos 2\zeta)\right]$$
$$\mathcal{I}_3 = \frac{1}{4x^4}\left[\int_0^{2x}\frac{1-\cos 2u}{u}du + 2x^2 + x\sin 4x + \frac{5}{4}\cos 4x - \frac{5}{4}\right]$$

Or

$$\lim_{\zeta\to 0}\left[\frac{1-\cos 2\zeta}{4\zeta^4} + \frac{1}{2a^2}\left(1 - \frac{\sin 2\zeta}{\zeta}\right)\right] = \frac{1}{2}$$
$$\lim_{\zeta\to 0}\frac{1}{2\zeta^2}(1-\cos 2\zeta) = 1$$

D'où

$$\mathcal{I}_1 = -\frac{1}{32x^4} - \frac{1}{4x^2} + \frac{\sin 4x}{8x^3} + \frac{\cos 4x}{32x^4} + 1 \tag{D.22}$$
$$\mathcal{I}_2 = -\frac{1}{x^2}\left[\int_0^{2x}\frac{1-\cos 2u}{u}du - \frac{1}{8x^2} + \frac{\sin 4x}{2x} + \frac{\cos 4x}{8x^2} - 2 - 1\right] \tag{D.23}$$
$$\mathcal{I}_3 = \frac{1}{4x^4}\left[\int_0^{2x}\frac{1-\cos 2u}{u}du + 2x^2 + x\sin 4x + \frac{5}{4}\cos 4x - \frac{5}{4}\right] \tag{D.24}$$

Finalement, en injectant Eqs. D.22, D.23 et D.24 dans Eq. D.21, il vient

$$\mathcal{I} = \frac{9}{4x^4}\left[\frac{5}{2} + 2x^2 - \frac{\sin 4x}{4x} - \frac{7}{16}\frac{1-\cos 4x}{x^2} + \left(\frac{1}{x^2} - 2\right)\int_0^{2x}\frac{1-\cos 2u}{u}du\right] \tag{D.25}$$

Or,

$$\int_0^{2x}\frac{1-\cos 2u}{u}du = \gamma + \ln 4x - \mathrm{Ci}(4x) \tag{D.26}$$

avec $\mathrm{Ci}(4x) = \int_{4x}^{+\infty}\frac{\cos h}{h}dh$ désignant la fonction cosinus intégrale. Ainsi,

$$\mathcal{I} = \frac{9}{4x^4}\left[\frac{5}{2} + 2x^2 - \frac{\sin 4x}{4x} - \frac{7}{16}\frac{1-\cos 4x}{x^2} + \left(\frac{1}{x^2} - 2\right)[\gamma + \ln 4x - \mathrm{Ci}(4x)]\right] \tag{D.27}$$

En injectant Eq. D.27 dans Eq. D.18, on en déduit l'expression de l'efficacité de diffusion $\hat{Q}_{sca}$ d'une particule sphérique de rayon $R_s$ :

$$\hat{Q}_{sca} = |m_r - 1|^2\left[\frac{5}{2} + 2x^2 - \frac{\sin 4x}{4x} - \frac{7}{16x^2}(1-\cos 4x) + \left(\frac{1}{2x^2} - 2\right)[\gamma + \ln 4x - \mathrm{Ci}(4x)]\right] \tag{D.28}$$

## D.3 Variantes de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye

### D.3.1 Modification proposée par Saxon

Nous avons vu dans le chapitre état de l'art que l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye (voir Sec. II.1.3.1) fait l'hypothèse que l'onde se propageant à l'intérieur de la particule est celle de l'onde plane incidente se propageant avec le nombre d'onde $k_e$. Cela conduit à calculer un facteur de forme qui est indépendant de l'indice de réfraction de la particule (voir Eq. II.6). Autrement dit, les positions angulaires des minimas et maximas de la fonction de phase sont indépendantes de l'indice de réfraction, ce qui est inexact. Afin d'inclure cette dépendance de l'indice de réfraction de la particule dans le facteur de forme, Saxon [Saxon, 1973] proposa que le nombre d'onde du champ incident se propageant dans la particule est $n_r k_e$ (celui du champ diffusé reste $k_e$). Cela revient à dire que le champ interne à la particule est donné par :

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}_0) \approx e^{-in_r k_e \vec{r}_0 \cdot \vec{e}_i} \vec{\mathcal{E}}_{0,inc} \tag{D.29}$$

Sous cette hypothèse, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}_{Saxon}$ s'écrit :

$$\bar{\bar{S}}^{Saxon}(\vec{e}_i, \vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(n_r\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{D.30}$$

Comme cela a été fait pour l'approximation classique, il est possible d'introduire le facteur de forme, qui ici s'écrit :

$$\mathcal{F}^{Saxon}(\vartheta_{sca}, \phi_{sca}) = \frac{1}{V_p} \iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-ik_e(n_r\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \tag{D.31}$$

En particulier, dans le cas d'une particule sphérique, le facteur de forme $\mathcal{F}^{Saxon}_{sph}$ est donné par Eq. D.1 mais en prenant cette fois-ci [Saxon, 1973] :

$$u = u^{Saxon} = x(1 + n_r^2 - 2n_r \cos\vartheta_{sca})^{\frac{1}{2}} \tag{D.32}$$

Cette quantité est démontrée dans Encart 9.

**Encart 9: Démonstration de Eq. D.32**

Nous démontrons ici l'expression de la quantité $u^{Saxon}$ pour une particule sphérique, donnée par Eq. D.32. Cette quantité $u^{Saxon}$ intervient lors du calcul du facteur de forme d'une particule sphérique via la différence de marche $\delta = k_e(\vec{e}_s - n_r\vec{e}_i) \cdot \vec{r}_0$ de la même manière que nous avons introduit $u = x\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|$ (voir Annexe D.1.1). Plus précisément, en tenant compte de la modification proposée par Saxon, la quantité

$u^{Saxon}$ est donnée par :

$$u^{Saxon} = x\|\vec{e}_s - n_r\vec{e}_i\| \tag{D.33}$$

En remarquant que

$$\|\vec{e}_s - n_r\vec{e}_i\|^2 = \|\vec{e}_s - \vec{e}_i + (1-n_r)\vec{e}_i\|^2 = \|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|^2 + 2(1-n_r)(\vec{e}_s - \vec{e}_i)\cdot\vec{e}_i + (1-n_r)^2$$

puis, en utilisant (voir Eq. D.2) d'une part $\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|^2 = 2(1-\cos\vartheta_{sca})$ et d'autre part $\vec{e}_s - \vec{e}_i = 2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\vec{e}_q$ (avec $\vec{e}_q = \frac{\vec{e}_s - \vec{e}_i}{\|\vec{e}_s - \vec{e}_i\|}$ un vecteur unitaire), il vient

$$\|\vec{e}_s - n_r\vec{e}_i\|^2 = 2(1-\cos\vartheta_{sca}) + 2(1-n_r)\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\vec{e}_q\cdot\vec{e}_i + (1-n_r)^2$$

Or $\vec{e}_q\cdot\vec{e}_i = -\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}$. Ainsi,

$$\begin{aligned}\|\vec{e}_s - n_r\vec{e}_i\|^2 &= 2(1-\cos\vartheta_{sca}) - 4(1-n_r)\sin^2\frac{\vartheta_{sca}}{2} + (1-n_r)^2\\ &= 2(1-\cos\vartheta_{sca}) - 4(1-n_r)\frac{1-\cos\vartheta_{sca}}{2} + 1 - 2n_r + n_r^2\\ &= 2(1-\cos\vartheta_{sca}) - 2(1-\cos\vartheta_{sca}) - 2n_r(1-\cos\vartheta_{sca}) + 1 - 2n_r + n_r^2\end{aligned}$$

soit après simplification

$$\|\vec{e}_s - n_r\vec{e}_i\|^2 = 1 + n_r^2 - 2n_r\cos\vartheta_{sca} \tag{D.34}$$

En injectant Eq. D.34 dans Eq. D.33, on en déduit l'expression de $u^{Saxon}$ initialement annoncée (voir Eq. D.32).

### D.3.2 Modification proposée par Shimizu

Comme Saxon, Shimizu [Shimizu, 1979, 1983] suppose que le champ incident se propage au sein de la particule avec un nombre d'onde égale à $n_r k_e$ (le champ interne est alors donné par Eq. D.29). Toutefois, contrairement à Saxon, Shimizu suppose également que le champ diffusé au sein de la particule se propage avec un nombre d'onde égale à $n_r k_e$ [1] Sous ces hypothèses, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}_{Shimizu}$ s'écrit :

$$\bar{\bar{S}}^{Shimizu}(\vec{e}_i,\vec{e}_s) = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r(\vec{r}_0)-1)\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-in_r k_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}d\vec{r}_0\, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{D.35}$$

Comme précédemment, on introduit le facteur de forme :

$$\mathcal{F}^{Shimizu}(\vartheta_{sca},\phi_{sca}) = \frac{1}{V_p}\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-in_r k_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0}d\vec{r}_0 \tag{D.36}$$

1. Ceci revient à modifier la phase de la fonction de Green, qui, en champ lointain s'écrit : $g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r}e^{in_r k_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}$

En particulier, dans le cas d'une particule sphérique, le facteur de forme $\mathcal{F}_{sph}^{Shimizu}$ est également donné par Eq. D.1 mais en prenant cette fois-ci :

$$u = u^{Shimizu} = 2n_r x \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \tag{D.37}$$

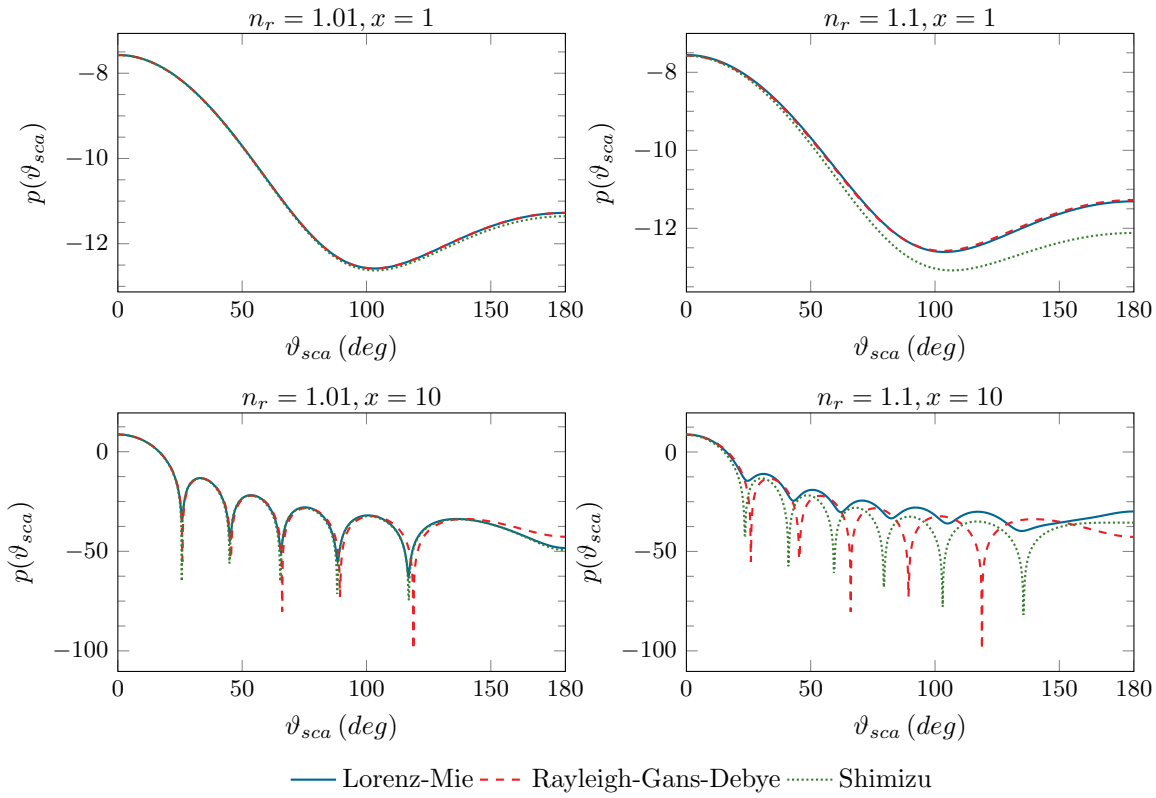



FIGURE D.3 – Fonction de phase $p(\vartheta_{sca})$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une particule sphérique isolée homogène non absorbante. Comparaison entre l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye et la modification proposée par SHIMIZU. La solution exacte est fournie par l'approche Lorenz-Mie. Deux paramètres de taille $x$ sont considérés : $x = 1$ (première ligne) et $x = 10$ (seconde ligne). Deux indices de réfraction réel $n_r$ sont également considérés : $n_r = 1.01$ (première colonne) et $n_r = 1.1$ (seconde colonne).

Comparé à l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye, la modification apportée par SHIMIZU améliore les positions angulaires des minimas et des maximas de la fonction de phase (voir Fig. D.3). Ceci est avantageux pour les communautés cherchant à estimer la taille des particules dans la mesure où il y a un lien entre la position des extremas et la taille du diffuseur considéré [Sharma and Somerford, 1988; Yadav and Sharma, 2008]. Fig. D.3 montre également que la variante de Shimizu est plus pertinente lorsque l'on augmente le paramètre de taille puisque le nombre et les positions des extremas sont plus proches de la solution de référence (approche de Lorenz-Mie). Néanmoins, comme on peut le constater sur Fig. D.3 (en particulier les courbes où $n_r = 1.1$), les positions

des extremas sont certes mieux déterminées mais la valeur de la fonction de phase peut s'écarter de la valeur de référence voir même de la valeur fournie par l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye classique (voir notamment le cas $n_r = 1.1$ et $x = 1$). L'objet du paragraphe suivant est de présenter la proposition émise par Gordon pour diminuer ces écarts.

### D.3.3 Modification proposée par Gordon

Pour diminuer les écarts précédemment mentionnés, Gordon [Gordon, 1985] propose, pour une particule sphérique, d'écrire le champ électrique interne à la particule sous la forme :

$$\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}_0) \approx \mathscr{E}_{0,inc} e^{-in_r k_e \vec{e}_i \cdot \vec{r}_0} \vec{u}_p^{\,i} + \gamma(u) \mathscr{E}_{0,inc} e^{-ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \vec{u}_p^{\,s} \tag{D.38}$$

où $\vec{u}_p^{\,i}$ et $\vec{u}_p^{\,s}$ sont respectivement les vecteurs polarisations de l'onde incidente et diffusée, $\gamma$ est une fonction dépendante de la taille de la sphère, de la polarisation incidente et de l'angle de diffusion. La quantité $u$ est identique à celle donnée par Eq. D.32 obtenue dans le cadre de la modification proposée par Saxon.

En faisant l'hypothèse que si $\vec{u}_p^{\,i}$ est perpendiculaire au plan de diffusion formé par les vecteurs unitaires $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$ alors $\vec{u}_p^{\,s} = \vec{u}_p^{\,i}$ et que si $\vec{u}_p^{\,i}$ appartient au plan de diffusion alors $\vec{u}_p^{\,s}$ appartient également à ce plan et l'on a $\vec{u}_p^{\,s} = \cos\vartheta_{sca} \vec{u}_p^{\,i}$. Ces considérations permettent d'obtenir la matrice amplitude de diffusion :

$$\bar{\bar{S}}^{Gordon} = -\frac{ik_e^2}{2\pi}(m_r - 1) \iiint_{\mathcal{V}_p} \left[ e^{-ik_e(n_r \vec{e}_i - k_e \vec{e}_s)\cdot \vec{r}_0} + \gamma(u) \right] d\vec{r}_0 \, P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \tag{D.39}$$

Le facteur de forme est alors défini par :

$$\mathcal{F}^{Gordon}_{sph}(u) = \sqrt{\frac{9\pi}{2u^3}} |J_{\frac{3}{2}}(u)| + \gamma(u) \tag{D.40}$$

Il convient de noter que dans l'expression précédente, la valeur absolue de $J_{\frac{3}{2}}(u)$ est présente car Gordon fait également l'hypothèse que $\gamma$ et $J_{\frac{3}{2}}(u)$ doivent être de même signe. Pour la fonction $\gamma$, Gordon propose d'utiliser pour sa simplicité la fonction $\gamma = u^{-2/3}$.

L'apport de Gordon permet de mieux évaluer l'amplitude des extremums (voir Figs. D.4 et D.5). Toutefois, cette extension n'est pas pertinente pour des petits paramètres de taille comme on peut le constater Fig. D.5 pour $x = 2$. Pour améliorer cela et s'approcher de la solution exacte, Zhao et al. [Zhao et al., 2006] ont proposé une formulation de la fonction de phase valable lorsque la taille de la particule est comparable à la longueur d'onde.

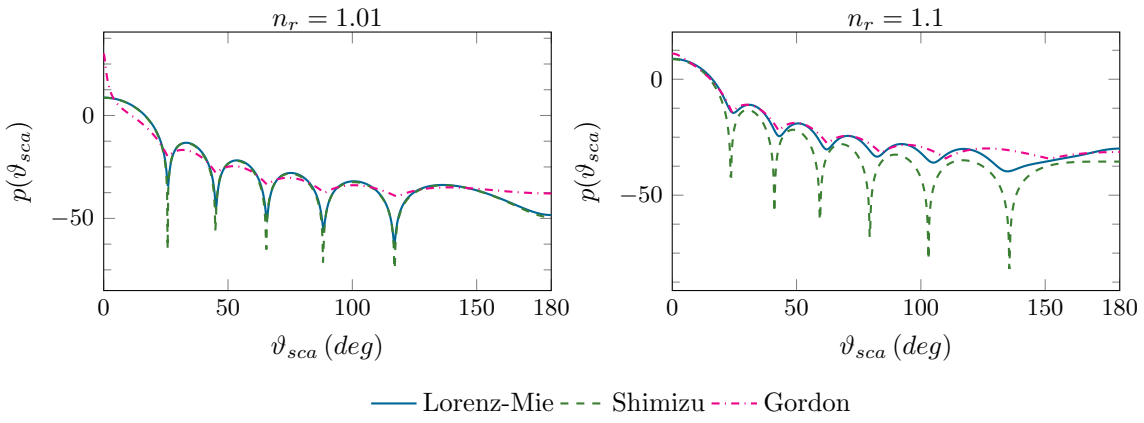



FIGURE D.4 – Fonction de phase $p(\vartheta_{sca})$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une particule sphérique isolée de paramètre de taille $x = 10$ pour deux indices de réfraction relatif réels $n_r = 1.01$ et $n_r = 1.1$. Comparaison entre les variantes de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye proposées par SHIMIZU et par GORDON. La solution exacte fournie par l'approche exacte de Lorenz-Mie est également représentée.

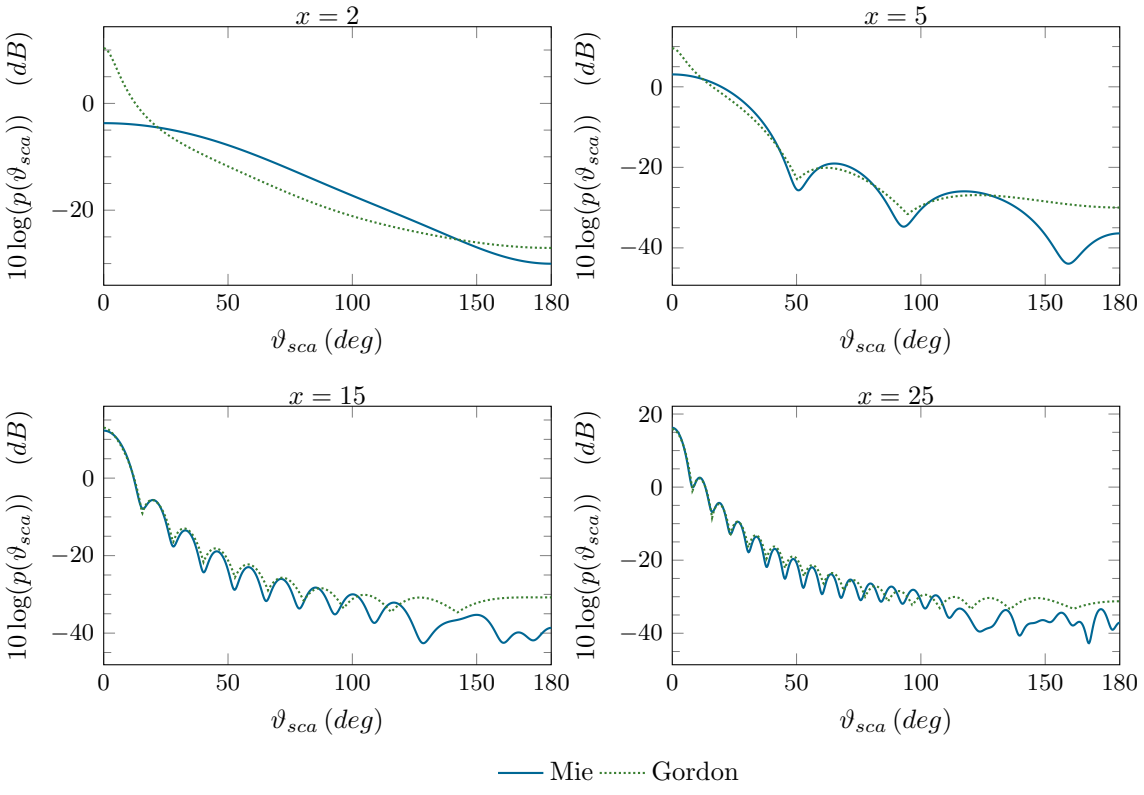



FIGURE D.5 – Fonction de phase $p(\vartheta_{sca})$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ d'une particule sphérique isolée d'indice de réfraction relatif réel $n_r = 1.1$ et pour quatre paramètres de taille $x = 2, x = 5, x = 15$ et $x = 25$. Comparaison entre l'approche rigoureuse de Lorenz-Mie et la modification de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye proposée par GORDON.

### D.3.4 Modification proposée par Kómar

Les précédentes modifications de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye ont surtout permis d'améliorer la fonction de phase. D'autres auteurs ont travaillé sur l'efficacité de diffusion en vue d'améliorer les résultats de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye lorsque l'on augmente les contrastes d'indice. En effet, dès que l'on souhaite augmenter les contrastes d'indice, l'approximation Rayleigh-Gans-Debye est moins pertinente car les déviations des rayons dues au gradient d'indice entre la particule et son milieu environnant sont considérées comme négligeables. Afin de tenir compte de l'indice de réfraction relatif dès lors que ce dernier augmente, Kómar et *al.* [Kómar et al., 2013] ont proposé une variante de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye pour une particule sphérique. Ils proposent alors d'écrire le facteur de forme de la façon suivante :

$$\mathcal{F}_{sph}^{Kómar}(\vartheta_{sca},\phi_{sca}) = \frac{1}{\mathcal{V}_p}\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{ik_e[(\vec{e}_s-\vec{e}_i)\cdot\vec{r}_0-(n_r-1)(l_1+l_2)]}e^{-\kappa_r k_e(l_1+l_2)}d\vec{r}_0 \tag{D.41}$$

où $l_1$ représente la distance entre le point d'intersection du rayon incident avec la sphère jusqu'à une position de diffusion $\vec{r}_0$, $l_2$ est la distance depuis la position de diffusion $\vec{r}_0$ jusqu'à la sortie de la particule. À noter que la formule proposée tient compte de l'absorption qui est présente le long du chemin $l_1+l_2$ (via le terme $e^{-\kappa_r k_e(l_1+l_2)}$). Suite à cette écriture du facteur de forme, ils proposent une expression simplifiée mais analytique de l'efficacité de diffusion $\hat{Q}_{sca}$ [Kómar et al., 2013] pour des particules vérifiant $|m_r| \lesssim 2$. Ceci permet d'avoir des résultats plus proches de la solution exacte de Lorenz-Mie par rapport à ceux que l'on obtient avec l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye classique, notamment dès lors qu'il s'agit de traiter des particules avec des indices de réfraction plus élevés (voir Fig. D.6). Pour une particule sphérique de rayon $R_s$, ils montrent que l'efficacité de diffusion s'écrit :

$$\hat{Q}_{sca}^{Komar} = \hat{Q}_{sca}\frac{9}{64}\left[\frac{1-e^{-4\check{q}R_s}}{\check{q}R_s} + \frac{1-e^{-4\check{q}R_s}\left[8(\check{q}R_s)^2+4\check{q}R_s+1\right]}{4(\check{q}R_s)^3} + \frac{e^{-4\check{q}R_s}(4\check{q}R_s+1)-1}{2(\check{q}R_s)^2}\right]^2 \tag{D.42}$$

avec $\check{q} = k_e\sqrt{0.05\kappa_r|m_r-1|}$ et $\hat{Q}_{sca}$ l'efficacité de diffusion de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye fournie par Eq. D.28.

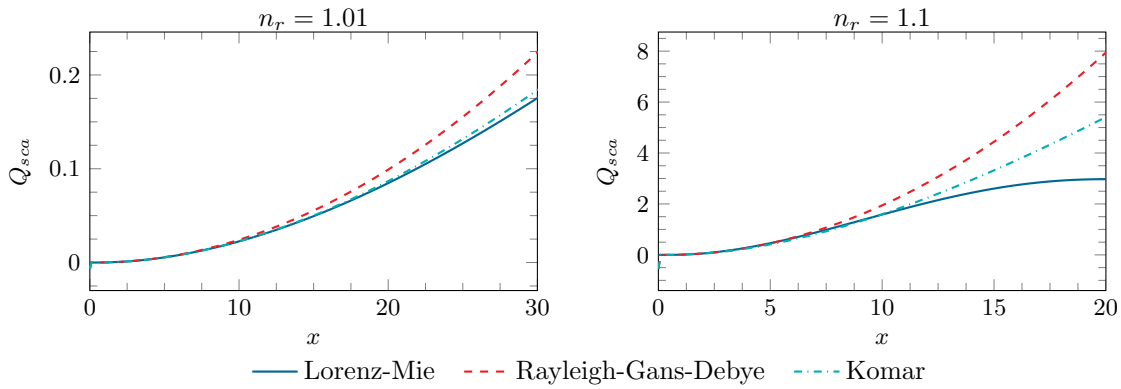



FIGURE D.6 – Efficacité de diffusion $\hat{Q}_{sca}$ d'une particule sphérique isolée en fonction du paramètre de taille $x$ pour deux indices de réfraction relatif réels $n_r = 1.01$ et $n_r = 1.1$. Comparaison de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye modifiée par Komar avec l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye classique et l'approche de Lorenz-Mie.

### D.3.5 Extensions des variantes de Saxon et Shimizu aux géométries cylindriques et sphéroïdales

Les modifications de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye proposées par Saxon et Shimizu ont initialement été établies pour des particules sphériques avant d'être étendues à d'autres géométries telles que le cylindre infini [Sharma and Somerford, 1988] et le sphéroïde [Yadav and Sharma, 2008]. Dans le cas du sphéroïde, Yadav et *al.* fournissent les expressions du facteur de forme $\mathcal{F}(u)$ données par Eq. D.7, où $u$ est donné par :

$$u^{Shimizu} = 2n_r x \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\sqrt{1+\left(\frac{1}{R^2}-1\right)\cos^2\beta}$$

$$u^{Saxon} = x(1+n_r^2-2n_r\cos\vartheta_{sca})\sqrt{1+\left(\frac{1}{R^2}-1\right)\cos^2\beta}$$

avec $\cos\beta$ donnée par Eq. D.9.

# ANNEXE E

# Compléments sur l'approximation de la diffraction anomale

Dans cette annexe, nous allons établir l'expression de l'amplitude de diffusion dans le cadre de l'approximation de la diffraction anomale. Pour ce faire, considérons une particule homogène soumise à une onde plane incidente se propageant suivant $\vec{e}_i$ et vérifiant les conditions de validité $x \gg 1$ (Eq. II.11) et $|m_r - 1| \ll 1$ (Eq. II.12). Notons $\mathcal{Q}$ le plan situé derrière la particule et perpendiculaire à la direction de l'onde incidente. Notons également $\mathcal{P}$ la surface projetée de la particule sur ce plan $\mathcal{Q}$. Soit $\vec{r}_0$ une position sur le plan $\mathcal{P}$. Considérons d'une part un rayon incident (*i.e.* parallèle à $\vec{e}_i$) passant par $\vec{r}_0$ en traversant la particule sur une distance notée $l(\vec{r}_0)$, et d'autre part un rayon parcourant la même distance mais à l'extérieur de la particule. On observe alors une différence de marche entre ces deux rayons qui s'écrit : $\delta = m_p l(\vec{r}_0) - n_e l(\vec{r}_0) = n_e l(\vec{r}_0)(m_r - 1)$, soit une différence de phase $\varphi = \frac{2\pi}{\lambda_0}\delta = k_e l(\vec{r}_0)(m_r - 1)$ où l'on a posé le nombre d'onde $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$ avec la longueur d'onde dans le milieu environnant $\lambda_e = \frac{\lambda_0}{n_e}$. $m_p$ et $n_e$ sont respectivement les indices de réfraction de la particule et de son milieu environnant. Dans la mesure où ces deux rayons ne diffèrent que par leur phase (et non pas leur amplitude), la présence de la particule ne modifie pas l'amplitude du champ électrique en une position du plan $\mathcal{Q}$ mais seulement sa phase. Plus précisément, en une position $\vec{r}_0$ du plan $\mathcal{Q}$ le champ électrique total s'écrit :

$$\mathscr{E}(\vec{r}_0) = \begin{cases} \mathscr{E}_{0,inc} e^{-ik_e(m_r-1)l(\vec{r}_0)} & \text{si } \vec{r}_0 \in \mathcal{P} \\ \mathscr{E}_{0,inc} & \text{si } \vec{r}_0 \notin \mathcal{P} \end{cases} \tag{E.1}$$

Puisque $\mathscr{E} = \mathscr{E}_{inc} + \mathscr{E}_{sca}$, l'amplitude du champ diffusé $\mathscr{E}_{sca}$ est donnée par :

$$\mathscr{E}_{sca}(\vec{r}_0) = \begin{cases} \mathscr{E}_{0,inc}\left(e^{-ik_e(m_r-1)l(\vec{r}_0)} - 1\right) & \text{si } \vec{r}_0 \in \mathcal{P} \\ 0 & \text{si } \vec{r}_0 \notin \mathcal{P} \end{cases} \tag{E.2}$$

Le principe de Huygens-Fresnel nous indique que chacun des points de la surface projetée $\mathcal{P}$ émettent une onde sphérique. L'amplitude complexe en une position $\vec{r}_0$ correspond à la somme des amplitudes complexes de chacune de ces ondes sphériques émises. Le théorème de Babinet nous permet de dire que la diffraction obtenue par une particule soumise

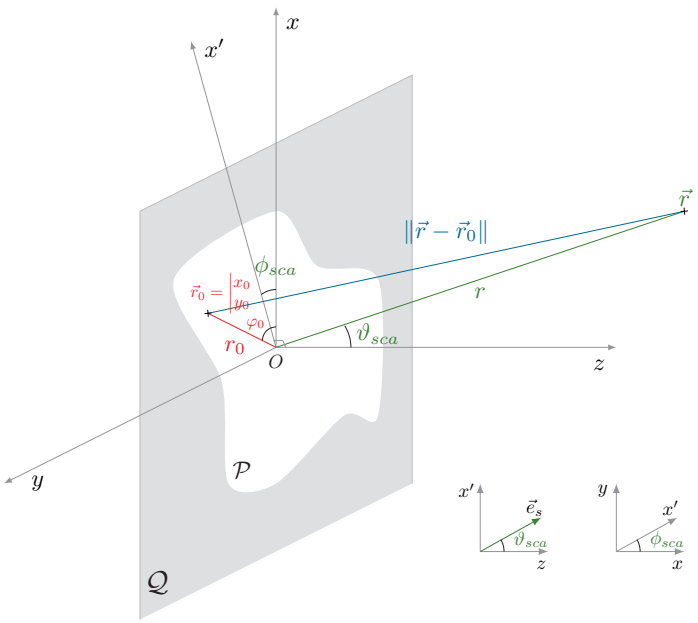



FIGURE E.1 – Représentation schématique de la diffraction de Fraunhofer.

à un rayonnement incident est identique à celle qui serait obtenue par un diaphragme dont l'ouverture correspond à la surface projetée de la particule. Nous pouvons alors utiliser les résultats de la diffraction de Fraunhofer (voir Fig. E.1) qui fournie l'expression de l'amplitude complexe du champ diffracté en champ lointain. Plus précisément, l'amplitude du champ diffracté $\mathscr{E}_{sca}(\vec{r})$ en une position $\vec{r}$ située loin de la particule est :

$$\mathscr{E}_{sca}(\vec{r}) = \frac{ik_e}{2\pi} \iint_{\mathcal{P}} \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}}{\|\vec{r}-\vec{r}_0\|} \mathscr{E}_{sca}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \tag{E.3}$$

où

$$\|\vec{r}-\vec{r}_0\| = r\sqrt{1+\frac{r_0^2}{r^2} - 2\frac{r_0}{r}\sin\vartheta_{sca}\cos(\phi_{sca}-\varphi_0)}$$

où les coordonnées de $\vec{r}$ et $\vec{r}_0$ sont données par

$$\vec{r} = \begin{vmatrix} r\sin\vartheta_{sca}\cos\phi_{sca} \\ r\sin\vartheta_{sca}\sin\phi_{sca} \\ r\cos\vartheta_{sca} \end{vmatrix} \qquad \vec{r}_0 = \begin{vmatrix} r_0\cos\varphi_0 \\ r_0\sin\varphi_0 \\ 0 \end{vmatrix}$$

où en particulier $\vartheta_{sca}$ est l'angle entre la direction incidente $\vec{e}_i$ et la direction d'observation $\vec{e}_s$. Puisque $r_0 \ll r$, il vient en effectuant un développement limité à l'ordre 1, $\|\vec{r}-\vec{r}_0\| \approx r - r_0\sin\vartheta_{sca}\cos(\varphi_0-\phi_{sca})$. De plus, en notant $x_0 = r_0\cos\varphi_0$ et $y_0 = r_0\sin\varphi_0$ les coordonnées de la position $\vec{r}_0$, la distance $\|\vec{r}-\vec{r}_0\|$ peut également s'écrire : $\|\vec{r}-\vec{r}_0\| \approx r - \sin\vartheta_{sca}\left[x\cos\phi_{sca} + y\sin\phi_{sca}\right]\cos(\varphi_0-\phi_{sca})$. Par ailleurs, la quantité $\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}$ est approchée par $\frac{1}{r}$. Ainsi, en utilisant ce qui précède, Eq. E.3 s'écrit :

$$\mathscr{E}_{sca}(\vec{r}) = \frac{ik_e}{2\pi}\frac{e^{-ik_e r}}{r} \iint_{\mathcal{P}} e^{ik_e(x_0\cos\phi_{sca}+y_0\sin\phi_{sca})\sin\vartheta_{sca}} \mathscr{E}_{sca}(\vec{r}_0) dx_0 dy_0 \tag{E.4}$$

Par définition de l'amplitude de diffusion $S$, il vient

$$S(\vartheta_{sca}) = \frac{k_e}{2\pi} \iint_{\mathcal{P}} e^{ik_e(x_0 \cos\phi_{sca} + y_0 \sin\phi_{sca}) \sin\vartheta_{sca}} \left[\mathscr{E}_{sca}(\vec{r}_0) - 1\right] dx_0 dy_0 \tag{E.5}$$

**Illustration : calcul des sections efficaces pour une particule sphérique isolée.** À titre d'illustration, considérons une particule sphérique homogène isolée de rayon $R_s$. En effectuant le changement de variable $x_0 = r_0 \cos\varphi_0$, $y_0 = r_0 \sin\varphi_0$, $r_0 = R_s \sin\tau$ et $dx_0 dy_0 = r_0 dr_0 d\varphi_0 = R_s^2 \cos\tau \sin\tau d\tau d\varphi_0$ dans Eq. E.5, l'amplitude de diffusion s'écrit :

$$S(\vartheta_{sca}) = k_e R_s^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left[e^{-ik_e(m_r-1)l(\tau)} - 1\right] J_0(k_e R_s \sin\vartheta_{sca}) \cos\tau \sin\tau d\tau \tag{E.6}$$

où $J_0(k_e R_s \sin\vartheta_{sca} \sin\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ik_e R_s \sin\vartheta_{sca} \sin\tau \cos\beta} d\beta$ est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre 0. $l(\tau)$ représente la longueur de traversée de la particule, qui pour une sphère vaut $l(\tau) = 2R_s \sin\tau$. En particulier, lorsque $\vartheta_{sca} = 0$, Eq. E.6 devient :

$$S(0) = k_e R_s^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left[e^{-2ik_e R_s(m_r-1)\sin\tau} - 1\right] \cos\tau \sin\tau d\tau \tag{E.7}$$

En intégrant par partie, cette intégrale est analytique et s'écrit :

$$S(0) = k_e R_s^2 \left[\frac{e^{-i\zeta}}{-i\zeta} + \frac{1}{\zeta^2}(e^{-i\zeta} - 1) - \frac{1}{2}\right] \tag{E.8}$$

où l'on a posé $\zeta = 2x(m_r - 1)$ avec le paramètre de taille $x = k_e R_s$.

En appliquant le théorème optique, on en déduit l'expression de la section efficace d'extinction :

$$\hat{\sigma}_{ext} = \frac{4\pi}{k_e} \Re e \left[\frac{e^{-i\zeta}}{i\zeta} - \frac{1}{\zeta^2}(e^{-i\zeta} - 1) + \frac{1}{2}\right] = \pi R_s^2 \hat{Q}_{ext} \tag{E.9}$$

où l'efficacité de de diffusion $\hat{Q}_{ext}$ s'écrit après calcul :

$$\hat{Q}_{ext} = 2 - 4\frac{e^{-\zeta_I}}{\zeta_R^2 + \zeta_I^2}\left[\zeta_R\left(1 + \frac{2\zeta_I}{\zeta_R^2 + \zeta_I^2}\right)\sin\zeta_R - \left(\zeta_I - \frac{\zeta_R^2 - \zeta_I^2}{\zeta_R^2 + \zeta_I^2}\right)\cos\zeta_R\right] + 4\frac{\zeta_R^2 - \zeta_I^2}{(\zeta_R^2 + \zeta_I^2)^2} \tag{E.10}$$

où $\zeta = \zeta_R - i\zeta_I$ avec $\zeta_R = 2x(n_r - 1)$ et $\zeta_I = 2x\kappa_r$.

En ce qui concerne la section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$, il suffit de calculer l'intégrale (voir Eq. II.16) :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \iint_{\mathcal{P}} \left[1 - e^{-2k_e \kappa_r l(\vec{r}_0)}\right] d\vec{r}_0 \tag{E.11}$$

pour obtenir $\hat{\sigma}_{abs} = \pi R_s^2 \hat{Q}_{abs}$ avec $\hat{Q}_{abs}$ l'efficacité d'absorption donnée par

$$\hat{Q}_{abs} = 1 + \frac{e^{-4x\kappa_r}}{2x\kappa_r} + \frac{e^{-4x\kappa_r} - 1}{8x^2\kappa_r^2} \tag{E.12}$$

À partir de cette formulation, on peut voir que si la particule est très grande devant la longueur d'onde, l'efficacité d'absorption tend vers 1, ce qui signifie que la particule absorbe tout le rayonnement.

# ANNEXE F

# Rappels de statistiques

## F.1 Notions d'expérience aléatoire, d'événement et de variable aléatoire

**Expérience aléatoire.** On appelle expérience aléatoire une expérience liée à un phénomène aléatoire dont le résultat ne peut pas être déterminé à l'avance mais dont on connait l'ensemble des résultats possibles $\Omega$.

*Exemple : cas du lancé de dé*

L'ensemble des résultats possibles lors d'un lancé de dé est $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$.

**Événement.** Un événement $\mathcal{E}$ lié à une expérience aléatoire est un ensemble, noté $\Omega_{\mathcal{E}}$, dont les éléments sont des résultats possibles de l'expérience aléatoire. Plus précisément, c'est un sous ensemble de $\Omega$.

*Exemple : cas du lancé de dé*

Considérons l'événement suivant : "le résultat du lancé est pair". Le sous ensemble considéré est $\Omega_{\mathcal{E}} = \{2, 4, 6\}$.

**Variable aléatoire.** Une variable est considérée comme aléatoire ou stochastique dès lors que sa valeur est impossible à déterminer à l'avance. Ainsi, seule une expérience probabiliste (*i.e.* une expérience aléatoire) permet de déterminer la valeur d'une variable aléatoire. Mathématiquement, on appelle variable aléatoire toute application $X$ de l'ensemble des résultats possibles $\Omega$ dans un sous ensemble $\Omega_X \subset \mathbb{R}$ :

$$\begin{aligned} X : \quad & \Omega \to \Omega_X \\ & \omega \to X(\omega) = x \end{aligned}$$

où $x$ est la valeur observée de $X$, $\Omega_X$ est l'ensemble des valeurs possibles de $X$. Les variables aléatoires peuvent être discrète (lancé de dé) ou continue (taille de particules). Les variables aléatoires seront notées en lettres majuscules et leurs variables muettes associées en lettres minuscules. Les valeurs que prennent ces variables aléatoires lors d'une

expérience (*i.e.* les échantillons) seront notées en lettres minuscules et indicées s'il y a réalisation de plusieurs expériences.

## F.2 Loi de probabilité d'une variable aléatoire, fonction densité de probabilité et fonction de répartition

**Loi de probabilité et fonction densité de probabilité.** La définition d'une variable aléatoire nous permet de définir cette dernière par une loi de probabilité et son domaine d'application. Cette loi de probabilité est une mesure décrivant de façon probabiliste le comportement de la variable aléatoire considérée. Elle est positive et normalisée sur son domaine de définition. Lorsque la variable aléatoire $X$ définie sur $[a, b]$ est continue, on parle de fonction densité de probabilité (ou PDF pour *Probability Density Function* en anglais). Cette PDF, notée $p_X(x)$, vérifie les trois propriétés suivantes :

- $p_X : [a, b] \to \mathbb{R}$
- $\forall x \in [a, b]$, $p_X(x) \geq 0$
- $\int_a^b p_X(x)dx = 1$

**Fonction de répartition.** Une autre notion est également utilisée pour caractériser le comportement d'une variable aléatoire : la fonction de répartition (ou CDF pour *Cumulative Distribution Function* en anglais). Pour une variable continue aléatoire $X$ caractérisée par sa fonction densité de probabilité $p_X(x)$ définie sur l'intervalle $[a, b]$, la fonction de répartition $c_X(x)$ est définie par :

$$c_X(x) = \int_a^x p_X(\check{x})d\check{x} \tag{F.1}$$

Elle correspond à une mesure directe de la probabilité. Plus précisément, la valeur $c_X(x)$ représente la probabilité qu'une réalisation aléatoire de la variable aléatoire $X$ soit comprise entre $a$ et $x$. Elle vérifie les propriétés suivantes :

- $\forall x \in [a, b], c_X(x) \in [0, 1]$
- $c_X(a) = 0$ et $c_X(b) = 1$
- $c_X(x)$ est une fonction monotone croissante puisque $p_X(x)$ est toujours positive

**Exemple 1 : Fonction densité de probabilité uniforme.** La fonction densité de probabilité la plus simple est la PDF uniforme (voir Fig. F.1) qui est donnée par :

$$\begin{aligned} p_X : \quad [a,b] &\to \mathbb{R} \\ x &\to \frac{1}{b-a} \end{aligned}$$

En utilisant Eq. F.1, on en déduit la fonction de répartition $c_X(x)$ :

$$c_X(x) = \frac{x-a}{b-a} \tag{F.2}$$

Nous serons amené, au cours de ce manuscrit, à utiliser ce type de fonction densité de probabilité uniforme, notamment celle donnée par $p_X(x) = \frac{1}{2\pi}$ et définie sur l'intervalle $[0, 2\pi]$.

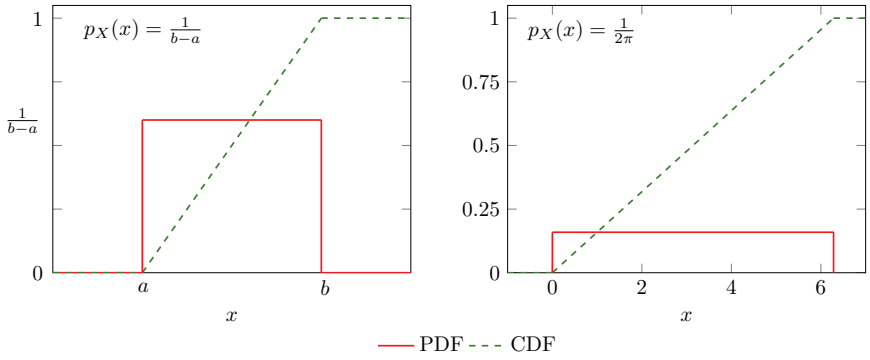



FIGURE F.1 – Fonction densité de probabilité uniforme et sa fonction de répartition.

**Exemple 2 : Fonction densité de probabilité log-normale.** Au cours de ce manuscrit, nous serons amenés à utiliser une loi log-normale de paramètre $\bar{r}_{eq}$ et $s$ qui permettra de modéliser une suspension de micro-organismes photosynthétiques. Elle admet pour fonction densité de probabilité :

$$p_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_{eq} \ln s} \exp\left[-\frac{(\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq})^2}{2 \ln^2 s}\right] \tag{F.3}$$

où $\bar{r}_{eq}$ est la valeur moyenne de la taille $r_{eq}$ de l'échantillon considéré, et $s$ la largeur de la distribution (voir Fig. F.2). Par intégration de cette PDF, on en déduit la fonction de répartition $c_{R_{eq}}(r_{eq})$ :

$$c_{R_{eq}}(r_{eq}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\mathrm{erf}\left[-\frac{\ln r_{eq} - \ln \bar{r}_{eq}}{\sqrt{2} \ln s}\right] \tag{F.4}$$

où erf est la fonction d'erreur définie par :

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

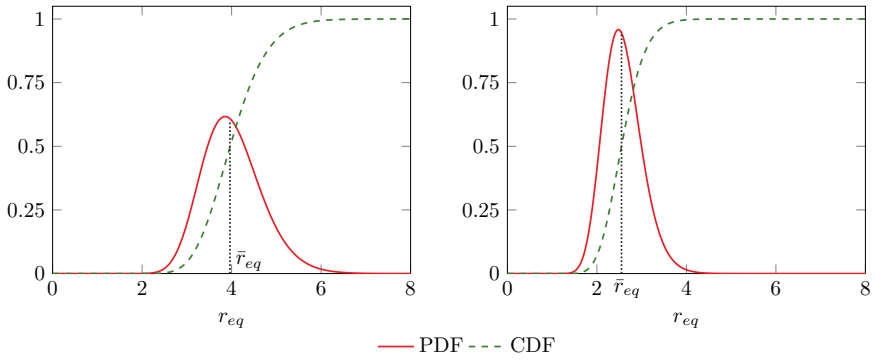



FIGURE F.2 – Loi log-normale : représentation de la fonction densité de probabilité (PDF) et de la fonction de répartition (CDF).

## F.3 Espérance, variance et écart-type d'une variable aléatoire

**Espérance d'une variable aléatoire.** L'espérance d'une variable aléatoire $X$ est la moyenne de cette variable pondérée par sa fonction densité de probabilité. Cette moyenne est d'autant plus précise que le nombre de réalisations de la même expérience aléatoire est grand. En particulier, pour une variable aléatoire $X$ continue, son espérance, notée $\mathbb{E}[X]$ (se lit « *espérance de* $X$ »), est donnée par :

$$\mathbb{E}[X] = \int_{\mathcal{D}_X} x p_X(x) dx \tag{F.5}$$

où $\mathcal{D}_X$ est l'ensemble des valeurs possibles de la variable aléatoire $X$. Parmi les propriétés élémentaires, l'espérance est un opérateur linéaire :

$$\mathbb{E}[\alpha X + \beta Y] = \alpha \mathbb{E}[X] + \beta \mathbb{E}[Y]$$

où $X$ et $Y$ sont deux variables aléatoires, $\alpha$ et $\beta$ deux réels. Il convient de noter que l'espérance du produit de deux variables aléatoires $X$ et $Y$ n'est en général pas égale au produit des espérances de chacune des variables aléatoires, excepté lorsque que $X$ et $Y$ sont indépendantes.

$$\mathbb{E}[XY] \neq \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y]$$
$$\mathbb{E}[XY] = \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y] \text{ si } X \text{ et } Y \text{ sont indépendantes}$$

À noter également que l'espérance d'une espérance est encore une espérance : $\mathbb{E}[\mathbb{E}[X]] = \mathbb{E}[X]$.

Nous venons de définir l'espérance d'une variable aléatoire $X$. Dans la mesure où une fonction de variables aléatoires est également une variable aléatoire, il est possible de

définir leur espérance. Soit $X$ une variable aléatoire et $f$ une fonction définie de sorte que l'image de $X$ par $f$ est $f \circ X = f(X)$. Par conséquent, $f(X)$ est une variable aléatoire et son espérance est donnée par :

$$\mathbb{E}[f(X)] = \int_{\mathcal{D}_X} p_X(x) f(x) dx \tag{F.6}$$

Si la fonction $f$ dépend de $v$ variables aléatoires $X_1, \cdots X_v$, son espérance est donnée par :

$$\mathbb{E}[f(X_1, \cdots, X_v)] = \int_{\mathcal{D}_{X_1}} p_{X_1}(x_1) dx_1 \cdots \int_{\mathcal{D}_{X_v}} p_{X_v}(x_v) dx_v f(x_1, \cdots, x_v) \tag{F.7}$$

Cette dernière équation peut également s'écrire une sous forme plus compacte :

$$\mathbb{E}[f(\vec{X})] = \int_{\mathcal{D}_{\vec{X}}} p_{\vec{X}}(\vec{x}) f(\vec{x}) d\vec{x} \tag{F.8}$$

où l'on a posé la variable aléatoire $\vec{X} = [X_1, \cdots, X_v]$ et le domaine d'intégration $\mathcal{D}_{\vec{X}} = \mathcal{D}_1 \times \cdots \times \mathcal{D}_v$. Le terme $p_{\vec{X}}(\vec{x})$ est alors appelé fonction densité de probabilité jointe. Si les $v$ variables aléatoires $X_v$ sont indépendantes entre elles, $p_{\vec{X}}(\vec{x})$ est définie comme le produit de chacune de leur fonction densité de probabilité (PDF) respective :

$$p_{\vec{X}}(\vec{x}) = \prod_{k=1}^{v} p_{X_k}(x_k) \tag{F.9}$$

Si ce n'est pas le cas, alors la PDF jointe $p_{\vec{X}}(\vec{x})$ est donnée par :

$$p_{\vec{X}}(\vec{x}) = p_{X_1}(x_1) \times p_{X_2}(x_2 \mid x_1) \times \cdots \times p_{X_v}(x_v \mid (x_1, x_2, ..., x_{v-1})) \tag{F.10}$$

où $p_{X_k}(x_k \mid (x_1, x_2, ..., x_{k-1}))$ désigne une fonction densité de probabilité conditionnelle correspondant à celle de la variable aléatoire $X_k$ sachant les valeurs des réalisations $x_1, x_2, ..., x_{k-1}$ des variables aléatoires $X_1, ...X_{k-1}$.

**Variance d'une variable aléatoire.** Soit $X$ une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{R}$. La variance d'une variable aléatoire caractérise la dispersion de la distribution autour de son espérance $\mathbb{E}[X]$. Elle est notée Var, se lit « *Variance de* $X$ », et est définie par :

$$\begin{aligned} \text{Var} &= \int_{\mathcal{D}} p_X(x)[x - \mathbb{E}[X]]^2 dx \\ &= \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] \\ &= \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2 \end{aligned} \tag{F.11}$$

si l'espérance $\mathbb{E}[X]$ existe et est bien définie, sinon $\text{Var}(X) = +\infty$. La dernière relation de Eq. F.11 est connue sous le nom de formule de König-Huygens (voir Encart 10).

**Encart 10: Formule de König-Huygens**

Soit $X$ une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{R}$ et de variance finie. Les espérances $\mathbb{E}[X]^2$ et $\mathbb{E}[X^2]$ sont alors bien définies et l'on a :

$$\text{Var} = \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2$$

En effet,

$$\begin{aligned}
\text{Var} &= \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] \\
&= \mathbb{E}[X^2 - 2X\mathbb{E}[X] + \mathbb{E}[X]^2] && \text{Binôme de Newton} \\
&= \mathbb{E}[X^2] - 2\mathbb{E}\left[X\mathbb{E}[X]\right] + \mathbb{E}\left[\mathbb{E}[X]^2\right] && \text{Linéarité de } \mathbb{E}[X] \\
&= \mathbb{E}[X^2] - 2\mathbb{E}[X]\mathbb{E}[X] + \mathbb{E}[X]^2 && \text{Espérance d'une constante} \\
&= \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2
\end{aligned}$$

**Écart-type d'une variable aléatoire.** Il est courant de rencontrer la notion d'écart-type, qui est une autre façon de caractériser la dispersion d'une variable aléatoire. Il est noté std (pour *standard deviation* en anglais) et est défini comme la racine carrée de la variance :

$$\text{std}(X) = \sqrt{\text{Var}(X)} = \sqrt{\mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2} \tag{F.12}$$

## F.4 Échantillonnage d'un nombre aléatoire

La méthode de Monte Carlo est très reliée au concept d'échantillonnage d'un nombre aléatoire. L'échantillonnage consiste à prendre une valeur particulière d'une variable aléatoire à partir de la fonction de répartition de la variable aléatoire. Différentes techniques peuvent être utilisées pour générer des valeurs d'une variable aléatoire (voir chapitre 4 de [Dunn and Shultis, 2012]). Ici on se contente de présenter deux techniques qui seront utilisées dans ce manuscrit. L'une est désignée par la **méthode de la cumulée inverse** de la densité de probabilité. L'autre est désignée sous le nom de **méthode de rejet**.

### F.4.1 Méthode de la cumulée inverse

Considérons une variable aléatoire $X$ ayant $p_X(x)$ pour fonction densité de probabilité. Notons $c_X(x)$ sa fonction de répartition, également appelée cumulée. On cherche une valeur $x_i$ de la variable aléatoire $X$. Pour ce faire, on utilise la **méthode de la cumulée inverse** qui consiste à choisir uniformément un nombre aléatoire $\text{rand}_i$ sur l'intervalle

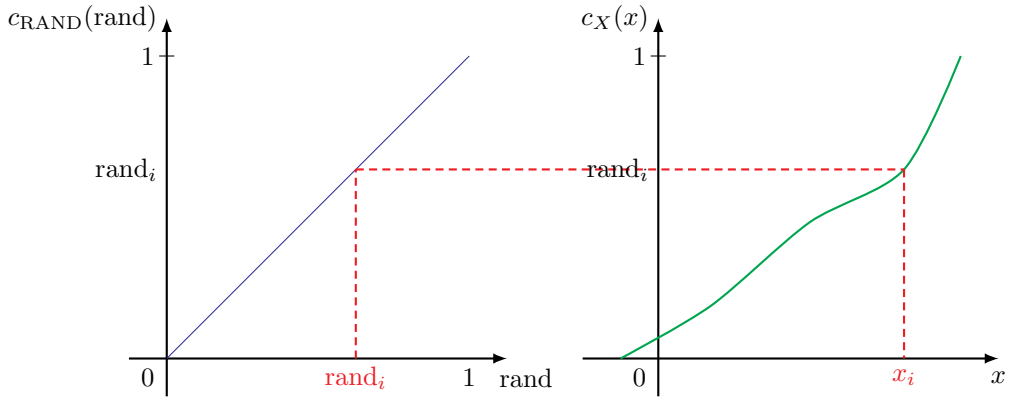



FIGURE F.3 – Représentation schématique de la méthode de la cumulée inverse.

$[0, 1]$ de sorte que $c_X(x_i) = \text{rand}_i$. En prenant l'inverse de la cumulée, nous obtenons l'unique valeur de $x_i$ (puisque $c_X(x)$ est une fonction monotone), soit

$$x_i = c_X^{-1}(\text{rand}_i) \tag{F.13}$$

Dans la suite, nous proposons d'illustrer cette méthode sur trois exemples. Ces exemples n'ont pas été choisi au hasard puisqu'ils ont été directement utilisés pour la construction de certain algorithme de Monte Carlo présent dans ce manuscrit.

***Exemple 1 : Échantillonnage uniforme***

Considérons une fonction densité de probabilité uniforme $p_X(x) = \frac{1}{b-a}$. À partir de la définition de la fonction de répartition Eq. F.1 ou directement en utilisant Eq. F.2, il vient

$$c_X(x_i) = \int_a^{x_i} \frac{1}{b-a} dx = \frac{x_i - a}{b-a} = \text{rand}_i \tag{F.14}$$

En appliquant la méthode de la cumulée inverse, on en déduit

$$x_i = a + \text{rand}_i(b-a) \tag{F.15}$$

Eq. F.15 permet d'échantillonner uniformément le nombre aléatoire $x$ sur l'intervalle $[a, b]$.

***Exemple 2 : Calcul de l'aire d'un disque - échantillonnage uniforme sur un disque***

Supposons que l'on souhaite calculer l'aire d'un disque de rayon $R_d$ par la méthode de Monte Carlo. L'aire du disque est donnée par :

$$A = \iint_{\mathcal{D}} dxdy = \int_0^{2\pi} \int_0^1 \rho d\rho d\theta$$

où l'on a réalisé le changement de variable $x = \rho\cos\theta$ et $y = \rho\sin\theta$. Introduisons les variables aléatoires $\Theta$ et $P$ distribuées respectivement selon $p_\Theta(\theta)$ et $p_P(\rho)$. En multipliant et divisant par ces fonctions densités de probabilité, l'intégrale $A$ s'écrit sous la forme :

$$A = \int_0^{2\pi} d\theta p_\Theta(\theta) \int_0^{R_d} d\rho p_P(\rho) \frac{\rho}{p_P(\rho)p_\Theta(\theta)} \tag{F.16}$$

Au vue de l'intégrale, il va donc se poser la question de comment échantillonner $\theta$ et $\rho$. On choisit d'échantillonner uniformément $\theta$ sur $[0, 2\pi]$. La fonction densité de probabilité est donc $p_\Theta(\theta) = \frac{1}{2\pi}$, et la fonction de répartition correspondante est $c_\Theta(\theta) = \frac{\theta}{2\pi}$. En utilisant le résultat de l'exemple 1, l'application de la méthode de la cumulée inverse conduit à

$$\theta_i = 2\pi \text{rand}_i$$

ou $\text{rand}_i$ est un nombre aléatoire généré uniformément sur $[0, 1]$. En ce qui concerne la quantité $\rho$, on choisit de prendre comme fonction densité de probabilité $p_P(\rho) = \frac{2\rho}{R_d^2}$ (qui vérifie bien $\int_0^{R_d} p_P(\rho)d\rho = 1$). En utilisant la définition de la fonction de répartition Eq. F.1, on en déduit $c_P(\rho) = \frac{\rho^2}{R_d^2}$. Par la suite, on échantillonne uniformément un nombre aléatoire $\text{rand}_j$ entre 0 et 1, puis l'application de la méthode de la cumulée inverse conduit à

$$\frac{\rho_j^2}{R_d^2} = \text{rand}_j \Leftrightarrow \rho_j = R_d\sqrt{\text{rand}_j}$$

À noter que la démarche qui vient d'être décrite permet d'échantillonner uniformément une position sur le disque de rayon $R_d$.

***Exemple 3 : Échantillonnage uniforme d'une position dans le volume d'une sphère***

Supposons que l'on souhaite échantillonner uniformément une position dans le volume d'une sphère de rayon $R_s$. La probabilité d'échantillonner uniformément une position $\vec{r}$ dans le volume de la sphère est donnée par $p_{\vec{R}}(\vec{r}) = \left(\frac{4}{3}\pi R_s^3\right)^{-1}$. Toutefois, ceci ne nous aide pas pour localiser la position $\vec{r}$, et est donc inutilisable. En partant de $\int_{\mathcal{D}_{\vec{r}}} d\vec{r} p_{\vec{R}}(\vec{r}) = 1$, puis en introduisant les coordonnées sphériques $(\rho, \theta, \phi)$ et en utilisant le fait que $d\vec{r} = \rho^2 \sin\theta d\rho d\theta d\phi$, on peut écrire :

$$\int_{\mathcal{V}} d\vec{r} p_{\vec{R}}(\vec{r}) = 1 \equiv \int_0^{2\pi} d\phi p_\Phi(\phi) \int_0^{\pi} d\theta p_\Theta(\theta) \int_0^{R_s} d\rho p_P(\rho) \frac{\rho^2 \sin\theta p_{\vec{R}}(\vec{r})}{p_\Phi(\phi)p_\Theta(\theta)p_P(\rho)} \tag{F.17}$$

L'intérêt de cette écriture est que l'on fait clairement apparaître les coordonnées sphériques de la position $\vec{r}$. Échantillonner uniformément une telle position revient à prendre les

fonctions densités de probabilité suivante :

$$p_P(\rho) = \frac{3\rho^2}{R_s^3} \tag{F.18}$$

$$p_\Theta(\theta) = \frac{\sin\theta}{2} \tag{F.19}$$

$$p_\Phi(\phi) = \frac{1}{2\pi} \tag{F.20}$$

On peut alors en déduire les fonctions de répartition correspondantes :

$$c_P(\rho) = \frac{\rho^3}{R_s^3} \tag{F.21}$$

$$c_\Theta(\theta) = -\frac{1}{2}(\cos\theta - 1) \tag{F.22}$$

$$c_\Phi(\phi) = \frac{\phi}{2\pi} \tag{F.23}$$

L'application de la méthode de la cumulée inverse nous permet d'écrire les valeurs des nombres aléatoires $\rho, \theta$ et $\phi$ :

$$\rho_i = R_s \,\mathrm{rand}_i^{\frac{1}{3}} \tag{F.24}$$

$$\theta_j = \arccos(1 - 2\,\mathrm{rand}_j) \tag{F.25}$$

$$\phi_k = 2\pi\,\mathrm{rand}_k \tag{F.26}$$

où $\mathrm{rand}_i$, $\mathrm{rand}_j$ et $\mathrm{rand}_k$ sont trois nombres aléatoires échantillonnés uniformément sur $[0, 1]$.

### F.4.2 Méthode de rejet

La méthode de la cumulée inverse présentée précédemment devient inutilisable dès lors que la fonction densité de probabilité (PDF) ne peut pas être intégrée analytiquement pour obtenir la cumulée ou si cette dernière est difficile à inverser. Pour contourner ce problème, il existe une approche alternative initialement proposée par Von Neumann [Neumann, 1951] et connue sous le nom de **méthode de rejet** [Dunn and Shultis, 2012]. Ceci fait l'objet du présent paragraphe.

Considérons une PDF $p_X(x)$ définie analytiquement sur l'intervalle $[a, b]$. Supposons que son intégrale sur le domaine $[a, b]$ ne soit pas analytique ou que la fonction de répartition associée à cette PDF est difficile à inverser. La méthode de rejet nous permet d'envisager une procédure d'échantillonnage en trois étapes. La première consiste à échantillonner uniformément un nombre aléatoire $x_i$ sur l'intervalle $[a, b]$. La seconde étape consiste à échantillonner uniformément un nombre $p$ sur $[0, M]$, où $M$ est un majorant de la PDF $p_X(x)$. Enfin, on termine par un test : si $p < p_X(x_i)$ alors on garde le tirage, sinon on le rejette et on revient à la première étape. Ceci est schématisé Fig. F.4.

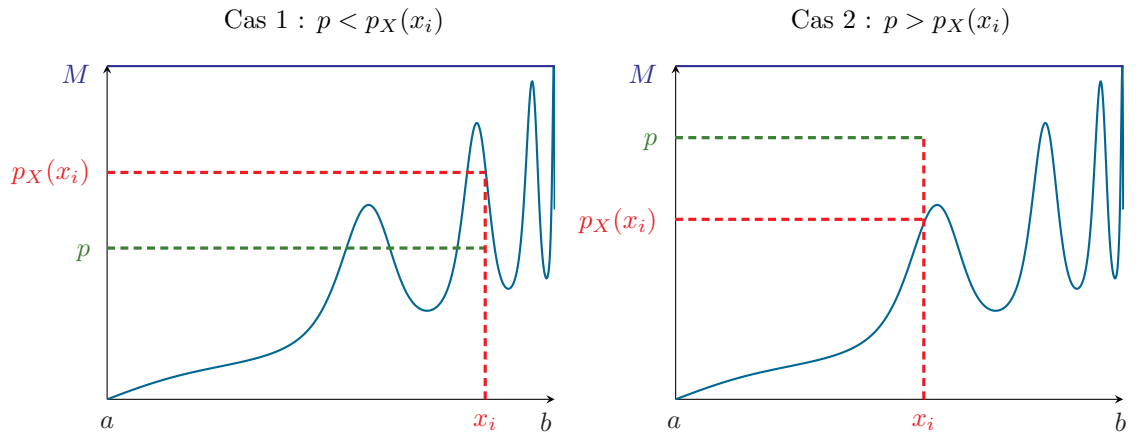



FIGURE F.4 – Schématisation de la procédure d'échantillonnage selon la fonction densité de probabilité $p_X(x)$ par la méthode de rejet. Si $p < p_X(x_i)$ alors on est en dessous de la courbe : on garde ce tirage (Cas 1). Si $p > p_X(x_i)$, alors on se trouve au dessus de la courbe : on rejette le tirage (Cas 2).

***Exemple : Échantillonnage uniforme d'un disque***

Reprenons l'exemple 2 de Sec. F.4.1, mais cette fois-ci en appliquant la méthode de rejet. On échantillonne uniformément d'une part $x_i$ sur $[-R_d, R_d]$ et d'autre part $y_j$ sur $[-R_d, R_d]$. Si $x_i^2 + y_j^2 < R^2$ alors on accepte le couple $(x_i, y_j)$ sinon on le rejette.

## F.5 Lois des grands nombres et théorème central limite

**Lois des grands nombres.** Soit $(X_n)_{n\geq 0}$ une suite de variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées[1] possédant la même espérance $\mathbb{E}[X]$ et la même variance $\mathrm{Var}(X)$ finie. Notons, $\forall n \in \mathbb{N}^*$, la moyenne arithmétique $\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$. Alors cette moyenne arithmétique converge presque surement vers l'espérance $\mathbb{E}[X]$ lorsque $n$ tend vers l'infini :

$$\lim_{n\to+\infty} \overline{X}_n = \mathbb{E}[X] \tag{F.27}$$

Pour un nombre suffisamment grand d'échantillon $n$, la moyenne arithmétique $\overline{X}_n$ constitue un estimateur non biaisé de l'espérance de $X$.

**Théorème central limite.** Soit $(X_n)_{n\geq 0}$ une suite de variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées possédant la même espérance $\mathbb{E}[X]$ et la même variance $\mathrm{Var}(X)$

1. Une suite $(X_n)_{n\geq 0}$ de variables aléatoires est dite indépendante si les événements associés à chacune des variables aléatoires sont indépendants. Si de plus, chacune ces variables possèdent la même loi de probabilité, on dit que la suite $(X_n)_{n\geq 0}$ est une suite de variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées.

finies. Notons, $\forall n \in \mathbb{N}^*$, $\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$ sa moyenne arithmétique. Ainsi la suite $(Z_n)_{n\in\mathbb{N}^*}$ converge vers la loi normale centrée réduite :

$$Z_n = \frac{\overline{X}_n - \mathbb{E}[X]}{\sqrt{\frac{\mathrm{Var}(X)}{n}}} \xrightarrow[n\to+\infty]{} \mathcal{N}(0,1) \tag{F.28}$$

Un résultat intermédiaire et utilise du théorème centrale limite est que la variance de la moyenne arithmétique $\overline{X}_n$ est donnée par :

$$\mathrm{Var}(\overline{X}_n) = \frac{1}{n}\mathrm{Var}(X) \tag{F.29}$$

# ANNEXE G

# Compléments sur l'approximation de Schiff

## G.1 Calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_{n+m}$(*Eq. III.171*)

L'objet de cette annexe est de démontrer l'expression de $\mathcal{I}_{n+m}$ donnée par Eq. III.171. Pour ce faire, partons de la définition de l'intégrale $\mathcal{I}_{n+m}$ donnée par Eq. III.170, que l'on rappelle ci-dessous :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{n+m} = &\underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+m} \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+1} \left[\prod_{q=n+1}^{n+m} g(\vec{r}_q, \vec{r}_{q-1})\right] e^{-i\vec{k}_i \cdot \sum_{q=n+1}^{n+m} \vec{\rho}_q}}_{=\mathcal{I}_{n+m,n+1}} \\ &\times \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_n \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_1 \left[\prod_{q=1}^{n} g(\vec{r}_q, \vec{r}_{q-1})\right] e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_n}}_{=\mathcal{I}_{n,1}}\end{aligned} \tag{G.1}$$

Dans un premier temps, calculons l'intégrale $\mathcal{I}_{n,1}$ (définie dans Eq. G.1) en considérant une ligne droite entre $\vec{r}_0$ et $\vec{r}_n$ correspondant à l'axe des abscisses $z_s$ (voir Fig. G.1). Notons $\forall k \in [\![1, n]\!]$, $\rho_k = \vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}$, $\rho_k = \|\vec{\rho}_k\| = \|\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}\|$, avec

$$\vec{r}_k = \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \\ z_k \end{pmatrix} \qquad \vec{r}_{k-1} = \begin{pmatrix} x_{k-1} \\ y_{k-1} \\ z_{k-1} \end{pmatrix} \qquad \vec{r}_k - \vec{r}_{k-1} = \begin{pmatrix} x_k - x_{k-1} \\ y_k - y_{k-1} \\ z_k - z_{k-1} \end{pmatrix} \tag{G.2}$$

L'intégrale $\mathcal{I}_{n,1}$ présente dans Eq. G.1 peut s'écrire, après avoir remplacé les fonctions de Green par leurs expressions, sous la forme :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{n,1} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{n-1} &\iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_n \int_{z_n}^{z_0} dz_1 \int_{z_n}^{z_1} dz_2 \cdots \int_{z_n}^{z_{n-2}} dz_{n-1} \\ &\times \underbrace{\int_{\mathcal{D}_{x_1}} dx_1 \int_{\mathcal{D}_{y_1}} dy_1 \cdots \int_{\mathcal{D}_{x_{n-1}}} dx_{n-1} \int_{\mathcal{D}_{y_{n-1}}} dy_{n-1} \frac{e^{-ik_e \sum_{k=1}^{n} \rho_k}}{4\pi\rho_1\rho_2\cdots\rho_n}}_{=\mathcal{C}} e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_n}\end{aligned} \tag{G.3}$$

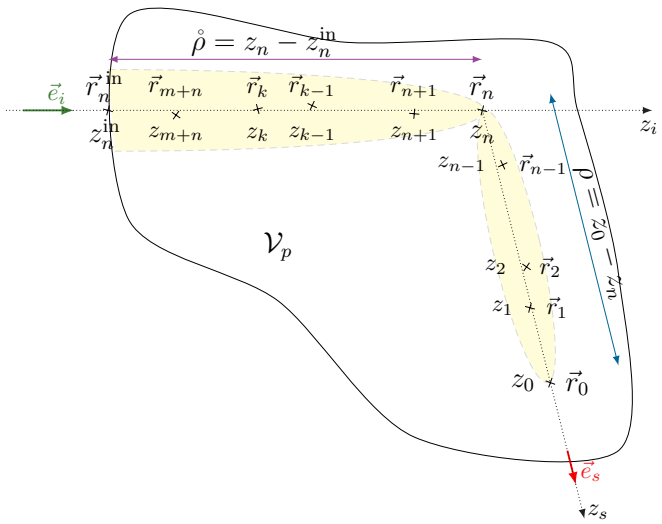



FIGURE G.1 – Représentation de la zone de phase stationnaire dans le cas des grands angles de diffusion. Un rayon se propage sur une ligne quasi-droite depuis l'infini jusqu'à la position $\vec{r}_n$ suivant la direction incidente $\vec{e}_i$. Puis il subit une diffusion en $\vec{r}_n$ avant de se propager sur une ligne *quasi*-droite jusqu'à la position $\vec{r}_0$ suivant la direction de diffusion $\vec{e}_s$. $\mathring{\rho}$ et $\rho$ représente respectivement la distance parcourue entre l'entrée dans la particule au point $\vec{r}_n^{\,\text{in}}$ jusqu'au point $\vec{r}_n$ et la distance parcourue depuis $\vec{r}_n$ jusqu'à la position $\vec{r}_0$.

où $\forall k \in [\![1, n-1]\!]$, $\mathcal{D}_{x_k}$ et $\mathcal{D}_{y_k}$ désignent respectivement les domaines d'intégration des $x_k$ et des $y_k$. Nous noterons $\mathcal{C}$ l'intégrale définie par :

$$\mathcal{C} = \int_{\mathcal{D}_{x_1}} dx_1 \int_{\mathcal{D}_{y_1}} dy_1 \cdots \int_{\mathcal{D}_{x_{n-1}}} dx_{n-1} \int_{\mathcal{D}_{y_{n-1}}} dy_{n-1} \frac{e^{-ik_e \sum_{k=1}^{n} \rho_k}}{4\pi\rho_1\rho_2\cdots\rho_n} \tag{G.4}$$

Posons $\forall k \in [\![1, n]\!], \xi_k = z_{k-1} - z_k$ et

$$\rho_k = \|\vec{r}_k - \vec{r}_{k-1}\| = \xi_k \sqrt{\frac{(x_k - x_{k-1})^2 + (y_k - y_{k-1})^2}{\xi_k^2} + 1} \tag{G.5}$$

Puisque les composantes $x_k$ et $y_k$ sont très petites devant la composante $z_k$, il est possible d'effectuer un développement limité de Taylor de la quantité $\rho_k$, soit :

$$\rho_k \approx \xi_k + \frac{1}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2 + (y_k - y_{k-1})^2}{\xi_k^2} \tag{G.6}$$

Ce développement permet alors d'écrire

$$\prod_{k=1}^{n} \rho_k \approx \prod_{k=1}^{n} \xi_k \tag{G.7}$$

$$\sum_{k=1}^{n} \rho_k \approx \sum_{k=1}^{n} \xi_k + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \frac{(x_k - x_{k-1})^2 + (y_k - y_{k-1})^2}{\xi_k} \tag{G.8}$$

avec $x_n = y_n = 0$ et $x_0 = y_0 = 0$ puisque $\vec{r}_n$ et $\vec{r}_0$ sont sur l'axe des abscisses $z$. Comme nous le verrons par la suite, cette somme peut se mettre sous la forme

$$\sum_{k=1}^{n} \rho_k = \sum_{k=1}^{n} \xi_k + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \frac{\alpha_{n-k}}{\xi_k} \left[ h(x_{n-k}) + h(y_{n-k}) \right] \tag{G.9}$$

où les termes $\alpha_{n-k}$, $h(x_{n-k})$ et $h(y_{n-k})$ seront précisés plus tard. En injectant Eqs. G.7 et G.8 dans Eq. G.4, il vient

$$\mathcal{C} \approx \frac{e^{-ik_e \sum_{k=1}^{n} \xi_k}}{4\pi \prod_{k=1}^{n} \xi_k} \underbrace{\int_{\mathcal{D}_{x_1}} dx_1 \int_{\mathcal{D}_{y_1}} dy_1 \cdots \int_{\mathcal{D}_{x_{n-1}}} dx_{n-1} \int_{\mathcal{D}_{y_{n-1}}} dy_{n-1} e^{-ik_e \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \frac{(x_k - x_{k-1})^2 + (y_k - y_{k-1})^2}{\xi_k}}}_{= \mathcal{C}_{x,y}} \tag{G.10}$$

Avant de poursuivre avec le calcul de l'intégrale $\mathcal{C}_{x,y}$ (Eq. G.10), nous allons effectuer un travail sur la quantité $\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \frac{(x_k - x_{k-1})^2 + (y_k - y_{k-1})^2}{\xi_k}$ présente dans la fonction exponentielle constituant l'intégrande de $\mathcal{C}_{x,y}$. L'objectif de ce travail sera alors d'évaluer les intégrales portant sur les $x_k$ et $y_k$. Dans un premier temps, concentrons nous sur le calcul de l'intégrale portant sur $x_{n-1}$. On considère alors seulement les termes de la somme qui dépendent de $x_{n-1}$ et on note $g(x_{n-1})$ la fonction regroupant ces termes (on rappelle que $x_n = y_n = 0$). La fonction $g(x_{n-1})$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
g(x_{n-1}) &= \frac{1}{2} \left[ \frac{x_{n-1}^2}{\xi_n} + \frac{(x_{n-1} - x_{n-2})^2}{\xi_{n-1}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ x_{n-1}^2 \left( \frac{1}{\xi_n} + \frac{1}{\xi_{n-1}} \right) - 2 \frac{x_{n-2}}{\xi_{n-1}} x_{n-1} + \frac{x_{n-2}^2}{\xi_{n-1}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\xi_n + \xi_{n-1}}{\xi_n \xi_{n-1}} x_{n-1}^2 - 2 \frac{x_{n-2}}{\xi_{n-1}} x_{n-1} + \frac{x_{n-2}^2}{\xi_{n-1}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\xi_n + \xi_{n-1}}{\xi_n \xi_{n-1}} \left( x_{n-1} - \frac{\xi_n \xi_{n-1}}{\xi_n + \xi_{n-1}} \frac{x_{n-2}}{\xi_{n-1}} \right)^2 - \frac{\xi_n}{\xi_n + \xi_{n-1}} \frac{x_{n-2}^2}{\xi_{n-1}} + \frac{x_{n-2}^2}{\xi_{n-1}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\xi_n + \xi_{n-1}}{\xi_n \xi_{n-1}} \left( x_{n-1} - \frac{\xi_n \xi_{n-1}}{\xi_n + \xi_{n-1}} \frac{x_{n-2}}{\xi_{n-1}} \right)^2 + \frac{x_{n-2}^2}{\xi_n + \xi_{n-1}} \right] \\
&= \alpha_{n-1} h(x_{n-1}) + \beta_{n-1}
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
\alpha_{n-1} &= \frac{1}{2} \frac{\xi_n + \xi_{n-1}}{\xi_n \xi_{n-1}} \\
\beta_{n-1} &= \frac{1}{2} \frac{x_{n-2}^2}{\xi_n + \xi_{n-1}} \\
h(x_{n-1}) &= \left( x_{n-1} - \frac{\xi_n \xi_{n-1}}{\xi_n + \xi_{n-1}} \frac{x_{n-2}}{\xi_{n-1}} \right)^2 = \left( x_{n-1} - \frac{\xi_n}{\xi_n + \xi_{n-1}} x_{n-2} \right)^2
\end{aligned}$$

Notons que le terme $\beta_{n-1}$ ne dépend que de $x_{n-2}$ et par conséquent ne contribuera pas à l'évaluation de l'intégrale portant sur $x_{n-1}$. Par contre, il devra être pris en compte lors du calcul de l'intégrale portant sur $x_{n-2}$. L'intégrale portant sur $x_{n-1}$ que nous cherchons à évaluer ici est donnée par :

$$\mathcal{C}_{x_{n-1}} = \int_{\mathcal{D}_{x_{n-1}}} e^{-ik_e\alpha_{n-1}h(x_{n-1})}dx_{n-1}$$

**Encart 11: Approximation des phases stationnaires**

Considérons l'intégrale $\mathcal{K}_\alpha = \int_a^b f(x)e^{-i\alpha u(x)}dx$, avec $\alpha$ un paramètre réel positif, $f$ et $u$ deux fonction de classe $C^\infty$ sur $[a,b]$. Soit $x_s \in ]a,b[$ un point stationnaire, c'est-à-dire vérifiant $u'(x_s) = 0$. Lorsque le paramètre $\alpha \to +\infty$ est assez grand, le développement asymptotique de $\mathcal{K}_\alpha$ s'écrit :

$$\mathcal{K}_\alpha = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha|u''(x_s)|}} f(x_s)e^{-i\alpha u(x_s)-i\sigma\frac{\pi}{4}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\alpha}\right) \tag{G.11}$$

$$\sigma = \begin{cases} -1 & \text{si} \quad u''(x_s) < 0 \\ +1 & \text{si} \quad u''(x_s) > 0 \end{cases}$$

L'évaluation de cette intégrale se fait en utilisant la méthode des phases stationnaires (voir Encart 11). Notons $x^s_{n-1}$ un point stationnaire qui vérifie de par sa définition :

$$h'(x^s_{n-1}) = 0 \Leftrightarrow 2\left(x^s_{n-1} - \frac{\xi_n}{\xi_n + \xi n - 1}x_{n-2}\right) = 0 \Leftrightarrow x^s_{n-1} = \frac{\xi_n}{\xi_n + \xi_{n-1}}x_{n-2} \tag{G.12}$$

Puisque $h''(x^s_{n-1}) = 2 > 0$ et $h(x_s) = 0$, il vient en utilisant Eq. G.11 que la contribution de $x_{n-1}$ à l'intégrale est :

$$\mathcal{C}_{x_{n-1}} = \sqrt{\frac{2\pi}{2k_e\alpha_{n-1}}}e^{-i\frac{\pi}{4}} = \sqrt{\frac{2\pi}{k_e}\frac{\xi_n\xi_{n-1}}{\xi_n + \xi_{n-1}}}(1-i)\frac{\sqrt{2}}{2} \tag{G.13}$$

On obtient bien sur le même résultat pour la contribution de l'intégrale portant sur $y_{n-1}$. Ainsi la contribution globale de $x_{n-1}$ et $y_{n-1}$ à l'intégrale $\mathcal{I}_{n,1}$ est :

$$\mathcal{C}_{x_{n-1},y_{n-1}} = \mathcal{C}_{x_{n-1}}\mathcal{C}_{y_{n-1}} = -\frac{2\pi i}{k_e}\frac{\xi_n\xi_{n-1}}{\xi_n + \xi_{n-1}} \tag{G.14}$$

Poursuivons la démarche en considérant maintenant les termes en $x_{n-2}$ sans oublier de tenir compte du terme $\beta_{n-1}$ introduit précédemment et qui dépend de $x_{n-2}$. La fonction

$g(x_{n-2})$ regroupant les termes en $x_{n-2}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
g(x_{n-2}) &= \beta_{n-1} + \frac{1}{2}\frac{(x_{n-2}-x_{n-3})^2}{\xi_{n-2}} \\
&= \frac{1}{2}\frac{x_{n-2}^2}{\xi_n+\xi_{n-1}} + \frac{1}{2}\frac{(x_{n-2}-x_{n-3})^2}{\xi_{n-2}} \\
&= \frac{1}{2}\left[x_{n-2}^2\left(\frac{1}{\xi_n+\xi_{n-1}}+\frac{1}{\xi_{n-2}}\right) - 2\frac{x_{n-3}}{\xi_{n-2}}x_{n-2} + \frac{x_{n-3}^2}{\xi_{n-2}}\right] \\
&= \frac{1}{2}\left[\frac{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}{(\xi_n+\xi_{n-1})\xi_{n-2}}\left(x_{n-2} - \frac{(\xi_n+\xi_{n-1})\xi_{n-2}}{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}\frac{x_{n-3}}{\xi_{n-2}}\right)^2\right. \\
&\qquad\qquad \left. - \frac{\xi_n+\xi_{n-1}}{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}\frac{x_{n-3}^2}{\xi_{n-2}} + \frac{x_{n-3}^2}{\xi_{n-2}}\right] \\
&= \underbrace{\frac{1}{2}\frac{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}{(\xi_n+\xi_{n-1})\xi_{n-2}}}_{\alpha_{n-2}}\underbrace{\left(x_{n-2} - \frac{\xi_n+\xi_{n-1}}{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}x_{n-3}\right)^2}_{h(x_{n-2})} + \underbrace{\frac{1}{2}\frac{x_{n-3}^2}{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}}_{\beta_{n-2}} \\
&= \alpha_{n-2}h(x_{n-2}) + \beta_{n-2}
\end{aligned}$$

Comme précédemment, l'évaluation de l'intégrale sur les $x_{n-2}$ se fait en utilisant la méthode des phases stationnaires. Notons $x_{n-2}^s$ un point stationnaire vérifiant :

$$h'(x_{n-2}^s) = 0 \Leftrightarrow x_{n-2}^s = \frac{\xi_n+\xi_{n-1}}{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}}x_{n-3} \tag{G.15}$$

Puisque $h''(x_{n-2}^s) = 2 > 0$ et $h(x_{n-2}^s) = 0$, il vient, en utilisant Eq. G.11 que l'intégrale portant sur $x_{n-2}$ vaut

$$\mathcal{C}_{x_{n-2}} = \sqrt{\frac{\pi}{k_e\alpha_{n-2}}}e^{-i\frac{\pi}{4}} \tag{G.16}$$

Le résultat est identique pour l'intégrale portant sur $y_{n-2}$. Ainsi, $\mathcal{C}_{x_{n-2}} = \mathcal{C}_{y_{n-2}}$ et la contribution globale des intégrales portant sur $x_{n-2}$ et $y_{n-2}$ :

$$\mathcal{C}_{x_{n-2},y_{n-2}} = -\frac{2\pi i}{k_e}\frac{(\xi_n+\xi_{n-1})\xi_{n-2}}{\xi_n+\xi_{n-1}+\xi_{n-2}} \tag{G.17}$$

La démarche adoptée précédemment pour obtenir les diverses contributions à l'intégrale $\mathcal{C}_{x,y}$ peut être généralisée. En effet, $\forall p \in [\![1, n-1]\!]$, la fonction $g(x_p)$ regroupant les termes en $x_p$ est donnée par

$$g(x_p) = \frac{1}{2}\left[\frac{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}{\xi_p\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q}\left(x_p - \frac{\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}x_{p-1}\right)^2 + \frac{x_{p-1}^2}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}\right] = \alpha_p h(x_p) + \beta_p \tag{G.18}$$

avec

$$\alpha_p = \frac{1}{2}\frac{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}{\xi_p\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q} \qquad h(x_p) = \left(x_p - \frac{\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}x_{p-1}\right)^2 \qquad \beta_p = \frac{1}{2}\frac{x_{p-1}^2}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}$$

L'évaluation de l'intégrale $\mathcal{C}_{x_p} = \int_{\mathcal{D}_{x_p}} e^{-ik_e\alpha_p h(x_p)}dx_p$ se fait en utilisant la méthode des phases stationnaires. Notons $x_p^s$ un point stationnaire vérifiant $h'(x_p^s) = 0$, soit $x_p^s = \frac{\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}x_{p-1}$. Puisque $h''(x_p^s) = 2 > 0$ et $h(x_p^s) = 0$, l'intégrale $\mathcal{C}_{x_p}$ (ou de façon similaire $\mathcal{C}_{y_p}$) s'écrit en utilisant Eq. G.11 :

$$\mathcal{C}_{x_p} = \mathcal{C}_{y_p} = \sqrt{\frac{\pi}{k_e\alpha_p}}e^{-i\frac{\pi}{4}} = \sqrt{\frac{2\pi}{k_e}\frac{\xi_p\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}}(1-i)\frac{\sqrt{2}}{2} \tag{G.19}$$

On en déduit alors que la contribution globale $\mathcal{C}_{x,y} = \prod_{p=1}^{n-1}\mathcal{C}_{x_p}\mathcal{C}_{y_p}$ à $\mathcal{I}_{n,1}$ selon les $x_p$ et $y_p$ est obtenue en injectant Eq. G.19 dans la précédente équation :

$$\mathcal{C}_{x,y} = \prod_{p=1}^{n-1}\mathcal{C}_{x_p}\mathcal{C}_{y_p} = \prod_{p=1}^{n-1}\left[-\frac{2\pi i}{k_e}\xi_p\frac{\sum_{q=p+1}^{n}\xi_q}{\sum_{k=p}^{n}\xi_k}\right] = \left(-\frac{2\pi i}{k_e}\right)^{n-1}\prod_{p=1}^{n-1}\xi_p\frac{\xi_n}{\sum_{k=1}^{n}\xi_k} \tag{G.20}$$

En injectant Eq. G.20 dans Eq. G.10, l'intégrale $\mathcal{C}$ s'écrit

$$\mathcal{C} = \frac{e^{-ik_e\sum_{k=1}^{n}\xi_k}}{4\pi\prod_{k=1}^{n}\xi_k}\left(-\frac{2\pi i}{k_e}\right)^{n-1}\prod_{p=1}^{n}\xi_p\frac{1}{\sum_{k=1}^{n}\xi_k} = \left(-\frac{2\pi i}{k_e}\right)^{n-1}\frac{e^{-ik_e\sum_{k=1}^{n}\xi_k}}{4\pi\sum_{k=1}^{n}\xi_k} \tag{G.21}$$

Enfin, en injectant Eq. G.21 dans l'expression intégrale $\mathcal{I}_{n,1}$ (Eq. G.3) puis en remarquant que $\sum_{k=1}^{n}\xi_k = z_0 - z_n = \rho$, il vient

$$\mathcal{I}_{n,1} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{n-1}\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_n\int_{z_n}^{z_0}dz_1\int_{z_n}^{z_1}dz_2\cdots\int_{z_n}^{z_{n-2}}dz_{n-1}\left(-\frac{2\pi i}{k_e}\right)^{n-1}\frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho}e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_n} \tag{G.22}$$

En effectuant le changement de variable $\forall k \in [\![1, n-1]\!]$, $\xi_k = |z_k - z_{k-1}| = z_{k-1} - z_k \approx \rho_k$ dans les intégrales $\int_{z_n}^{z_{k-1}}dz_k$, il vient :

$$\int_{z_n}^{z_{k-1}}dz_k = -\int_{z_{k-1}-z_n}^{0}d\rho_k = \int_{0}^{z_{k-1}-z_n}d\rho_k = \int_{0}^{\rho-\rho_1-\cdots-\rho_{k-1}}d\rho_k$$

où l'on a utilisé le fait que

$$z_{k-1} - z_n = \underbrace{z_0 - z_n}_{\rho} + \underbrace{z_1 - z_0}_{-\rho_1} + \underbrace{z_2 - z_1}_{-\rho_2} + \cdots + \underbrace{z_{k-1} - z_{k-2}}_{-\rho_{k-1}} = \rho - \rho_1 - \rho_2 - \cdots - \rho_{k-1}$$

Ainsi, en effectuant ce changement de variable dans l'intégrale $\mathcal{I}_{n,1}$ (Eq. G.22), il vient en utilisant ce qui précède :

$$\mathcal{I}_{n,1} = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{n-1}\iiint_{\mathcal{V}_p}d\vec{r}_n\int_{0}^{\rho}d\rho_1\int_{0}^{\rho-\rho_1}d\rho_2\cdots\int_{0}^{\rho-\rho_1-\cdots-\rho_{n-2}}d\rho_{n-1}\left(-\frac{2\pi i}{k_e}\right)^{n-1}\frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho}e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_n} \tag{G.23}$$

Les intégrales portant sur $\rho_k$, $k \in [\![1, n-1]\!]$ sont calculées en utilisant la relation suivante :

$$\forall l \in [\![0, n-2]\!] \qquad \int_0^{\eta_{n-2-l}} \left(\eta_{n-2-l} - \rho_{n-1-l}\right)^l d\rho_{n-1-l} = \frac{\eta_{n-2-l}^{l+1}}{l+1} \tag{G.24}$$

où $\eta_{n-2-l} = \rho - \sum_{q=1}^{n-2-l} \rho_q$. Lorsque $l = n-2$, on pose $\sum_{q=1}^{0} \rho_q = 0$ d'où $\eta_0 = \rho = z_0 - z_n$. En utilisant Eq. G.24, l'intégrale $\mathcal{I}_{n,1}$ (Eq. G.23) s'écrit après calcul :

$$\mathcal{I}_{n,1} = \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{n-1} \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} \frac{\rho^{n-1}}{(n-1)!} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_n} d\vec{r}_n \tag{G.25}$$

Nous venons de calculer le terme $\mathcal{I}_{n,1}$ présent dans l'équation Eq. G.1. Il ne reste donc plus qu'à calculer le terme $\mathcal{I}_{n+m,n+1}$ (voir Eq. G.1) dont on rappelle l'expression ci-dessous :

$$\forall m \in \mathbb{N}^* \qquad \mathcal{I}_{m+n,n+1} = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+m} \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+1} \left[\prod_{k=n+1}^{n+m} g(\vec{r}_k, \vec{r}_{k-1})\right] e^{-i\vec{k}_i \cdot \sum_{k=n+1}^{n+m} \vec{\rho}_k} \tag{G.26}$$

En remplaçant les fonctions de Green $g(\vec{r}_k, \vec{r}_{k-1}) = \frac{e^{-ik_e\rho_k}}{4\pi\rho_k}$, il vient

$$\mathcal{I}_{m+n,n+1} = \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+m} \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+m-1} \cdots \iiint_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_{n+1} \frac{e^{-i\sum_{k=n+1}^{n+m} (k_e\rho_k + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_k)}}{\prod_{k=n+1}^{n+m} 4\pi\rho_k} \tag{G.27}$$

qui peut également s'écrire d'une manière plus compacte sous la forme

$$\mathcal{I}_{n+m,n+1} = \prod_{k=n+1}^{n+m} \left[\iiint_{\mathcal{V}_{p,k}} \frac{e^{-i(k_e\rho_k + \vec{k}_i\cdot\vec{\rho}_k)}}{4\pi\rho_k} d\vec{r}_k\right] \tag{G.28}$$

En injectant Eq. III.163 dans Eq. G.28, il vient

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_{n+m,n+1} &= \prod_{k=n+1}^{n+m} \left[-\frac{i}{2k_e} \int_0^{+\infty} H(\vec{r}_k = \vec{r}_{k-1} - \rho_k\vec{e}_i \in \mathcal{V}_p) d\rho_k\right] \\
&= \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^m \prod_{k=n+1}^{n+m} \left[\int_0^{+\infty} H(\vec{r}_k = \vec{r}_{k-1} - \rho_k\vec{e}_i \in \mathcal{V}_p) d\rho_k\right] \\
&= \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^m \prod_{k=n+1}^{n+m} \left[\int_0^{\tilde{\rho} - \sum_{q=n+1}^{k-1} \rho_q} d\rho_k\right] \\
&= \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^m \int_0^{\tilde{\rho}} d\rho_{n+1} \int_0^{\tilde{\rho}-\rho_{n+1}} d\rho_{n+2} \cdots \int_0^{\tilde{\rho}-\rho_{n+1}-\cdot\rho_{n+m-1}} d\rho_{n+m}
\end{aligned} \tag{G.29}$$

Le calcul des intégrales se fait en utilisant la relation suivante :

$$\forall l \in [\![0, m-1]\!] \qquad \int_0^{\eta_{n+m-1-l}} \left(\eta_{n+m-1-l} - \rho_{n+m-l}\right)^l d\rho_{n+m-l} = \frac{\eta_{n+m-1+l}^{l+1}}{l+1} \tag{G.30}$$

où $\eta_{n+m-1+l} = \tilde{\rho} - \sum_{q=n+1}^{n+m-1-l} \rho_q$. Lorsque $l = m-1$, on pose $\sum_{q=n+1}^{n} \rho_q = 0$ soit $\eta_n = \tilde{\rho} = z_n - z_n^{\text{in}}$. En utilisant Eq. G.30, le produit des intégrales présent dans $\mathcal{I}_{n+m,n+1}$ (Eq. G.29) s'écrit

$$\int_0^{\tilde{\rho}} d\rho_{n+1} \int_0^{\tilde{\rho}-\rho_{n+1}} d\rho_{n+2} \cdots \int_0^{\tilde{\rho}-\rho_{n+1}-\cdot\rho_{n+m-1}} d\rho_{n+m} = \frac{\tilde{\rho}^m}{m!} = \frac{(z_n - z_n^{\text{in}})^m}{m!} \tag{G.31}$$

En injectant Eq. G.31 dans Eq. G.29, il vient

$$\mathcal{I}_{n+m,n+1} = \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^m \frac{(z_n - z_n^{\text{in}})^m}{m!} \tag{G.32}$$

Enfin, en injectant Eqs. G.32 et G.25 dans l'expression $\mathcal{I}_{n+m} = \mathcal{I}_{n+m,n+1} \times \mathcal{I}_{n,1}$ (Eq. G.1), il vient

$$\mathcal{I}_{n+m} = \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^m \frac{(z_n - z_n^{\text{in}})^m}{m!} \left(-\frac{i}{2k_e}\right)^{n-1} \iiint_{\mathcal{V}_p} \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} \frac{\rho^{n-1}}{(n-1)!} e^{-i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_n} d\vec{r}_n \tag{G.33}$$

## G.2 Section efficace différentielle aux grands angles de diffusion

L'objectif de cette section est de montrer comment on arrive à l'expression simplifiée de la section efficace différentielle aux grands angles de diffusion qui a été proposée par Jérémi Dauchet [Dauchet, 2012; Charon et al., 2016]. On rappelle qu'elle est donnée par Eq. III.200 :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = \frac{A}{\sin^B(\vartheta_{sca}/2)} \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \tag{G.34}$$

Pour obtenir Eq. G.34, repartons de l'expression de la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ d'une particule isolée (voir Eq. III.199 dans Sec. III.6.3), que nous rappelons ci-dessous :

$$\begin{aligned}\hat{W}_{sca}(\vec{e}_s, \vec{e}_i, \vec{e}_o, r_{eq}) = &\left(\frac{k_e^2}{2\pi}\right)^2 |m_r - 1|^2 \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \\ &\times \left| \iiint_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o, r_{eq})} e^{-ik_e(\vec{e}_i - \vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0} e^{-ik_e(m_r-1)\left[l^{in}(\vec{r}_0,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) + l^{out}(\vec{r}_0,\vec{e}_s,\vec{e}_o,r_{eq})\right]} d\vec{r}_0 \right|^2\end{aligned} \tag{G.35}$$

Pour des raisons de lisibilités, nous choisissons d'écrire Eq. G.35 sous une forme plus compacte :

$$\hat{W}_{sca}(\vec{e}_s, \vec{e}_i, \vec{e}_o, r_{eq}) = \left(\frac{k_e^2}{2\pi}\right)^2 |m_r - 1|^2 \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \left| \iiint_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o, r_{eq})} t(\vec{r}_0) h(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \right|^2 \tag{G.36}$$

où l'on a posé

$$\begin{aligned} t(\vec{r}_0) &= e^{-k_e\kappa_r l^{tot}(\vec{r}_0)} \\ h(\vec{r}) &= e^{-ik_e\left[(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot\vec{r}_0+(n_r-1)l^{tot}(\vec{r}_0)\right]} \\ l^{tot}(\vec{r}_0) &= l^{in}(\vec{r}_0,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) + l^{out}(\vec{r}_0,\vec{e}_s,\vec{e}_o,r_{eq}) \end{aligned} \tag{G.37}$$

Afin de traiter la non-linéarité due au module carré, on utilise le résultat donné par Eq. II.23. Le module carré de cette intégrale de fonctions complexes est exprimée comme deux intégrales sur deux positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ :

$$\begin{aligned} \left|\iiint_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})} t(\vec{r}_0)h(\vec{r}_0)d\vec{r}_0\right|^2 = \iiint_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})}\iiint_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})} t(\vec{r}_1)t(\vec{r}_2) \\ \times\left[\mathfrak{Re}\,h(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\,h(\vec{r}_2)+\mathfrak{Im}\,h(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\,h(\vec{r}_2)\right]d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned} \tag{G.38}$$

Le terme $\mathfrak{Re}\,h(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\,h(\vec{r}_2)+\mathfrak{Im}\,h(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\,h(\vec{r}_2)$ s'écrit après calcul :

$$\begin{aligned} \mathfrak{Re}\,h(\vec{r}_1)\mathfrak{Re}\,h(\vec{r}_2)+\mathfrak{Im}\,h(\vec{r}_1)\mathfrak{Im}\,h(\vec{r}_2) = \\ \cos\left[k_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)+k_e(n_r-1)(l^{tot}(\vec{r}_1)-l^{tot}(\vec{r}_2)\right] \end{aligned} \tag{G.39}$$

En utilisant Eq. G.39 et le fait que $t(\vec{r}_1)t(\vec{r}_2) = e^{-k_e\kappa_r(l^{tot}(\vec{r}_1)+l^{tot}(\vec{r}_2))}$, Eq. G.38 devient

$$\begin{aligned} \left|\iiint_{\mathcal{V}_p} t(\vec{r}_0)h(\vec{r}_0)d\vec{r}_0\right|^2 = \iiint_{\mathcal{V}_p}\iiint_{\mathcal{V}_p} e^{-k_e\kappa_r[l^{tot}(\vec{r}_1)+l^{tot}(\vec{r}_2)]} \\ \times\cos\left[2k_e\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\vec{e}_{is}\cdot\vec{\rho}+k_e(n_r-1)(l^{tot}(\vec{r}_1)-l^{tot}(\vec{r}_2))\right]d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \end{aligned} \tag{G.40}$$

où l'on a posé $\vec{\rho}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$ et $\vec{e}_i-\vec{e}_s = 2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\vec{e}_{is}$ avec $\vec{e}_{is}$ le vecteur unitaire donné par :

$$\vec{e}_{is} = \begin{pmatrix} \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2} \\ -\cos\frac{\vartheta_{sca}}{2}\cos\phi_{sca} \\ -\cos\frac{\vartheta_{sca}}{2}\sin\phi_{sca} \end{pmatrix} \tag{G.41}$$

En injectant Eq. G.41 dans Eq. G.36, puis en introduisant les fonctions densités de probabilité $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)$ et $p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)$ des positions $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$, puis en tenant compte des distributions de taille et d'orientation des particules, la formulation intégrale de Monte Carlo estimant la section efficace différentielle de diffusion aux grands angles d'une suspension de particules s'écrit :

$$\begin{aligned} W_{sca}(\vec{e}_s,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)\int_0^{+\infty} dr_{eq}p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times\int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o,r_{eq})} d\vec{r}_2 p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2)w(\vec{e}_s,\vec{e}_i,\vec{e}_o,r_{eq}) \end{aligned} \tag{G.42}$$

avec $w(\vec{e}_s, \vec{e}_i, \vec{e}_o, r_{eq})$ le poids de Monte Carlo :

$$w(\vec{e}_s, \vec{e}_i, \vec{e}_o, r_{eq}) = \left(\frac{k_e^2 V_p^2}{2\pi}\right)^2 |m_r - 1|^2 \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} e^{-k_e \kappa_r [l^{tot}(\vec{r}_1)+l^{tot}(\vec{r}_2)]} \times \cos\left[k_e\left(2\sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}\vec{e}_{is}\cdot\vec{\rho} + (n_r-1)(l^{tot}(\vec{r}_1)-l^{tot}(\vec{r}_2))\right)\right] \tag{G.43}$$

où l'on a choisi des fonctions densités de probabilité uniformes $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) = p_{\vec{R}_2}(\vec{r}_2) = \frac{1}{V_p}$ avec $V_p$ le volume de la particule.

La formulation intégrale Eq. G.42 pose des difficultés numériques liées à la présence d'oscillations rapides dans le poids de Monte Carlo entraînant des problèmes de convergences [Dauchet, 2012]. Plus précisément, l'argument du cosinus (voir Eq. G.43) oscille rapidement entre $-1$ et 1 autour de 0 dès lors que $\|\vec{\rho}\| > \frac{1}{2k_e \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}}$. Dans la mesure où nous nous sommes placé dans le cadre $x = k_e a \gg 1$, cette situation correspond à une importante partie du domaine d'intégration. L'application du principe des phases stationnaires nous permet d'extraire la principale région du domaine d'intégration fournissant une contribution non nulle à l'intégrale. Cette région, dite de phase stationnaire, est obtenue lorsque $\|\vec{\rho}\| = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\| < \frac{1}{2k_e \sin\frac{\vartheta_{sca}}{2}}$. Autrement dit, lorsque la position $\vec{r}_1$ est très proche de la position $\vec{r}_2$ : $\vec{r}_1 \approx \vec{r}_2$. Si l'on néglige les effets de frontière liés au volume de la particule $\mathcal{V}_p$, le volume de cette région correspond à $V^{ps} = \frac{4\pi}{3(k_e 2\sin(\vartheta_{sca}/2)^3}$ quelque soit $\vec{r}_1$. De plus, le fait que $\vec{r}_1 \approx \vec{r}_2$ entraînent que $l^{tot}(\vec{r}_1) \approx l^{tot}(\vec{r}_2)$). Ainsi, dans sa thèse [Dauchet, 2012], Jérémi Dauchet a obtenu une expression simplifiée de la section efficace différentielle de diffusion aux grands angles :

$$W_{sca}(\vec{e}_s) \approx \frac{|m_r-1|^2}{4k_e} \frac{1}{\sin^3\frac{\vartheta_{sca}}{2}} \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \times \int_{\mathcal{V}_p(\vec{e}_o, r_{eq})} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) e^{-2k_e\kappa_r l^{tot}(\vec{r}_1)} \tag{G.44}$$

Il constate également que les variations des termes intégrales en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ sont négligeables devant les variations des termes en préfacteurs. Il obtient ainsi la tendance de la section efficace différentielle de diffusion aux grands angles :

$$W_{sca}(\vartheta_{sca}) \propto \frac{1}{\sin^3(\vartheta_{sca}/2)} \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \tag{G.45}$$

De cette expression, nous proposons d'introduire deux paramètres $A$ et $B$ de sorte que Eq. G.45 s'écrive :

$$\hat{W}_{sca}(\vartheta_{sca}) = \frac{A}{\sin^B(\vartheta_{sca}/2)} \frac{1+\cos^2(\vartheta_{sca})}{2} \tag{G.46}$$

Ces deux paramètres $A$ et $B$ sont déterminés de sorte à vérifier :

1. la continuité de $\hat{W}_{sca}$ en $\vartheta_{sca} = \theta_l$ ($\theta_l$ étant l'angle limite entre les petits et les grands angles) :

2. l'égalité entre l'intégrale de $\hat{W}_{sca}$ sur l'angle solide total et la section efficace de diffusion $\hat{\sigma}_{sca} = 2\pi \int_0^{\pi} d\vartheta_{sca} \sin\vartheta_{sca} W_{sca}(\vartheta_{sca})$.

Davantage de détails sur l'obtention de ces paramètres sont fournis en Annexe G de la référence suivante [Charon et al., 2016].

## G.3 Comparaison des résultats de l'approximation de Schiff avec ceux obtenus expérimentalement à l'Institut Fresnel, et ceux de référence obtenus avec T-Matrix

Cette annexe regroupe les résultats concernant l'étude des sphéroïdes *Laurel* et *Hardy* pour les indices de réfraction de mousse $n_m = 1.17$ et $n_m = 1.20$ (voir Fig. IV.26).

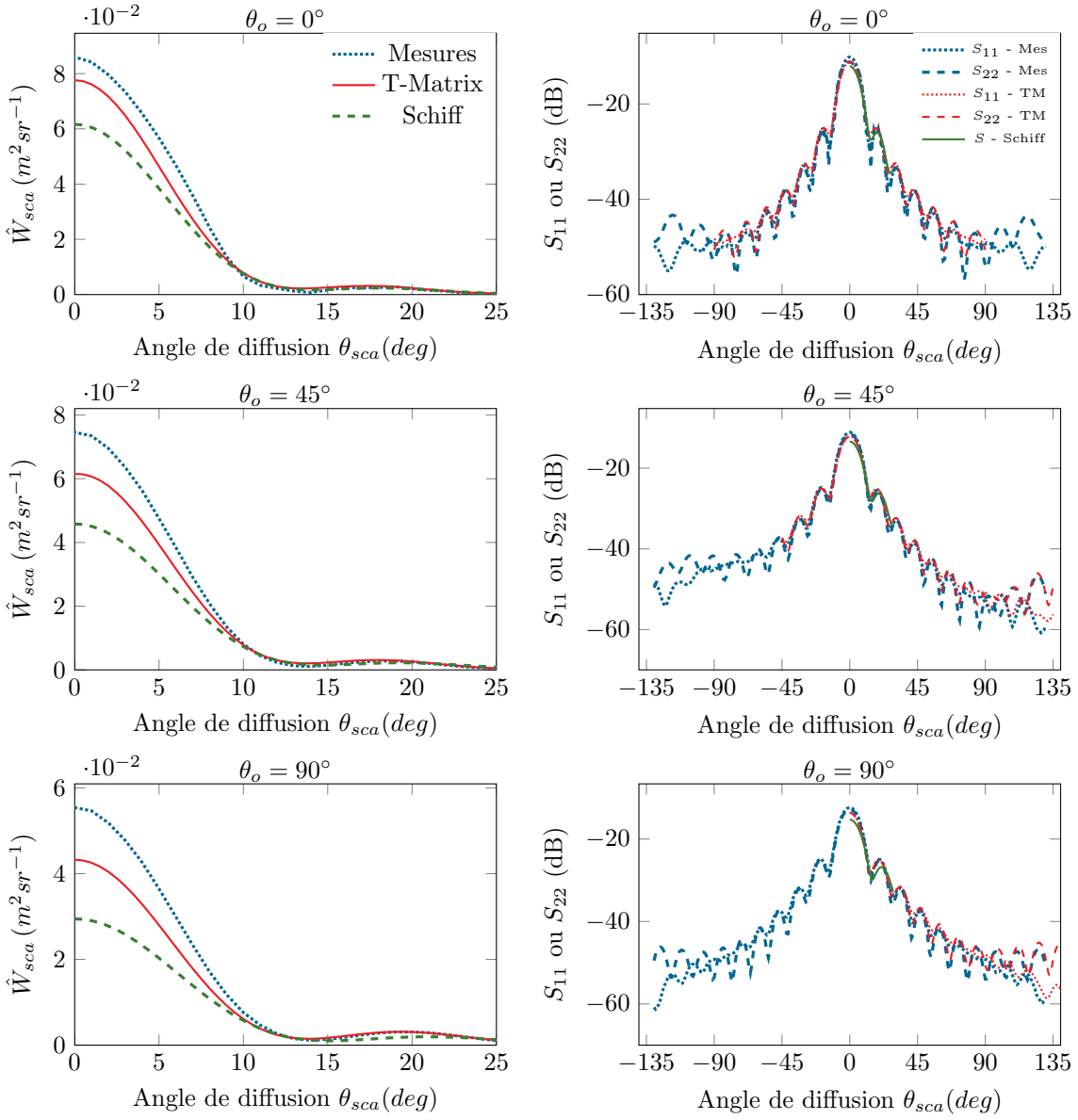



FIGURE G.2 – Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (colonne de gauche) et éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ (colonne de droite) de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ du sphéroïde *Hardy* pour trois orientations $\theta_o$ différentes ($\theta_o = 0°, 45°$ et $90°$). Comparaisons entre les résultats expérimentaux (bleu), la référence T-Matrix (rouge) et l'approximation de Schiff (vert). Paramètres : $x \approx 14, n_r = 1.17, \kappa_r = 0, R = 0.833, f = 18\,GHz\,(\lambda_e \approx 16.7\,mm)$.

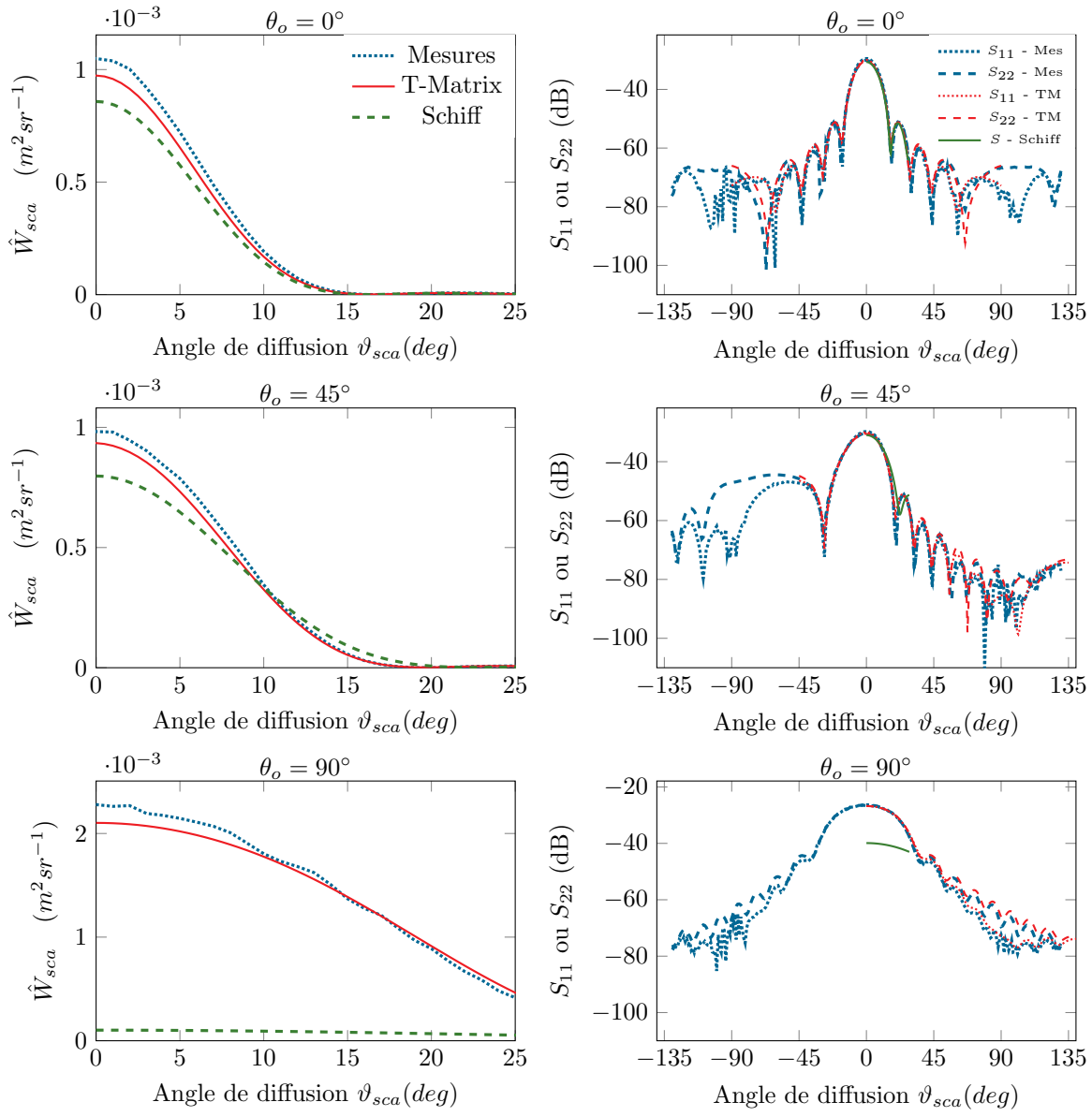



FIGURE G.3 – Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (colonne de gauche) et éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ (colonne de droite) de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ du sphéroïde *Laurel* pour trois orientations $\theta_o$ différentes ($\theta_o = 0°, 45°$ et $90°$). Comparaisons entre les résultats expérimentaux (bleu), la référence T-Matrix (rouge) et l'approximation de Schiff (vert). Paramètres : $x \approx 5.5, n_r = 1.17, \kappa_r = 0, R = 0.202, f = 18\,GHz\,(\lambda_e \approx 16.7\,mm)$.

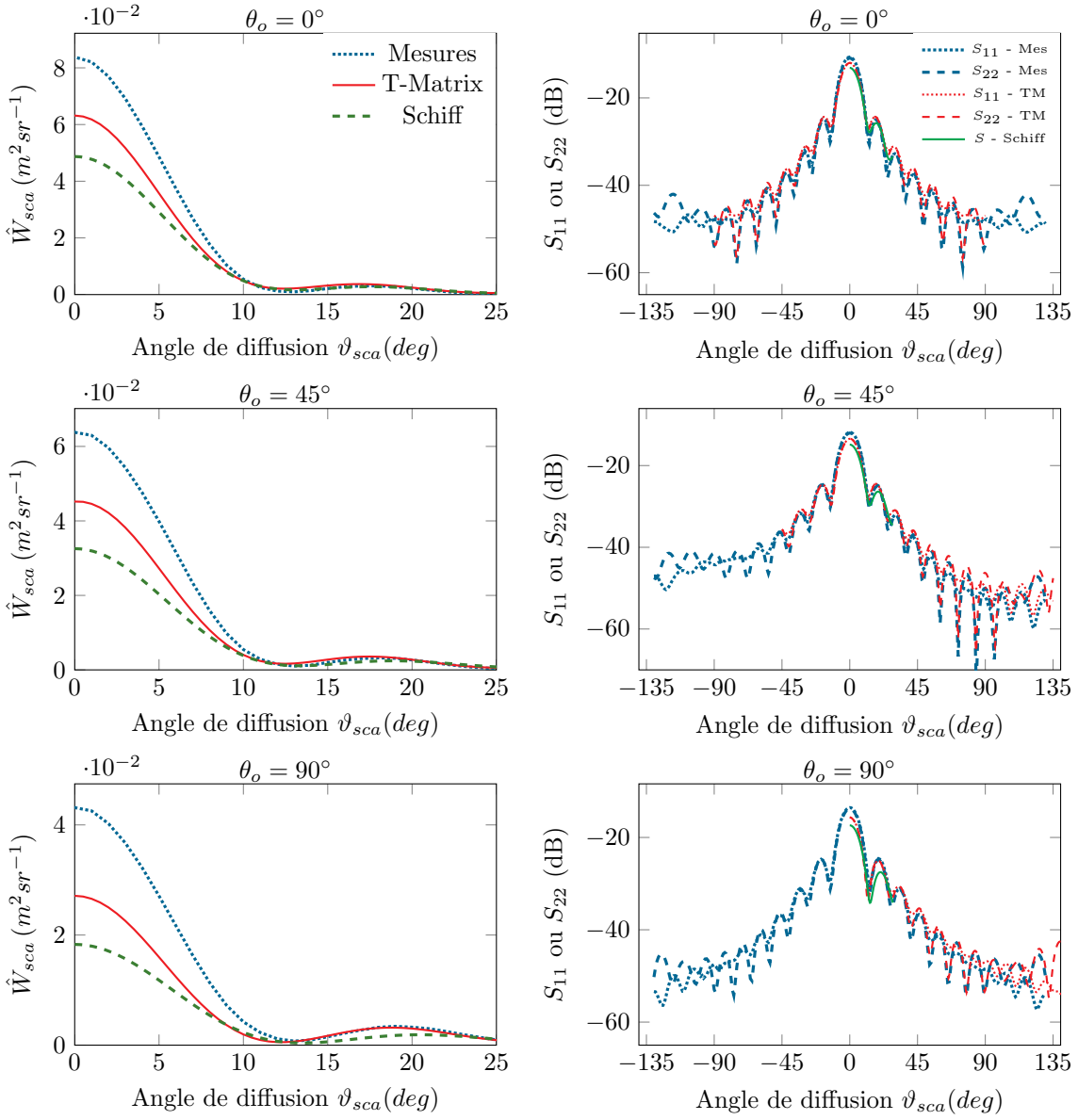



FIGURE G.4 – Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (colonne de gauche) et éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ (colonne de droite) de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ du sphéroïde *Hardy* pour trois orientations $\theta_o$ différentes ($\theta_o = 0°, 45°$ et $90°$). Comparaisons entre les résultats expérimentaux (bleu), la référence T-Matrix (rouge) et l'approximation de Schiff (vert). Paramètres : $x \approx 14, n_r = 1.20, \kappa_r = 0, R = 0.833, f = 18\,GHz\,(\lambda_e \approx 16.7\,mm)$.

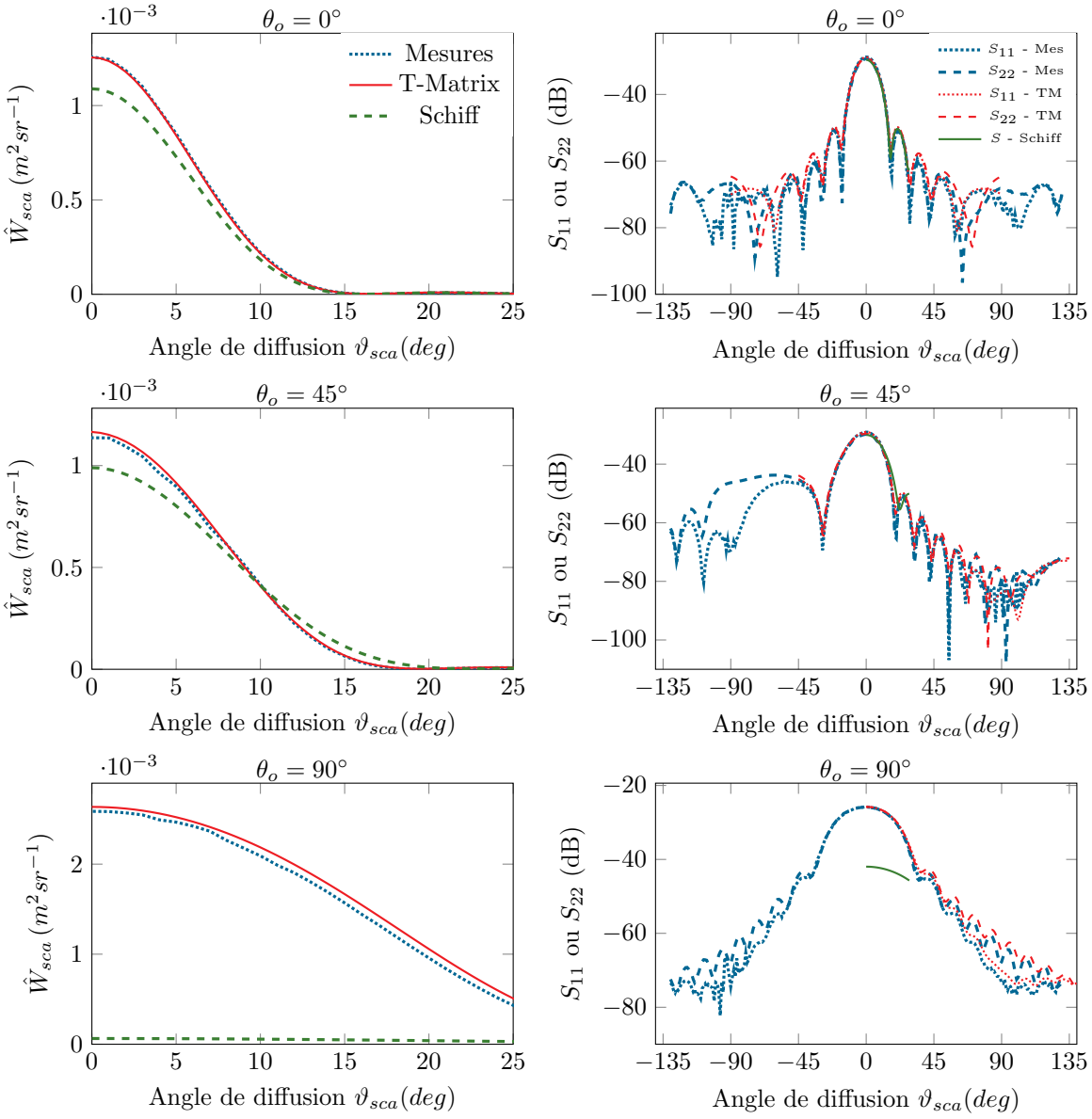



FIGURE G.5 – Section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ (colonne de gauche) et éléments $S_{11}$ et $S_{22}$ (colonne de droite) de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ du sphéroïde *Laurel* pour trois orientations $\theta_o$ différentes ($\theta_o = 0°, 45°$ et $90°$). Comparaisons entre les résultats expérimentaux (bleu), la référence T-Matrix (rouge) et l'approximation de Schiff (vert). Paramètres : $x \approx 5.5, n_r = 1.20, \kappa_r = 0, R = 0.202, f = 18\,GHz\,(\lambda_e \approx 16.7\,mm)$.

# ANNEXE H

# Compléments sur l'approximation de Born

## H.1 Démonstration de Eq.III.92

L'objet de cette section est de démontrer l'expression Eq.III.92, et plus précisément de montrer le lien entre les éléments $p_{pq}^2$, $(p,q) \in [\![2,3]\!]^2$ et l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$. Pour ce faire, calculons dans un premier temps la quantité $P_{sc} = P_{sc} = p_{22}^2 + p_{23}^2 + p_{32}^2 + p_{33}^2$ où les éléments $p_{pq}$ sont donnés par :

$$p_{22} = \cos\theta_s \cos\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + \sin\theta_s \sin\theta_i \quad p_{23} = \cos\theta_s \sin(\varphi_s - \varphi_i)$$
$$p_{32} = -\cos\theta_i \sin(\varphi_s - \varphi_i) \quad p_{33} = \cos(\varphi_s - \varphi_i)$$

En utilisant les relations précédentes, il vient :

$$\begin{aligned}
P_{sc} &= (\cos\theta_s \cos\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + \sin\theta_s \sin\theta_i)^2 + \cos^2\theta_s \sin^2(\varphi_s - \varphi_i) \\
&\quad + \cos^2\theta_i \sin^2(\varphi_s - \varphi_i) + \cos^2(\varphi_s - \varphi_i) \\
&= \cos^2\theta_s \cos^2\theta_i \cos^2(\varphi_s - \varphi_i) + \sin^2\theta_s \sin^2\theta_i \\
&\quad + 2\cos\theta_s \cos\theta_i \sin\theta_s \sin\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + \cos^2\theta_s \sin^2(\varphi_s - \varphi_i) \\
&\quad + \cos^2\theta_i \sin^2(\varphi_s - \varphi_i) + \cos^2(\varphi_s - \varphi_i) \\
&= (1 - \sin^2\theta_s)(1 - \sin^2\theta_i)\cos^2(\varphi_s - \varphi_i) + (1 - \cos^2\theta_s)(1 - \cos^2\theta_i) \\
&\quad + 2\cos\theta_s \cos\theta_i \sin\theta_s \sin\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + \cos^2\theta_s(1 - \cos^2(\varphi_s - \varphi_i)) \\
&\quad + \cos^2\theta_i(1 - \cos^2(\varphi_s - \varphi_i)) + \cos^2(\varphi_s - \varphi_i)
\end{aligned}$$

En développant la dernière égalité, puis en simplifiant, il vient

$$\begin{aligned}
P_{sc} &= \cos^2\theta_s \cos^2\theta_i + \sin^2\theta_s \sin^2\theta_i \cos^2(\varphi_s - \varphi_i) \\
&\quad + 2\cos\theta_s \cos\theta_i \sin\theta_s \sin\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i) + 1
\end{aligned}$$

Par ailleurs, en calculant $\cos\vartheta_{sca} = \vec{e}_i \cdot \vec{e}_s$, où $\vartheta_{sca}$ représente l'angle entre $\vec{e}_i$ et $\vec{e}_s$, il vient

$$\cos\vartheta_{sca} = \cos\theta_s \cos\theta_i + \sin\theta_s \sin\theta_i \cos(\varphi_s - \varphi_i)$$

Puis, en calculant $\cos^2\vartheta_{sca}$, on montre que

$$P_{sc} = p_{22}^2 + p_{23}^2 + p_{32}^2 + p_{33}^2 = \cos^2\vartheta_{sca} + 1$$

## H.2 Expression de la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ à partir du vecteur de Poynting

### H.2.1 Rappel vecteur de Poynting

Les ondes électromagnétiques transportent de l'énergie comme on peut s'en convaincre avec la lumière et la chaleur que nous recevons des rayons du Soleil. Plus précisément, cette énergie qui transportée par les champs est décrite par le **vecteur de Poynting**[1]. En régime temporel, le vecteur de Poynting s'écrit :

$$\vec{\Pi}(\vec{r},t) = \vec{E}(\vec{r},t) \wedge \vec{H}(\vec{r},t) \tag{H.1}$$

En régime harmonique, on définit un vecteur de Poynting dit *complexe* (plus rigoureusement à partir de grandeurs complexes) [Jackson, 1998] donné par (voir également Encart 12) :

$$\vec{\Pi}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r}) \tag{H.2}$$

où $^*$ désigne la conjugaison. La valeur moyenne temporelle du vecteur de Poynting s'écrit :

$$\langle\vec{\Pi}\rangle = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left(\vec{\mathscr{E}} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*\right) \tag{H.3}$$

Le vecteur de Poynting est exprimé en watt par mètre carré ($W \cdot m^{-2}$) et représente le flux d'énergie électromagnétique véhiculée par l'onde dans la direction déterminée par le produit vectoriel. Ce vecteur étant à la fois perpendiculaire aux champs électrique et magnétique, il fournit une indication sur la direction du transport d'énergie qui correspond également à la direction de propagation de l'onde. Le flux (sortant) du vecteur de Poynting à travers une surface $\Sigma$ est égale à la puissance véhiculée par l'onde. À titre d'illustration, et également parce que nous en aurons besoin par la suite, nous proposons de calculer la puissance par unité de surface véhiculée par une onde plane incidente non polarisée. Compte tenu du fait que l'onde considérée est plane, les champs électrique et magnétique sont donnés par :

$$\vec{\mathscr{E}}_{inc} = e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}}\vec{\mathscr{E}}_{0,inc} = \mathscr{E}_{0,inc}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}}\vec{u}_i \tag{H.4}$$

$$\vec{\mathscr{H}}_{inc} = \sqrt{\frac{\varepsilon_e}{\mu_0}}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}}\vec{e}_i \wedge \vec{\mathscr{E}}_{0,inc} = \mathscr{E}_{0,inc}\sqrt{\frac{\varepsilon_e}{\mu_0}}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}}\vec{e}_i \wedge \vec{u}_i \tag{H.5}$$

où l'on a posé $\vec{\mathscr{E}}_{0,inc} = \mathscr{E}_{0,inc}\vec{u}_i$, $\vec{u}_i$ est un vecteur unitaire donnant la direction de polarisation du champ incident $\vec{\mathscr{E}}_{inc}$ et vérifie $\vec{u}_i \cdot \vec{e}_i = 0$. En injectant Eqs. H.4 et H.5 dans la définition du vecteur de Poynting Eq. H.2, on obtient

$$I_{inc} = |\langle\vec{\Pi}_{inc}\rangle| = \frac{1}{2}\left|\mathfrak{Re}\left(\vec{\mathscr{E}}_{inc} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*_{inc}\right)\right| = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_e}{\mu_0}}|\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}|^2 \tag{H.6}$$

1. John Henry Poynting (1852 - 1914) : physicien anglais

**Encart 12: Vecteur de Poynting à partir de grandeurs complexes**

La définition du vecteur de Poynting complexe est délicate (inspiré de la définition dans le régime temporel, on pourrait être tenté d'écrire une formule complètement fausse : $\vec{\Pi}(\vec{r},t) = \vec{\mathscr{E}}(\vec{r},t) \wedge \vec{\mathscr{H}}(\vec{r},t)$) et mérite de s'y arrêter un instant. Pour ce faire, partons du vecteur de Poynting défini dans le domaine temporel et calculons le en introduisant avec précaution les grandeurs complexes :

$$\begin{aligned}
\vec{E}(\vec{r},t) \wedge \vec{H}(\vec{r},t) &= \mathfrak{Re}\left[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})e^{-i\omega t}\right] \wedge \mathfrak{Re}\left[\vec{\mathscr{H}}(\vec{r})e^{-i\omega t}\right] \\
&= \frac{1}{4}\left[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})e^{-i\omega t} + \vec{\mathscr{E}}^*(\vec{r})e^{i\omega t}\right] \wedge \left[\vec{\mathscr{H}}(\vec{r})e^{-i\omega t} + \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r})e^{i\omega t}\right] \\
&= \frac{1}{4}\Big[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r}) + \vec{\mathscr{E}}^*(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}(\vec{r}) \\
&\qquad + \vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}(\vec{r})e^{-2i\omega t} + \vec{\mathscr{E}}^*(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r})e^{2i\omega t}\Big] \\
&= \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r})\right] + \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}(\vec{r})e^{2i\omega t}\right]
\end{aligned}$$

En prenant la valeur moyenne temporelle de cette quantité il vient,

$$\langle \vec{E}(\vec{r},t) \wedge \vec{H}(\vec{r},t) \rangle = \frac{1}{T}\int_0^T \vec{E}(\vec{r},t) \wedge \vec{H}(\vec{r},t)dt = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left[\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r})\right] \tag{H.7}$$

où $T = 2\pi/\omega$. On définit alors le vecteur de Poynting complexe comme

$$\vec{\Pi}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{\mathscr{E}}(\vec{r}) \wedge \vec{\mathscr{H}}^*(\vec{r}) \tag{H.8}$$

et sa moyenne temporelle est donnée par $\langle \vec{\Pi} \rangle = \mathfrak{Re}\,\vec{\Pi}(\vec{r})$

### H.2.2 Puissance absorbée et section efficace d'absorption

La puissance absorbée par une particule est donnée à partir de la valeur moyenne du vecteur de Poynting $\langle \vec{\Pi} \rangle$ intégré sur la surface fermée $\Sigma$ d'une sphère $\mathcal{S}$ de volume $\mathcal{V}$ englobant la particule de volume $\mathcal{V}_p$ :

$$\mathcal{P}_{abs} = \oiint_\Sigma \langle \vec{\Pi} \rangle \cdot \vec{n}d\vec{s} = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\iiint_\mathcal{V} \mathrm{div}\,(\vec{\mathscr{E}} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*)d\vec{r} \tag{H.9}$$

où $\vec{n}$ est un vecteur unitaire normale à la surface $\mathcal{S}$ et où la moyenne du vecteur de Poynting est donnée par :

$$\langle \vec{\Pi} \rangle = \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\,(\vec{\mathscr{E}} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*) \tag{H.10}$$

Afin de déterminer une expression de la puissance absorbée $\mathcal{P}_{abs}$, nous partons de l'équation de Maxwell-Ampère :

$$\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\mathscr{H}} = \vec{\mathscr{J}} + i\omega\varepsilon_e\vec{\mathscr{E}} \tag{H.11}$$

où $\varepsilon_e$ est la permittivité du milieu extérieur à la particule. En prenant le conjugué de cette équation et en multipliant l'équation obtenue par $\vec{\mathscr{E}}$, il vient :

$$\vec{\mathscr{E}} \cdot \overrightarrow{\text{rot}}\, \vec{\mathscr{H}}^* = \vec{\mathscr{E}} \cdot \vec{\mathscr{J}}^* - i\omega\varepsilon_e \vec{\mathscr{E}} \cdot \vec{\mathscr{E}}^* \tag{H.12}$$

En utilisant le fait que $\text{div}\,(\vec{u} \wedge \vec{v}) = \vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{rot}}\, \vec{u} - \vec{u} \cdot \overrightarrow{\text{rot}}\, \vec{v}$, il vient :

$$\begin{aligned} \vec{\mathscr{H}}^* \cdot \overrightarrow{\text{rot}}\, \vec{\mathscr{E}} - \text{div}\,(\vec{\mathscr{E}} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*) &= \vec{\mathscr{E}} \cdot \vec{\mathscr{J}}^* - i\omega\varepsilon_e |\vec{\mathscr{E}}|^2 \\ \Leftrightarrow -i\omega\mu_0 |\vec{\mathscr{H}}|^2 - \text{div}\,(\vec{\mathscr{E}} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*) &= \vec{\mathscr{E}} \cdot \vec{\mathscr{J}}^* - i\omega\varepsilon_e |\vec{\mathscr{E}}|^2 \end{aligned}$$

En prenant la moitié de la partie réelle de l'équation précédente, il vient :

$$\mathfrak{Re}\left[\frac{1}{2}\text{div}\,(\vec{\mathscr{E}} \wedge \vec{\mathscr{H}}^*)\right] = -\frac{1}{2}\mathfrak{Re}\,(\vec{\mathscr{E}} \cdot \vec{\mathscr{J}}^*) \tag{H.13}$$

En utilisant Eqs. H.10 et H.13 dans l'expression Eq. H.9, la puissance absorbée s'écrit :

$$\mathcal{P}_{abs} = -\frac{1}{2}\mathfrak{Re} \iiint_{\mathcal{V}} \vec{\mathscr{E}} \cdot \vec{\mathscr{J}}^* d\vec{r} \tag{H.14}$$

Dans le cadre de notre problème de diffusion, nous avons $\vec{\mathscr{J}} = -i\omega\varepsilon_e(1 - m_r^2)\vec{\mathscr{E}}$ (voir Eq. III.34 dans Sec. III.2). Ainsi, la puissance absorbée Eq. H.14 s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{abs} &= \frac{1}{2}\mathfrak{Re}\left[\iiint_{\mathcal{V}} i\omega\varepsilon_e((m_r^2)^* - 1)|\vec{\mathscr{E}}|^2 dV\right] \\ &= \frac{1}{2}\omega\varepsilon_e \iiint_{\mathcal{V}} \mathfrak{Im}\left[(m_r^*)^2 - 1\right]|\vec{\mathscr{E}}|^2 d\vec{r} \\ &= \frac{1}{2}\omega\varepsilon_e \iiint_{\mathcal{V}} \mathfrak{Im}\left[(m_r^*)^2\right]|\vec{\mathscr{E}}|^2 d\vec{r} \end{aligned}$$

soit

$$\mathcal{P}_{abs} = \frac{1}{2}\omega\varepsilon_e \iiint_{\mathcal{V}} 2n_r\kappa_r |\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})|^2 d\vec{r} \tag{H.15}$$

Par définition la section efficace d'absorption est donnée par

$$\hat{\sigma}_{abs} = \frac{\mathcal{P}_{abs}}{I_{inc}} \tag{H.16}$$

avec $I_{inc}$ la puissance véhiculée par l'onde plane incidente donnée par (voir également Sec. H.2.1) :

$$I_{inc} = |\langle \vec{\Pi}_{inc} \rangle| = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_e}{\mu_0}}|\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}|^2 \tag{H.17}$$

En injectant Eqs. H.15 et H.17 dans Eq. H.16, on en déduit l'expression de la section efficace d'absorption $\hat{\sigma}_{abs}$ :

$$\hat{\sigma}_{abs} = \iiint_{\mathcal{V}_p} 2n_r\kappa_r \left|\frac{\vec{\mathscr{E}}(\vec{r})}{\vec{\mathscr{E}}_{0,inc}}\right|^2 d\vec{r} \tag{H.18}$$

## H.3 Calcul de sensibilités - Démonstration de Eq. H.28

Nous donnons ici les détails de calculs qui nous ont conduit à écrire la fonction poids $w_{\lambda_e,n}$ de la sensibilité $n^{\text{ème}}$ de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$, qui est donnée par Eq. H.28.

Rappelons tout d'abord que la fonction poids $w_{\lambda_e,n}$ est obtenue en calculant les dérivées par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$ de la fonction poids $w$ que nous rappelons ci-dessous (voir Eq. V.40) :

$$w(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},k_e)=\frac{k_e^4V_p^2}{8\pi^2}|m_r^2-1|^2\cos\left(k_e(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\right)(1+\cos^2\vartheta_{sca}) \tag{H.19}$$

On rappelle que la dépendance à la longueur d'onde $\lambda_e$ se fait par l'intermédiaire du nombre d'onde $k_e=\frac{2\pi}{\lambda_e}$ qui intervient dans la fonction cosinus ainsi que dans le facteur $k_e^4$ (voir Eq. H.19). Pour des raisons de simplicité et de clarté, nous introduisons les quantités :

$$\zeta=2\pi(\vec{e}_i-\vec{e}_s)\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2) \tag{H.20}$$

$$\xi=\frac{\pi^2}{2}|m_r^2-1|^2V_p^2(1+\cos\vartheta_{sca}) \tag{H.21}$$

de sorte à écrire $w$ (voir Eq. H.19) sous la forme :

$$w(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{e}_o,r_{eq},\lambda_e)=\frac{\xi}{\lambda_e^4}\cos\left(\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) \tag{H.22}$$

**Poids de Monte Carlo $w_{\lambda_e,1}$.**

$$\begin{aligned}w_{\lambda_e,1}=\frac{\partial w}{\partial\lambda_e}&=\xi\frac{\partial}{\partial\lambda_e}\left[\frac{1}{\lambda_e^4}\right]\cos\frac{\zeta}{\lambda_e}+\frac{\xi}{\lambda_e^4}\frac{\partial}{\partial\lambda_e}\left[\cos\frac{\zeta}{\lambda_e}\right]\\&=\frac{\xi}{\lambda_e^5}\left[-4\cos\frac{\zeta}{\lambda_e}+\frac{\zeta}{\lambda_e}\sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right]\\&=\frac{\xi}{\lambda_e^5}\left[U_1\cos\frac{\zeta}{\lambda_e}+V_1\sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right]\end{aligned} \tag{H.23}$$

où l'on a posé $U_1=-4$ et $V_1=\frac{\zeta}{\lambda_e}$.

**Poids de Monte Carlo $w_{\lambda_e,2}$.**

$$\begin{aligned}
w_{\lambda_e,2} &= \frac{\partial^2 w}{\partial \lambda_e^2} = \frac{\partial w_{\lambda_e,1}}{\partial \lambda_e} \\
&= \xi \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left[\frac{1}{\lambda_e^5}\right]\left(U_1 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_1 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) + \frac{\xi}{\lambda_e^5}\frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left[U_1 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_1 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \\
&= -5\frac{\xi}{\lambda_e^6}\left(U_1 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_1 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) \\
&\qquad + \frac{\xi}{\lambda_e^5}\left[U_1' \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + U_1 \frac{\partial \cos\frac{\zeta}{\lambda_e}}{\partial \lambda_e} + V_1' \sin\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_1 \frac{\partial \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}}{\partial \lambda_e}\right] \\
&= -5\frac{\xi}{\lambda_e^6}\left(U_1 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_1 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) \\
&\qquad + \frac{\xi}{\lambda_e^5}\left[U_1' \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + U_1 \frac{\zeta}{\lambda_e^2} \sin\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_1' \sin\frac{\zeta}{\lambda_e} - V_1 \frac{\zeta}{\lambda_e^2} \cos\frac{\zeta}{\lambda_e}\right]
\end{aligned} \tag{H.24}$$

où l'on a posé $U_1' = \frac{\partial U_1}{\partial \lambda_e} = 0$ et $V_1' = \frac{\partial V_2}{\partial \lambda_e} = -\frac{\zeta}{\lambda_e^2}$. En factorisant par $\frac{\xi}{\lambda_e^6}$ puis en regroupant les termes en sinus d'une part et en cosinus d'autre part, on obtient :

$$\begin{aligned}
w_{\lambda_e,2} &= \frac{\xi}{\lambda_e^6}\left[\left(-5U_1 + \lambda_e U_1' - \frac{\zeta}{\lambda_e} V_1\right)\cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + \left(-5V_1 + \lambda_e V_1' + \frac{\zeta}{\lambda_e} U_1\right)\sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \\
&= \frac{\xi}{\lambda_e^6}\left[U_2 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right]
\end{aligned} \tag{H.25}$$

où l'on a introduit :

$$\begin{aligned}
U_2 &= -5U_1 + \lambda_e U_1' - \frac{\zeta}{\lambda_e} V_1 = 20 - \frac{\zeta^2}{\lambda_e^2} \\
V_2 &= -5V_1 + \lambda_e V_1' + \frac{\zeta}{\lambda_e} U_1 = -\frac{10\zeta}{\lambda_e}
\end{aligned}$$

**Poids de Monte Carlo $w_{\lambda_e,3}$.**

$$\begin{aligned}
w_{\lambda_e,3} &= \frac{\partial^3 w}{\partial \lambda_e^3} = \frac{\partial w_{\lambda_e,2}}{\partial \lambda_e} \\
&= \xi \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left[\frac{1}{\lambda_e^6}\right]\left(U_2 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) + \frac{\xi}{\lambda_e^6}\frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left[U_2 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \\
&= \xi \frac{\partial}{\partial \lambda_e}\left[\frac{1}{\lambda_e^6}\right]\left(U_2 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) \\
&\qquad + \frac{\xi}{\lambda_e^6}\left[U_2' \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + U_2 \frac{\partial \cos\frac{\zeta}{\lambda_e}}{\partial \lambda_e} + V_2' \sin\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2 \frac{\partial \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}}{\partial \lambda_e}\right] \\
&= -6\frac{\xi}{\lambda_e^7}\left(U_2 \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2 \sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right) \\
&\qquad + \frac{\xi}{\lambda_e^6}\left[U_2' \cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + U_2 \frac{\zeta}{\lambda_e^2} \sin\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_2' \sin\frac{\zeta}{\lambda_e} - V_2 \frac{\zeta}{\lambda_e^2} \cos\frac{\zeta}{\lambda_e}\right]
\end{aligned} \tag{H.26}$$

où l'on a posé $U_2' = \frac{\partial U_2}{\partial \lambda_e}$ et $V_2' = \frac{\partial V_2}{\partial \lambda_e}$. En factorisant par $\frac{\xi}{\lambda_e^7}$ puis en regroupant les termes en sinus d'une part et en cosinus d'autre part, on obtient :

$$\begin{aligned} w_{\lambda_e,3} &= \frac{\xi}{\lambda_e^7}\left[\left(-6U_2 + \lambda_e U_2' - \frac{\zeta}{\lambda_e}V_2\right)\cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + \left(-6V_2 + \lambda_e V_2' + \frac{\zeta}{\lambda_e}U_2\right)\sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \\ &= \frac{\xi}{\lambda_e^7}\left[U_3\cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_3\sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \end{aligned} \tag{H.27}$$

où l'on a posé

$$\begin{aligned} U_3 &= -6U_2 + \lambda_e U_2' - \frac{\zeta}{\lambda_e}V_2 \\ V_3 &= -6V_2 + \lambda_e V_2' + \frac{\zeta}{\lambda_e}U_2 \end{aligned}$$

**Poids de Monte Carlo $w_{\lambda_e,n}$.** Le résultat se généralise pour la sensibilité $n^{\text{ème}}$ :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \qquad w_{\lambda_e,n} = \frac{\partial^n w}{\partial \lambda_e^n} = \frac{\xi}{\lambda_e^{n+4}}\left[U_n\cos\frac{\zeta}{\lambda_e} + V_n\sin\frac{\zeta}{\lambda_e}\right] \tag{H.28}$$

avec $U_n$ et $V_n$ deux suites dépendantes de la longueur d'onde $\lambda_e$ et données par :

$$\begin{aligned} U_n &= -(n+3)U_{n-1} + \lambda_e U_{n-1}' - \frac{\zeta}{\lambda_e}V_{n-1} \\ V_n &= -(n+3)V_{n-1} + \lambda_e V_{n-1}' + \frac{\zeta}{\lambda_e}U_{n-1} \\ U_1 &= -4 \\ V_1 &= \frac{\zeta}{\lambda_e} \end{aligned} \tag{H.29}$$

où $U_{n-1}'$ et $V_{n-1}'$ désignent respectivement les dérivées de $U_{n-1}$ et $V_{n-1}$ par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$.

# ANNEXE I

# Compléments sur le développement en série de Born

## I.1 Expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ dans le cas d'un volume d'exclusion sphérique non centré sur la singularité

Nous avons vu, dans Sec. III.5.1, que le champ électrique diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{\vec{r}_0}$ peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0 \lim_{\delta\to 0}\Bigg[ \iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\left[\vec{\mathscr{J}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathscr{J}}_{\vec{r}_0}\right] d\vec{r}_1 + \underbrace{\iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathscr{J}}_{\vec{r}_0} d\vec{r}_1}_{\mathcal{T}_1} + \underbrace{\frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0} \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathscr{J}}_{\vec{r}_0} d\vec{r}_1}_{\mathcal{T}_2}\Bigg] \tag{I.1}$$

où $\mathcal{V}_\delta$ est un volume d'exclusion autour de la singularité repérée par la position $\vec{r}_0$, c'est-à-dire la position où l'on souhaite calculer le champ diffusé. En nous appuyant sur les travaux de Fikioris [Fikioris, 1965, 1996], nous avons vu que, dans le cas d'un volume d'exclusion sphérique centré sur la singularité $\vec{r}_0$, le champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ pouvait se mettre sous la forme Eq. III.107. Cependant, le champ peut également être évalué en n'importe quelle position $\vec{r}_0$ d'un volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ centré en $\vec{r}_c$ ($\vec{r}_c \neq \vec{r}_0$) contenant les positions $\vec{r}_0$ et $\vec{r}_1$ comme le montre Fig. I.1. L'objet de cette annexe est de calculer l'expression du champ diffusé $\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0)$ obtenue par Fikioris [Fikioris, 1965, 1996] pour un tel volume d'exclusion. Plus précisément, nous allons calculer les intégrales $\mathcal{T}_1$ et $\mathcal{T}_2$ introduites dans Eq. I.1. Pour ce faire, posons les quantités suivantes : $\vec{\rho}_0 = \vec{r}_0 - \vec{r}_c$ et $\vec{\rho}_1 = \vec{r}_1 - \vec{r}_c$. La distance entre les positions $\vec{r}_0$ et $\vec{r}_1$, notée $\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\|$, qui intervient dans la fonction de Green s'écrit :

$$\|\vec{r}_0 - \vec{r}_1\| = \|\vec{\rho}_0 - \vec{\rho}_1\| = \rho_0^2 + \rho_1^2 - 2\vec{\rho}_0\cdot\vec{\rho}_1 = \rho_0^2 + \rho_1^2 - 2\rho_0\rho_1\cos\theta \tag{I.2}$$

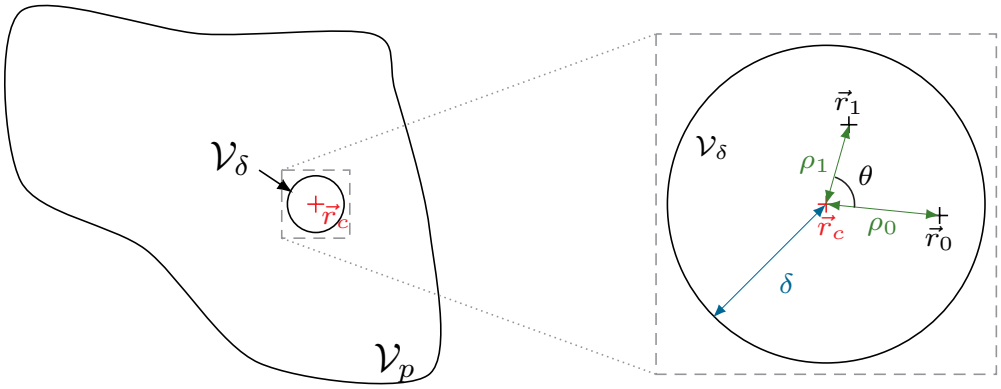



FIGURE I.1 – Volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ centré en $\vec{r}_c$. Notations : $\rho_0 = \|\vec{\rho}_0\| = \|\vec{r}_0 - \vec{r}_c\|$, $\rho_1 = \|\vec{\rho}_1\| = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_c\|$ et $\theta$ l'angle entre $\vec{\rho}_0$ et $\vec{\rho}_1$.

où $\theta$ est l'angle entre les vecteurs $\vec{\rho}_0$ et $\vec{\rho}_1$ ($\vec{\rho}_0 \cdot \vec{\rho}_1 = \rho_0\rho_2\cos\theta$).

Calculons dans un premier temps l'intégrale $\mathcal{T}_1$. En utilisant Eq. I.2 puis en effectuant un changement de variable $\mu = \cos\theta$, $d\mu = -\sin\theta d\theta$, il vient

$$
\begin{aligned}
\mathcal{T}_1 &= \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} d\vec{r}_1 \\
&= \iiint_{\mathcal{V}_\delta} \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_0-\vec{r}_1\|}}{4\pi\|\vec{r}_0-\vec{r}_1\|}\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} d\vec{r}_1 \\
&= \int_0^\delta\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \frac{e^{-ik_e\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2-2\rho_0\rho_1\cos\theta}}}{4\pi\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2-2\rho_0\rho_1\cos\theta}}\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}\rho_1^2\sin\theta d\rho_1 d\theta d\varphi \\
&= \int_0^\delta\int_{-1}^1 \frac{1}{2}\frac{e^{-ik_e\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2-2\rho_0\rho_1\mu}}}{\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2-2\rho_0\rho_1\cos\theta}}\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}\rho_1^2 d\rho_1 d\mu \\
&= \int_0^\delta \frac{1}{2}\rho_1^2\left[\frac{1}{ik_e\rho_0\rho_1}e^{-ik_e\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2-2\rho_0\rho_1\mu}}\right]_{-1}^{1}\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} d\rho_1 \\
&= \int_0^\delta \frac{1}{2ik_e}\frac{\rho_1}{\rho_0}\left[e^{-ik_e\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2-2\rho_0\rho_1}} - e^{-ik_e\sqrt{\rho_0^2+\rho_1^2+2\rho_0\rho_1}}\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} d\rho_1 \\
&= \int_0^\delta \frac{1}{2ik_e}\frac{\rho_1}{\rho_0}\left[e^{-ik_e|\rho_0-\rho_1|} - e^{-ik_e(\rho_0+\rho_1)}\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} d\rho_1
\end{aligned}
$$

avec

$$
|\rho_0-\rho_1| = \begin{cases} \rho_0-\rho_1 & \text{si } \rho_0 > \rho_1 > 0 \\ -(\rho_0-\rho_1) & \text{si } \rho_0 < \rho_1 < \delta \end{cases} \tag{I.3}
$$

En utilisant Eq. I.3, il vient

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_1 &= \int_0^{\rho_0} \frac{1}{2ik_e}\frac{\rho_1}{\rho_0}\left[e^{-ik_e(\rho_0-\rho_1)} - e^{-ik_e(\rho_0+\rho_1)}\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}d\rho_1 + \int_{\rho_0}^{\delta} \frac{1}{2ik_e}\frac{\rho_1}{\rho_0}\left[e^{ik_e(\rho_0-\rho_1)} - e^{-ik_e(\rho_0+\rho_1)}\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}d\rho_1 \\
&= \int_0^{\rho_0} \rho_1 \frac{e^{-ik_e\rho_0}}{k_e\rho_0}\underbrace{\left[\frac{e^{ik_e\rho_1} - e^{-ik_e\rho_1}}{2i}\right]}_{=\sin(k_e\rho_1)}\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}d\rho_1 + \int_{\rho_0}^{\delta} \rho_1 e^{-ik_e\rho_1}\frac{1}{k_e\rho_0}\underbrace{\left[\frac{e^{ik_e\rho_0} - e^{-ik_e\rho_0}}{2i}\right]}_{=\sin(k_e\rho_0)}\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}d\rho_1 \\
&= \left[\frac{e^{-ik_e\rho_0}}{k_e\rho_0}\int_0^{\rho_0}\rho_1\sin(k_e\rho_1)d\rho_1 + \frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}\int_{\rho_0}^{\delta}\rho_1 e^{-ik_e\rho_1}d\rho_1\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} \\
&= \left[\frac{e^{-ik_e\rho_0}}{k_e\rho_0}\left[\frac{\sin(k_e\rho_1)}{k_e^2} - \rho_1\frac{\cos(k_e\rho_1)}{k_e}\right]_0^{\rho_0} + \frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}\left[\frac{e^{-ik_e\rho_1}}{k_e^2}(ik_e\rho_1+1)\right]_{\rho_0}^{\delta}\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} \\
&= \left[\frac{e^{-ik_e\rho_0}}{k_e\rho_0}\left[\frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e^2} - \rho_0\frac{\cos(k_e\rho_0)}{k_e}\right] + \frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}\left[\frac{e^{-ik_e\delta}}{k_e^2}(ik_e\delta+1) - \frac{e^{-ik_e\rho_0}}{k_e^2}(ik_e\rho_0+1)\right]\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} \\
&= \left[-\frac{e^{-ik_e\rho_0}}{k_e^2\rho_0}\underbrace{\left[\rho_0\cos(k_e\rho_0) + i\rho_0\sin(k_e\rho_0)\right]}_{=\rho_0 e^{ik_e\rho_0}} + \frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}\frac{e^{-ik_e\delta}}{k_e^2}(ik_e\delta+1)\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} \\
&= \frac{1}{k_e^2}\left[-1 + \frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta+1)\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}
\end{aligned}$$

Ainsi, l'intégrale $\mathcal{T}_1$ vaut :

$$\mathcal{T}_1 = \iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}}d\vec{r} = \frac{1}{k_e^2}\left[\frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta+1) - 1\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} \tag{I.4}$$

Concentrons nous désormais sur l'intégrale $\mathcal{T}_2$ définie dans Eq. I.1. En utilisant Eq. I.4, il vient :

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_2 &= \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0}\iiint_{\mathcal{V}_\delta} g(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}d\vec{r}_1 \\
&= \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0}\left[\frac{1}{k_e^2}\left[\frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta+1) - 1\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}\right]
\end{aligned}$$

Puis, en utilisant le fait que $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\text{div}_{\vec{r}_0}\left[\Phi\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}\right] = \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\Phi\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}$ où $\Phi$ est une fonction scalaire, on en déduit :

$$\mathcal{T}_2 = \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\left[\frac{1}{k_e^2}\left(\frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta+1) - 1\right)\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0} \tag{I.5}$$

En injectant Eqs. I.4 et I.5 dans Eq. I.1, il vient (Eq.21 de Fikioris [1965]) :

$$\begin{aligned}
\vec{\mathscr{E}}_{sca}(\vec{r}_0) = -i\omega\mu_0\lim_{\delta\to 0}\Bigg[&\iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta}\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_1)d\vec{r}_1 + \iiint_{\mathcal{V}_\delta}\bar{\bar{G}}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\left[\vec{\mathcal{F}}(\vec{r}_1) - \vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}\right]d\vec{r}_1 \\
&+ \frac{1}{k_e^2}\left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}_0}}{k_e^2}\right]\left[\frac{\sin(k_e\rho_0)}{k_e\rho_0}e^{-ik_e\delta}(ik_e\delta+1) - 1\right]\vec{\mathcal{F}}_{\vec{r}_0}\Bigg]
\end{aligned} \tag{I.6}$$

## I.2 Matrice amplitude de diffusion : formulation intégrale et algorithme

Dans Sec. VI.3.4, nous construisons la fonction poids de la matrice amplitude de diffusion à partir de ce qui avait été fait sur le champ électrique. Nous proposons dans cette section d'établir cette fonction poids à partir de la formulation intégrale. Nous donnerons également l'algorithme correspondant.

**Formulation intégrale** Nous avons établie dans Sec. III.5.3 la formulation intégrale de la matrice amplitude de diffusion que l'on rappelle ci-dessous :

$$\bar{\bar{S}} = -\frac{i}{4\pi}\left\{\iiint_{\mathcal{V}_p} k_e^2(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}} + \frac{1-m_r^2(\vec{r}_0)}{2+m_r^2(\vec{r}_0)}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}}\right.\right.$$
$$\left.\left. + \iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_1)-1}{m_r^2(\vec{r}_0)+2}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_1}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_1)\right]d\vec{r}_1\right]d\vec{r}_0\cdot P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{I.7}$$

avec

$$\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n) = \frac{1-m_r^2(\vec{r}_n)}{2+m_r^2(\vec{r}_n)}e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}\bar{\bar{I}} + \iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_{n+1})-1}{m_r^2(\vec{r}_n)+2}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})$$
$$\times\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_{n+1}}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_{n+1})\right]d\vec{r}_{n+1} \tag{I.8}$$

où $P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}$ est la matrice de changement de repère (voir Sec. III.4.2, Eq. III.85).

Pour des raisons de lisibilités, nous introduisons les quantités suivantes :

$$\begin{aligned}
\eta(\vec{r}) &= k_e^2(m_r^2(\vec{r})-1)\\
\xi(\vec{r}) &= \frac{3}{m_r^2(\vec{r})+2}\\
\beta_{n+1} &= \eta(\vec{r}_{n+1})\xi(\vec{r}_n) = 3k_e^2\frac{m_r^2(\vec{r}_{n+1})-1}{m_r^2(\vec{r}_n)+2}\\
\tau(\vec{r}_0) &= -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2(\vec{r}_0)-1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0}\\
\zeta(\vec{r}) &= \frac{1-m_r^2(\vec{r})}{2+m_r^2(\vec{r})}
\end{aligned} \tag{I.9}$$

En injectant ces relations dans Eqs. I.7 et I.8, nous obtenons :

$$\bar{\bar{S}} = \left\{\iiint_{\mathcal{V}_p}\tau(\vec{r}_0)\left[(1+\zeta(\vec{r}_0))e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}}\right.\right.$$
$$\left.\left. + \iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)}\beta_1\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_1}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_1)\right]d\vec{r}_1\right]d\vec{r}_0\cdot P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{I.10}$$

$$\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n) = \zeta(\vec{r}_n)e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}\bar{\bar{I}} + \iiint_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} \beta_{n+1}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1}) \times\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_{n+1}}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_{n+1})\right] d\vec{r}_{n+1} \tag{I.11}$$

**Introduction des fonctions densités de probabilité.** Nous introduisons une première variable aléatoire position $\vec{R}_0$ définie sur le domaine $\mathcal{V}_p$ de la particule et distribuée suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$, ainsi qu'une seconde variable aléatoire position $\vec{R}_1$ définie sur le domaine $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)$ et distribuée suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)$.

$$\begin{aligned}\bar{\bar{S}} = \Bigg\{ &\int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\frac{\tau(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}\Bigg[(1+\zeta(\vec{r}_0))e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_0}\bar{\bar{I}} \\ &+ \int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1\, p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\frac{\beta_1}{p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_0,\vec{r}_1)\cdot\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_1}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_1)\right]\Bigg]\cdot P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}\Bigg\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}\end{aligned} \tag{I.12}$$

Afin d'écrire la formulation intégrale de Monte Carlo de $\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_1)$, nous introduisons également une variable aléatoire position $\vec{R}_{n+1}$ définie sur $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)$ et distribuée selon la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})$. En introduisant $p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})$, en multipliant et divisant l'intégrande de $\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n)$, on obtient :

$$\bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n) = \zeta(\vec{r}_n)e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_n}\bar{\bar{I}} + \int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)} d\vec{r}_{n+1} p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})\frac{\beta_{n+1}}{p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})} \times\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_n,\vec{r}_{n+1})\cdot\left[e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_{n+1}}\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{A}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_{n+1})\right] \tag{I.13}$$

**Traitement statistique de la somme infinie en introduisant un jeu de probabilités.** La formulation intégrale Eq. I.12 est définie de façon récursive et comporte ainsi une infinité d'intégrales. Afin de gérer cette somme infinie d'intégrales, nous introduisons un jeu de probabilités $\mathcal{P}_n \in ]0,1]$. Plus précisément, nous avons une probabilité $\mathcal{P}_n$ de poursuivre la récursion et une probabilité $1-\mathcal{P}_n$ de la stopper. En suivant la même démarche qui a été appliqué pour le champ $\vec{\mathscr{E}}^\dagger(\vec{r}_0)$ (voir Sec. VI.2 et Encart VI.2.5), l'introduction de ce jeu de probabilités conduit à écrire :

$$\bar{\bar{S}} = \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)\left[(1-\mathcal{P}_0)\bar{\bar{v}}_0(1+\zeta(\vec{r}_0)) + \mathcal{P}_0\int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1\, p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1)\bar{\bar{\mathcal{J}}}_1\right] \tag{I.14}$$

avec la matrice $\bar{\bar{\mathcal{J}}}_1$ défini de façon récursive par

$$\bar{\bar{\mathcal{J}}}_n = (1-\mathcal{P}_n)\bar{\bar{w}}_n + \int_{\mathcal{V}_p\setminus\mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{n+1})} d\vec{r}_{n+1}\, p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})\bar{\bar{\mathcal{J}}}_{n+1} \tag{I.15}$$

où $\forall n \in \mathbb{N}$ :

$$\begin{cases} \bar{\bar{w}}_0 = \dfrac{\tau(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}(1+\zeta(\vec{r}_0))P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \\ \bar{\bar{w}}_n = \bar{\bar{w}}_0 + \dfrac{\tau(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} \displaystyle\sum_{k=1}^{n} \left\{ \prod_{m=0}^{k-1} \left[ \frac{\beta_{m+1}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}(\vec{r}_{m+1})}\mathcal{P}_m} \right] e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_k}(1+\zeta(\vec{r}_k))P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} \right\}_{|_{\{2,3\}\{2,3\}}} \end{cases} \tag{I.16}$$

En introduisant les expressions intégrales de $\mathcal{P}_n$ et $(1-\mathcal{P}_n)$

$$\mathcal{P}_n = \int_0^1 du_n H(u_n < \mathcal{P}_n)$$
$$1-\mathcal{P}_n = \int_0^1 du_n H(u_n > \mathcal{P}_n)$$

puis en regroupant les intégrales, il vient :

$$\bar{\bar{S}} = \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0\, p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1\, p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \int_0^1 du_0 p_{U_0}(u_0) \Big[ H(u_0 > \mathcal{P}_0) \times \bar{\bar{v}}_0(1+\zeta(\vec{r}_0)) + H(u_0 < \mathcal{P}_0) \times \bar{\bar{\mathcal{J}}}_1 \Big] \tag{I.17}$$

et la quantité $\bar{\bar{\mathcal{J}}}_1$ définie de façon récursive par :

$$\bar{\bar{\mathcal{J}}}_n = \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{n+1})} d\vec{r}_{n+1}\, p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1}) \int_0^1 du_n p_{U_n}(u_n) \Big[ H(u_n > \mathcal{P}_n) \times \bar{\bar{w}}_n + H(u_n < \mathcal{P}_n) \times \bar{\bar{\mathcal{J}}}_{n+1} \Big] \tag{I.18}$$

**Algorithme.** L'algorithme de Monte Carlo permettant d'évaluer la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ associée à la formulation intégrale Eq. I.17 s'énonce de la manière suivante :

**Algorithme 33: Développement de Born - Amplitude de diffusion**

- **Étape 1** : une position $\vec{r}_0$ est échantillonnée au sein du volume $\mathcal{V}_p$ de la particule suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)$.
- **Étape 2** : la valeur 0 est affectée à l'indice $n$.
- **Étape 3** : une position $\vec{r}_{n+1}$ est échantillonnée sur $\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_n)$ suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{R}_{n+1}}(\vec{r}_{n+1})$.
- **Étape 4** : la probabilité $\mathcal{P}_n$ est calculée (*i.e.* un test de Bernoulli est réalisé) :
  - **Étape 4.1** : si $u_n < \mathcal{P}_n$, alors la génération aléatoire des positions se poursuit et l'algorithme boucle à l'**étape 2** en incrémentant l'indice $n$

- **Étape 4.2** : si $u_n > \mathcal{P}_n$, alors la génération aléatoire des positions est stoppée et l'algorithme boucle à l'**étape 5**.
- **Étape 5** : le poids de Monte Carlo $\bar{\bar{w}}_n$ est calculé.

**Formulation intégrale de chemin de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$.** Dans l'algorithme précédent, la boucle entre l'**étape 4.1** et l'**étape 2** permet de construire, à partir de la position $\vec{r}_0$, un chemin correspondant aux positions $\vec{r}_n$ successivement échantillonnées. Formellement, nous pouvons écrire la formulation intégrale de la matrice $\bar{\bar{S}}$ sous la forme compacte suivante :

$$\bar{\bar{S}} = \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) \bar{\bar{w}}_n(\vec{\gamma}) \tag{I.19}$$

avec $\vec{\Gamma}$ désignant le chemin suivi depuis la position $\vec{r}_0$ jusqu'à la position $\vec{r}_n$. $\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}$ est le domaine d'intégration sur ce chemin : $\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}} = \mathcal{V}_p \times \prod_{k=1}^{n} \mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$. Enfin, $\vec{\gamma}$ est un vecteur représentant l'ensemble des vecteurs positions échantillonnés, soit $\vec{\gamma} = (\vec{r}_0, \vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_n)$. $\bar{\bar{w}}_n(\vec{\gamma})$ est la fonction poids donnée par Eq. I.16. Dans la suite, nous utiliserons cette formulation en intégrale de chemin afin d'écrire les formulations intégrales des propriétés radiatives. Cela permettra d'avoir une écriture beaucoup plus compacte puisque sous sa forme développée, l'intégrale Eq. I.19 s'écrit :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{S}} &= \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) \bar{\bar{w}}_n \\ &= \int_{\mathcal{V}_p} d\vec{r}_0 p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0) \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_0)} d\vec{r}_1 p_{\vec{R}_1}(\vec{r}_1) \cdots \int_{\mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{n-1})} d\vec{r}_n p_{\vec{R}_n}(\vec{r}_n) \bar{\bar{w}}_n \end{aligned} \tag{I.20}$$

Nous noterons également $S_{pq}$ $(p,q) \in [\![1,2]\!]^2$ les éléments de la matrice $\bar{\bar{S}}$ :

$$\bar{\bar{S}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \tag{I.21}$$

avec $\forall (p,q) \in [\![1,2]\!]^2$,

$$S_{pq} = \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{pq}(\vec{\gamma}) \tag{I.22}$$

où $\forall (p,q) \in [\![1,2]\!]^2$, $w_{pq}$ est l'élément $(p,q)$ de la matrice fonction poids $\bar{\bar{w}}_n$ donnée par Eq. I.16 :

$$\bar{\bar{w}}_n = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{pmatrix} \tag{I.23}$$

## I.3 Propriétés radiatives

### I.3.1 Section efficace différentielle de diffusion

Nous donnons dans cette section la formulation intégrale de la section efficace différentielle de diffusion ainsi que l'algorithme de Monte Carlo qui en découle.

**Formulation intégrale.** Pour une particule isolée soumise à un rayonnement incident non polarisé, la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ est égale à la moitié de la somme des modules carrés des éléments de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ (voir Eq. I.23) :

$$\hat{W}_{sca} = \frac{1}{2}\left[|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 + |S_{12}|^2 + |S_{22}|^2\right] = \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{2}|S_{pq}|^2 \tag{I.24}$$

En injectant la formulation intégrale de $S_{pq}$ (voir Eq. I.22) dans $W_{sca}$, il vient :

$$\hat{W}_{sca} = \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{2}\left|\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{pq}(\vec{\gamma})\right|^2 \tag{I.25}$$

Compte tenu du module carré, l'expression est non linéaire. Pour traiter cette non linéarité, on utilise l'astuce présentée dans Sec. IV.1.3. Elle consiste à réécrire Eq. I.25 sous la forme :

$$\begin{aligned}\hat{W}_{sca} &= \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{2}\left[\mathfrak{Re}^{\,2}\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{pq}(\vec{\gamma}) + \mathfrak{Im}^{\,2}\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{pq}(\vec{\gamma})\right] \\ &= \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{2}\left[\mathfrak{Re}\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1) w_{pq}(\vec{\gamma}_1)\mathfrak{Re}\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2) w_{pq}(\vec{\gamma}_2)\right. \\ &\qquad \left. + \mathfrak{Im}\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1) w_{pq}(\vec{\gamma}_1)\mathfrak{Im}\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2) w_{pq}(\vec{\gamma}_2)\right]\end{aligned} \tag{I.26}$$

avec $\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_j}$ le domaine d'intégration sur ce chemin : $\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_j} = \mathcal{V}_p \times \prod_{k=1}^{n} \mathcal{V}_p \setminus \mathcal{V}_\delta(\vec{r}_{k-1})$. $\vec{\gamma}_j$ est un vecteur représentant l'ensemble des vecteurs positions soit $\vec{\gamma}_j = (\vec{r}_{1_j}, ..., \vec{r}_{n_j})$. En utilisant le fait que la partie réelle (respectivement imaginaire) d'une intégrale est égale à l'intégrale de la partie réelle (respectivement imaginaire) de l'intégrande, il vient :

$$\begin{aligned}\hat{W}_{sca} = \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{2}\left[\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1)\mathfrak{Re}\, w_{pq}(\vec{\gamma}_1)\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2)\mathfrak{Re}\, w_{pq}(\vec{\gamma}_2)\right. \\ \left. + \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1)\mathfrak{Im}\, w_{pq}(\vec{\gamma}_1)\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2)\mathfrak{Im}\, w_{pq}(\vec{\gamma}_2)\right]\end{aligned} \tag{I.27}$$

Enfin, comme nous l'avons déjà fait à plusieurs reprises, il est possible d'écrire Eq. I.26 en regroupant toutes les intégrales au début de l'expression. On obtient alors :

$$\hat{W}_{sca} = \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1) \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2) w(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2) \tag{I.28}$$

où l'on a introduit la fonction poids $w$ donnée par :

$$\begin{aligned} w(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2) = & \\ & \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{2} \sum_{q=1}^{2} \Big[ \Re\mathrm{e}\, w_{pq}(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1) \Re\mathrm{e}\, w_{pq}(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_2) \\ & \qquad + \Im\mathrm{m}\, w_{pq}(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1) \Im\mathrm{m}\, w_{pq}(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_2) \Big] \end{aligned} \tag{I.29}$$

où les éléments $w_{pq}(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1)$ et $w_{pq}(\vec{r}_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_2)$ sont respectivement ceux de la matrice $\bar{\bar{w}}_n$ (voir Eq. I.16) pour les chemins $\vec{\gamma}_1$ et $\vec{\gamma}_2$.

Dans le cadre de l'approximation de Born, nous avions géré le verrou de la non linéarité en augmentant la dimension du domaine d'intégration, c'est-à-dire qu'au lieu d'intégrer sur $\mathcal{V}_p$ nous avions intégré sur $\mathcal{V}_p \times \mathcal{V}_p$ (voir Sec. V.1.3). Nous venons de faire de même ici à la différence que les domaines d'intégration sont des chemins. Plus précisément, au lieu d'intégrer sur un chemin de domaine $\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}$, on intègre désormais sur $\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1} \times \mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}$.

En tenant compte des distributions de taille et d'orientation des particules, la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ s'écrit :

$$W_{sca} = \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{+\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1) \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2) w \tag{I.30}$$

avec la fonction poids $w \equiv w(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2)$ donnée par Eq. I.29.

**Algorithme.** L'algorithme de Monte Carlo correspondant à la formulation intégrale de $W_{sca}$ (voir Eq. I.30) s'énonce de la manière suivante :

**Algorithme 34: Développement de Born - Section efficace différentielle de diffusion**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.

- **Étape 3** : un premier chemin $\vec{\gamma}_1$ est échantillonné, à partir de la position $\vec{r}_{0_1}$, suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1)$.
- **Étape 4** : un second chemin $\vec{\gamma}_2$ est échantillonné, à partir de la position $\vec{r}_{0_2}$, suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2)$.
- **Étape 5** : le poids de Monte Carlo $w$, donné par Eq. I.29, est calculé.

### I.3.2 Sections efficaces

Nous proposons ici d'établir les formulations intégrales des sections efficaces permettant de concevoir les algorithmes de Monte Carlo.

**Section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$.** Elle est obtenue en intégrant sur tout l'angle solide $4\pi$ la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ :

$$\sigma_{sca} = \iint_{4\pi} W_{sca} d\vec{e}_s = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} W_{sca} \sin\vartheta_{sca} d\vartheta_{sca} d\phi_{sca} \tag{I.31}$$

En procédant exactement de la même façon que dans Sec. V.1.4, nous introduisons une variable aléatoire direction $\vec{E}_s$ distribuée selon $p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)$, de sorte à écrire :

$$\sigma_{sca} = \int_{4\pi} d\vec{e}_s p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) \frac{W_{sca}(\vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{e}_o, r_{eq}, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2)}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)} \tag{I.32}$$

Puis, en injectant Eq. I.30 dans Eq. I.32, la formulation intégrale de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\sigma_{sca} = \int_{4\pi} d\vec{e}_s p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_0^{\infty} dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \\ \times \int_{\vec{\mathcal{D}}_{\Gamma_1}} d\vec{\gamma}_1 p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1) \int_{\vec{\mathcal{D}}_{\Gamma_2}} d\vec{\gamma}_2 p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2) w_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2)\end{aligned} \tag{I.33}$$

avec $w_{sca}$ la fonction poids donnée par :

$$w_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2) = \frac{w(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2)}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)} \tag{I.34}$$

Dans la suite, nous choisissons de prendre une fonction densité de probabilité $p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)$ isotrope :

$$p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s) = \frac{1}{4\pi} \tag{I.35}$$

Ainsi, en injectant Eq. I.35 dans Eq. I.36, il vient

$$w_{sca}(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2) = 4\pi w(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_s, \vec{\gamma}_1, \vec{\gamma}_2) \tag{I.36}$$

où $w$ est donnée par Eq. I.29.

L'algorithme de Monte Carlo est quasiment identique à celui évaluant $W_{sca}$ ; seule une étape sur la direction d'observation $\vec{e}_s$ est ajoutée en début de l'algorithme. Ainsi, l'algorithme évaluant la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ (voir Eq. I.33) s'énonce de la façon suivante :

**Algorithme 35: Développement de Born - Section efficace de diffusion**

- **Étape 1** : une direction $\vec{e}_s$ est échantillonnée sur $4\pi$ selon $p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)$.
- **Étape 2** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 3** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 4** : un premier chemin $\vec{\gamma}_1$ est échantillonné, à partir de la position $\vec{r}_{0_1}$, suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{\Gamma}_1}(\vec{\gamma}_1)$.
- **Étape 5** : un second chemin $\vec{\gamma}_2$ est échantillonné, à partir de la position $\vec{r}_{0_2}$, suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{\Gamma}_2}(\vec{\gamma}_2)$.
- **Étape 6** : le poids de Monte Carlo $w_{sca}$, donné par Eq. I.36, est calculé.

**Section efficace d'extinction $\sigma_{ext}$.** Pour une particule isolée soumise à un rayonnement incident non polarisé, la section efficace d'extinction, donnée par le théorème optique (voir Sec. I.2.4.3), s'écrit

$$\hat{\sigma}_{ext} = -\frac{2\pi}{k_e}\mathfrak{Re}\left(S_{11}(\vec{e}_i,\vec{e}_i) + S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_i)\right) \tag{I.37}$$

où $S_{11}(\vec{e}_i,\vec{e}_i)$ et $S_{22}(\vec{e}_i,\vec{e}_i)$ sont les éléments diagonaux de la matrice $\bar{\bar{S}}$ en prenant $\vec{e}_s = \vec{e}_i$. En injectant Eq. I.22 dans Eq. I.37, puis en regroupant les intégrales, il vient

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_{ext} &= -\frac{2\pi}{k_e}\mathfrak{Re}\left[\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{11} + \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{22}\right] \\
&= -\frac{2\pi}{k_e}\left[\int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma})\mathfrak{Re}\, w_{11} + \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma})\mathfrak{Re}\, w_{22}\right] \\
&= \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) \underbrace{\left[-\frac{2\pi}{k_e}\mathfrak{Re}\left(w_{11} + w_{22}\right)\right]}_{w_{ext}}
\end{aligned} \tag{I.38}$$

où $w_{11} \equiv w_{11}(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_i, \vec{\gamma})$ et $w_{22} \equiv w_{22}(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_i, \vec{\gamma})$ sont les éléments diagonaux de la matrice $\bar{\bar{w}}_n$ donnée par Eq. I.16 évalués dans la direction avant, c'est-à-dire lorsque la direction d'observation coïncide avec la direction d'incidence ($\vec{e}_s = \vec{e}_i$). Puis, en tenant

compte des distributions de taille et d'orientation des particules, la formulation intégrale de la section efficace d'extinction $\sigma_{sca}$ s'écrit :

$$\sigma_{ext} = \int_0^\infty dr_{eq} p_{R_{eq}}(r_{eq}) \int_{8\pi^2} d\vec{e}_o p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o) \int_{\mathcal{D}_{\vec{\Gamma}}} d\vec{\gamma} p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma}) w_{ext} \tag{I.39}$$

avec $w_{ext}$ le poids de Monte Carlo donné par :

$$w_{ext}(\vec{e}_o, r_{eq}, \vec{e}_i, \vec{e}_i, \vec{\gamma}) = -\frac{2\pi}{k_e} \Re e \left(w_{11} + w_{22}\right) \tag{I.40}$$

L'algorithme associé à la formulation intégrale évaluant la section efficace d'extinction $\sigma_{ext}$ (voir Eq. I.39) s'énonce de la façon suivante :

**Algorithme 36: Développement de Born - Section efficace d'extinction**

- **Étape 1** : une orientation $\vec{e}_o$ est échantillonnée sur $8\pi^2$ selon $p_{\vec{E}_o}(\vec{e}_o)$.
- **Étape 2** : un rayon $r_{eq}$, correspondant au rayon de la sphère équivalente en volume, est échantillonné sur $]0, +\infty[$ selon $p_{R_{eq}}(r_{eq})$.
- **Étape 3** : un chemin $\vec{\gamma}$ est échantillonné, à partir de la position $\vec{r}_0$, suivant la fonction densité de probabilité $p_{\vec{\Gamma}}(\vec{\gamma})$.
- **Étape 4** : le poids de Monte Carlo $w_{ext}$, donné par Eq. I.40, est calculé.

**Section efficace d'absorption.** La section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ est calculée par la relation suivante :

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{sca} \tag{I.41}$$

On procède exactement de la même façon que nous l'avons vu dans le chapitre sur l'approximation de Schiff (voir Sec. IV.1.1.2, paragraphe concernant $\hat{\sigma}_{sca}$). La formulation intégrale qui en découle est identique à celle de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ (voir Eq. I.33) hormis dans l'expression du poids de Monte Carlo qui est donné par :

$$w_{abs} = w_{ext} - w_{sca} \tag{I.42}$$

où $w_{ext}$ est donné par Eq. I.40 et $w_{sca}$ par Eq. I.36.

## I.4 Calcul systématique de sensibilités

### I.4.1 Matrice amplitude de diffusion

Nous donnons ici les expressions des poids de Monte Carlo des sensibilités paramétriques par rapport à un paramètre $\pi$ de l'amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$. Afin d'obtenir les expressions des différentes fonctions poids, nous calculons les dérivées du poids de Monte Carlo $\bar{\bar{w}}_n$ de la matrice amplitude de diffusion par rapport au paramètre $\pi = \{n_r, \kappa_r, \lambda_e\}$.

Tout d'abord, réécrivons l'expression du poids de Monte Carlo $\bar{\bar{w}}_n$ de la matrice amplitude de diffusion, donnée par Eq. I.16, en tenant compte du fait que les particules sont homogènes. Sous cette hypothèse, les quantités $\beta_{m+1}$, $\zeta(\vec{r}_m)$ et $\tau(\vec{r}_0)$ (voir Eq. I.9) s'écrivent :

$$\forall m \in \mathbb{N} \quad \zeta(\vec{r}_m) = \zeta = \frac{1 - m_r^2}{2 + m_r^2} = \frac{1 - n_r^2 + \kappa_r^2 + 2in_r\kappa_r}{2 + n_r^2 - \kappa_r^2 - 2in_r\kappa_r} \tag{I.43}$$

$$\forall m \in \mathbb{N} \quad \beta_{m+1} = \beta = -3k_e^2\zeta \tag{I.44}$$

$$\tau(\vec{r}_0) = -\frac{ik_e^2}{4\pi}(m_r^2 - 1)e^{ik_e\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \tag{I.45}$$

Nous posons également la quantité suivante :

$$\alpha_k = (1 + \zeta)e^{-ik_e\vec{e}_i\cdot\vec{r}_k} \tag{I.46}$$

En injectant Eqs. I.45 et I.46 dans Eq. I.16, la fonction poids $\bar{\bar{w}}_n$ s'écrit :

$$\bar{\bar{w}}_n = \underbrace{\frac{\tau(\vec{r}_0)}{p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)}}_{=A} \underbrace{\left\{ \alpha_0 P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} + \sum_{k=1}^{n} \left[ \prod_{m=0}^{k-1} \frac{\beta \bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1})\mathcal{P}_m} \right] \alpha_k P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} \right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}}_{=B} \tag{I.47}$$

Dans la suite, on introduit les quantités $A$ et $B$, données dans Eq. I.47, de sorte que $\bar{\bar{w}}_n = AB$. La dérivée de cette grandeur par rapport au paramètre $\pi$ peut alors s'écrire :

$$\partial_\pi \bar{\bar{w}}_n = \frac{\partial \bar{\bar{w}}_n}{\partial \pi} = \frac{\partial A}{\partial \pi} B + A \frac{\partial B}{\partial \pi} \tag{I.48}$$

Il nous faut alors expliciter les dérivées $\frac{\partial A}{\partial \pi}$ et $\frac{\partial B}{\partial \pi}$ qui vont nous permettre d'écrire les sensibilités de la matrice amplitude de diffusion par rapport aux trois paramètres $n_r$, $\kappa_r$ et $\lambda_e$.

**Sensibilité de la matrice amplitude de de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à $n_r$ :**

L'indice $n_r$ intervient dans les termes $A$ et $B$ par l'intermédiaire des termes $\alpha_k$ et $\beta$. Les dérivées $\frac{\partial A}{\partial n_r}$ et $\frac{\partial B}{\partial n_r}$ sont données par :

$$\frac{\partial A}{\partial n_r} = -\frac{ik_e^2 m_r}{2\pi p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} e^{ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \tag{I.49}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial n_r} = \Bigg\{ &\frac{\partial \alpha_0}{\partial n_r} P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} + \sum_{k=1}^{n} \left[ \frac{\partial \beta^k}{\partial n_r} \prod_{m=0}^{k-1} \frac{\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1}) \mathcal{P}_m} \right] \alpha_k P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} \\ &+ \sum_{k=1}^{n} \left[ \prod_{m=0}^{k-1} \frac{\beta \bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1}) \mathcal{P}_m} \right] \frac{\partial \alpha_k}{\partial n_r} P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} \Bigg\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}\end{aligned} \tag{I.50}$$

où les termes $\frac{\partial \alpha_k}{\partial n_r}$ et $\frac{\partial \beta^k}{\partial n_r}$ sont donnés, après calcul, par :

$$\forall k \in \mathbb{N} \qquad \frac{\partial \alpha_k}{\partial n_r} = -6 \frac{m_r}{(m_r^2+2)^2} e^{-ik_e \vec{e}_i \cdot \vec{r}_k} \tag{I.51}$$

$$\forall k \in \mathbb{N}^* \qquad \frac{\partial \beta^k}{\partial n_r} = k\beta^{k-1} \frac{\partial \beta}{\partial n_r} = 18 k_e^2 \frac{m_r}{(m_r^2+2)^2} k\beta^{k-1} \tag{I.52}$$

En injectant Eqs. I.49 et I.50 dans Eq. I.48, on en déduit le poids de Monte Carlo $\partial_{n_r} \bar{\bar{w}}_n$ de la sensibilité de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à la partie réelle $n_r$ de l'indice de réfraction relatif.

**Sensibilité de la matrice amplitude de de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à $\kappa_r$ :**

Comme précédemment, l'indice $\kappa_r$ intervient dans les termes $A$ et $B$ par l'intermédiaire des termes $\alpha_k$ et $\beta$ (voir Eqs. I.46 et I.45). Les dérivées $\frac{\partial A}{\partial \kappa_r}$ et $\frac{\partial B}{\partial \kappa_r}$ sont données par :

$$\frac{\partial A}{\partial \kappa_r} = -\frac{k_e^2 m_r}{2\pi p_{\vec{R}_0}(\vec{r}_0)} e^{ik_e \vec{e}_s \cdot \vec{r}_0} \tag{I.53}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial \kappa_r} = \Bigg\{ &\frac{\partial \alpha_0}{\partial \kappa_r} P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} + \sum_{k=1}^{n} \left[ \frac{\partial \beta^k}{\partial \kappa_r} \prod_{m=0}^{k-1} \frac{\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1}) \mathcal{P}_m} \right] \alpha_k P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} \\ &+ \sum_{k=1}^{n} \left[ \prod_{m=0}^{k-1} \frac{\beta \bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m, \vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1}) \mathcal{P}_m} \right] \frac{\partial \alpha_k}{\partial \kappa_r} P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} \Bigg\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}\end{aligned} \tag{I.54}$$

où les termes $\frac{\partial \alpha_k}{\partial \kappa_r}$ et $\frac{\partial \beta^k}{\partial \kappa_r}$ sont donnés, après calcul, par

$$\forall k \in \mathbb{N} \qquad \frac{\partial \alpha_k}{\partial \kappa_r} = -6i \frac{m_r}{(m_r^2+2)^2} e^{-ik_e \vec{e}_i \cdot \vec{r}_k} \tag{I.55}$$

$$\forall k \in \mathbb{N}^* \qquad \frac{\partial \beta^k}{\partial \kappa_r} = k\beta^{k-1} \frac{\partial \beta}{\partial n_r} = -18 i k_e^2 \frac{m_r}{(m_r^2+2)^2} k\beta^{k-1} \tag{I.56}$$

En injectant Eqs. I.53 et I.54 dans Eq. I.48, on en déduit le poids de Monte Carlo $\partial_{\kappa_r} \bar{\bar{w}}_n$ de la sensibilité de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à la partie imaginaire $\kappa_r$ de l'indice de réfraction relatif.

**Sensibilité de la matrice amplitude de de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à $\lambda_e$ :**

Avant de calculer explicitement la sensibilité de la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à $\lambda_e$, remarquons que la longueur d'onde intervient via le nombre d'onde $k_e = \frac{2\pi}{\lambda_e}$. Ainsi, la dérivée du poids de Monte Carlo $\bar{\bar{w}}_n$ par rapport à $\lambda_e$ peut-être donnée à partir de la dérivée de $\bar{\bar{w}}_n$ par rapport à $k_e$ via la relation :

$$\frac{\partial \bar{\bar{w}}_n}{\partial \lambda_e} = \frac{\partial \bar{\bar{w}}_n}{\partial k_e}\frac{\partial k_e}{\partial \lambda_e} = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\frac{\partial \bar{\bar{w}}_n}{\partial k_e} \tag{I.57}$$

Puis, en utilisant Eq. I.48, il vient

$$\partial_{\lambda_e}\bar{\bar{w}}_n = -\frac{2\pi}{\lambda_e^2}\left[\frac{\partial A}{\partial k_e}B + A\frac{\partial B}{\partial k_e}\right] \tag{I.58}$$

avec les termes $\frac{\partial A}{\partial k_e}$ et $\frac{\partial B}{\partial k_e}$ donnés par :

$$\frac{\partial A}{\partial k_e} = A\left[\frac{2}{k_e} + i\vec{e}_s\cdot\vec{r}_0\right] \tag{I.59}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial k_e} = \Bigg\{ &\frac{\partial \alpha_0}{\partial k_e}P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} + \sum_{k=1}^{n}\left[\prod_{m=0}^{k-1}\frac{\beta}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1})\mathcal{P}_m}\right]\frac{\partial}{\partial k_e}\left(\prod_{m=0}^{k-1}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m,\vec{r}_{m+1})\right)\alpha_k P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} \\ &+\sum_{k=1}^{n}\left[\prod_{m=0}^{k-1}\frac{\beta\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m,\vec{r}_{m+1})}{p_{\vec{R}_{m+1}}(\vec{r}_{m+1})\mathcal{P}_m}\right]\frac{\partial \alpha_k}{\partial k_e}P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}\Bigg\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}\end{aligned} \tag{I.60}$$

où les termes en couleurs sont donnés, après calcul, par

$$\forall k\in\mathbb{N}\qquad \frac{\partial \alpha_k}{\partial k_e} = -i\alpha_k\vec{e}_i\cdot\vec{r}_k \tag{I.61}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial k_e}\left(\prod_{m=0}^{k-1}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m,\vec{r}_{m+1})\right) = \sum_{j=0}^{k-1}\frac{\partial \bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1})}{\partial k_e}\prod_{\substack{m=0\\m\neq j}}^{k-1}\bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_m,\vec{r}_{m+1}) \tag{I.62}$$

avec

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\bar{G}}^{\mathcal{B}_s}(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1})}{\partial k_e} &= -\frac{2}{k_e^3}\overrightarrow{\text{grad}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}\,g(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1}) + \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}\otimes\overrightarrow{\text{grad}}}{k_e^2}\right]\frac{\partial g(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1})}{\partial k_e} \\ g(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1}) &= \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}_j-\vec{r}_{j+1}\|}}{4\pi\|\vec{r}_j-\vec{r}_{j+1}\|} \\ \frac{\partial g(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1})}{\partial k_e} &= -i\|\vec{r}_j-\vec{r}_{j+1}\|g(\vec{r}_j,\vec{r}_{j+1})\end{aligned} \tag{I.63}$$

En injectant Eqs. I.59 à I.63 dans Eq. I.58, on en déduit le poids de Monte Carlo $\partial_{\lambda_e}\bar{\bar{w}}_n$ de la sensibilité à la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$.

### I.4.2 Propriétés radiatives

**Sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à $\pi$ :**

L'expression du poids de Monte Carlo, noté $\partial_\pi w$, permettant de calculer la sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par rapport à un paramètre $\pi$ est donnée en dérivant Eq. I.29 :

$$\partial_\pi w = \frac{\partial w}{\partial \pi} = \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{2}\sum_{q=1}^{2}\left[\mathfrak{Re}\,\frac{\partial w_{pq}^{(1)}}{\partial \pi}\mathfrak{Re}\,w_{pq}^{(2)} + \mathfrak{Re}\,w_{pq}^{(1)}\mathfrak{Re}\,\frac{\partial w_{pq}^{(2)}}{\partial \pi} + \mathfrak{Im}\,\frac{\partial w_{pq}^{(1)}}{\partial \pi}\mathfrak{Im}\,w_{pq}^{(2)} + \mathfrak{Im}\,w_{pq}^{(1)}\mathfrak{Im}\,\frac{\partial w_{pq}^{(2)}}{\partial \pi}\right] \tag{I.64}$$

où $w_{pq}, (p,q) \in [\![1,2]\!]^2$ sont les éléments de la matrice $\bar{\bar{w}}_n$ donnée par Eq. I.16. Les quantités $\frac{\partial w_{pq}}{\partial \pi}, (p,q) \in [\![1,2]\!]^2$ sont les éléments de la matrice $\partial_\pi \bar{\bar{w}}_n$ donnée par Eq. I.48 (et entièrement explicitée en utilisant les paragraphes qui suivent cette relation). Les exposants (1) et (2) indiquant le chemin suivi pour l'obtention du poids considéré (voir Sec. I.3.1).

**Sensibilité de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ par rapport à $\pi$ :**

L'expression du poids de Monte Carlo, noté $\partial_\pi w_{sca}$, permettant de calculer la sensibilité de la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ par rapport à un paramètre $\pi$ est donnée par :

$$\partial_\pi w_{sca} = \frac{\partial w_{sca}}{\partial \pi} = \frac{1}{p_{\vec{E}_s}(\vec{e}_s)}\partial_\pi w \tag{I.65}$$

où $\partial_\pi w$ est donnée par Eq. I.64.

**Sensibilité de la section efficace d'extinction $\sigma_{ext}$ par rapport à $\pi$ :**

L'expression du poids de Monte Carlo, noté $\partial_\pi w_{ext}$, permettant de calculer la sensibilité de la section efficace d'extinction $\sigma_{ext}$ par rapport à un paramètre $\pi$ est donnée par :

$$\partial_\pi w_{ext} = \frac{\partial w_{ext}}{\partial \pi} = -\frac{2\pi}{k_e}\mathfrak{Re}\left[\frac{\partial w_{11}}{\partial \pi} + \frac{\partial w_{22}}{\partial \pi}\right] \tag{I.66}$$

où $\frac{\partial w_{11}}{\partial \pi}$ et $\frac{\partial w_{22}}{\partial \pi}$ sont les éléments diagonaux de la matrice $\partial_\pi \bar{\bar{w}}_n$ donnée par Eq. I.48.

# ANNEXE J

# Fonction de Green scalaire et dyade de Green en champ lointain

## J.1 Fonction de Green scalaire

L'objet de cette section est d'établir l'expression de la fonction de Green scalaire qui est solution de l'équation :

$$\nabla^2 g(\vec{r},\vec{r}_0) + k_e^2 g(\vec{r},\vec{r}_0) = -\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \tag{J.1}$$

où $\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$ correspond à la distribution de Dirac centrée en un point source $\vec{r}_0$. Pour résoudre cette équation, pour un milieu homogène infini, il est judicieux d'introduire les cordonnées sphériques $(\rho,\theta,\varphi)$ avec pour origine la position $\vec{r}_0$. Compte tenu de la symétrie sphérique d'un point source, la solution recherchée $g(\vec{r})$ doit également être à symétrie sphérique. Dans un premier temps, résolvons pour tout $\rho = \|\vec{r}\| \neq 0$ l'équation homogène de Eq. J.1, c'est-à-dire :

$$\forall \rho \neq 0 \qquad \nabla^2 g(\rho) + k_e^2 g(\rho) = 0 \tag{J.2}$$

Puisque $g$ ne dépend que de la variable $\rho$, Eq. J.2 s'écrit :

$$\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho g(\rho)) + k_e^2 \rho g(\rho) = 0 \tag{J.3}$$

Les solutions sont de la forme $\rho g(\rho) = \alpha e^{-ik_e\rho} + \beta e^{ik_e\rho}, (\alpha,\beta) \in \mathbb{C}^2$. On en déduit alors

$$g(\rho) = \alpha\frac{e^{-ik_e\rho}}{\rho} + \beta\frac{e^{ik_e\rho}}{\rho} \qquad (\alpha,\beta) \in \mathbb{C}^2 \tag{J.4}$$

Or, en supposant qu'il n'y a aucune source à l'infini, seule une onde sphérique divergente se propageant depuis l'origine de la source, située en $\vec{r}_0$, peut exister. Compte tenu de la convention choisie, à savoir $e^{i\omega t}$, le terme $\frac{e^{ik_e\rho}}{\rho}$ conduit à une onde sphérique convergente. Elle n'a donc pas de raison d'exister ici. Ainsi $\beta = 0$ et Eq. J.4 devient :

$$g(\rho) = \alpha\frac{e^{-ik_e\rho}}{\rho} \qquad \alpha \in \mathbb{C} \tag{J.5}$$

À noter que la fonction de Green $g$ vérifie la condition à l'infini suivante :

$$\lim_{\rho\to+\infty} g(\rho) = \lim_{\rho\to+\infty} \alpha\frac{e^{-ik_e\rho}}{\rho} = \alpha \lim_{\rho\to+\infty} \frac{\cos k_e\rho}{\rho} + i\alpha \lim_{\rho\to+\infty} \frac{\sin k_e\rho}{\rho} = 0 \tag{J.6}$$

Il reste à déterminer la constante $\alpha$, qui est obtenue en faisant correspondre la singularité de chaque côté de l'équation Eq. J.1 [Tai, 1994; Chew, 1990; Hanson and Yakovlev, 2002]. Pour ce faire, on injecte Eq. J.5 dans Eq. J.1 puis on intègre sur un petit volume sphérique $\mathcal{V}_\zeta$ de rayon $\zeta$ centré à l'origine (i.e. en $\vec{r}_0$) :

$$\iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \nabla^2 g(\rho)dV + k_e^2 \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} g(\rho)dV = -\iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \delta(\vec{\rho}-\vec{0})dV \tag{J.7}$$

Regardons de plus près chacune des trois intégrales de Eq. J.7 lorsque $\zeta \to 0$, autrement dit lorsque le volume $\mathcal{V}_\zeta \to 0$. D'après les propriétés de la distribution de Dirac $\delta$, on a

$$\iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \delta(\vec{\rho}-\vec{0})dV = 1 \tag{J.8}$$

En ce qui concerne la seconde intégrale de Eq. J.7, on a

$$k_e^2 \lim_{\zeta\to0} \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} g(\rho)dV = k_e^2 \lim_{\zeta\to0} \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \alpha\frac{e^{-ik_e\rho}}{\rho}\rho^2 \sin\theta d\rho d\theta d\varphi = 4\pi\alpha k_e^2 \lim_{\zeta\to0} \int_0^\zeta \rho e^{-ik_e\rho} d\rho$$

soit après intégration

$$k_e^2 \lim_{\zeta\to0} \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} g(\rho)dV = 0 \tag{J.9}$$

En ce qui concerne la première intégrale de Eq. J.7, on a en utilisant le théorème de la divergence

$$\begin{aligned}
\lim_{\zeta\to0} \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \nabla^2 g(\rho)dV &= \lim_{\zeta\to0} \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \operatorname{div} \overrightarrow{\operatorname{grad}}\, g(\rho)dV \\
&= \lim_{\zeta\to0} \oiint_{\partial\mathcal{V}_\zeta} \overrightarrow{\operatorname{grad}}\, g\Big|_{\rho=\zeta} \cdot \vec{n}dS \\
&= \lim_{\zeta\to0} \oiint_{\partial\mathcal{V}_\zeta} \frac{dg(\rho)}{d\rho}\bigg|_{\rho=\zeta} \vec{e}_\rho \cdot \vec{n}dS \\
&= -\lim_{\zeta\to0} \oiint_{\partial\mathcal{V}_\zeta} \alpha\frac{e^{-ik_e\zeta}}{\zeta^2}(ik_e\zeta+1)\zeta^2 \sin\theta d\theta d\varphi \\
&= -4\pi\alpha \lim_{\zeta\to0} e^{-ik_e\zeta}(ik_e\zeta+1)
\end{aligned}$$

soit

$$\lim_{\zeta\to0} \iiint_{\mathcal{V}_\zeta} \nabla^2 g(\rho)dV = -4\pi\alpha \tag{J.10}$$

Ainsi, en prenant la limite lorsque $\zeta \to 0$ dans Eq. J.7, puis en utilisant Eqs. J.8, J.9 et J.10, on en déduit $-4\pi\alpha = -1$, soit la constante $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{1}{4\pi} \tag{J.11}$$

En injectant Eq. J.11 dans Eq. J.5 puis en posant $\rho = \|\vec{r} - \vec{r}_0\|$ (pour généraliser), on en déduit l'expression de la fonction de Green scalaire :

$$g(\vec{r}, \vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e\rho}}{4\pi\rho} = \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}}{4\pi\|\vec{r} - \vec{r}_0\|} \tag{J.12}$$

## J.2 Expression de la dyade de Green $\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0)$ en champ lointain

L'objet de cette section est de fournir une expression de la dyade de Green $\bar{\bar{G}}(\vec{r}, \vec{r}_0)$ lorsque la position d'observation $\vec{r}$ est située loin de la particule. Considérons une particule quelconque centrée au point O qui est l'origine du repère $(O, x, y, z)$. Soit $\vec{r}_0$ une position au sein du volume de la particule auquel on associe la base locale sphérique $(\vec{e}_{r_0}, \vec{e}_{\theta_0}, \vec{e}_{\varphi_0})$. Les coordonnées de la position $\vec{r}_0$ sont :

$$\vec{r}_0 = \begin{pmatrix} r_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{[\vec{e}_{r_0}, \vec{e}_{\theta_0}, \vec{e}_{\varphi_0}]} = \begin{pmatrix} r_0 \sin\theta_0 \cos\varphi_0 \\ r_0 \sin\theta_0 \sin\varphi_0 \\ r_0 \cos\theta_0 \end{pmatrix}_{[\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z]} \tag{J.13}$$

Soit $\vec{r}$ une position d'observation située loin de la particule $|\vec{r}| \gg |\vec{r}_0|$ auquel on associe la base locale sphérique $(\vec{e}_s, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi)$. Les coordonnées de la position $\vec{r}$ sont données par :

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{[\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi]} = \begin{pmatrix} r \sin\theta \cos\varphi \\ r \sin\theta \sin\varphi \\ r \cos\theta \end{pmatrix}_{[\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z]} \tag{J.14}$$

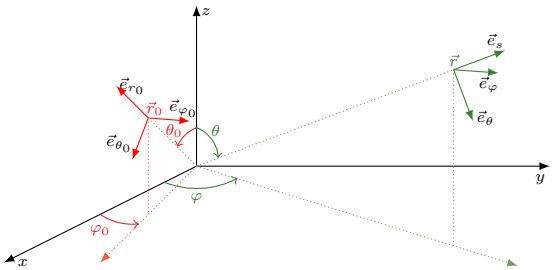



FIGURE J.1 – Représentation des notations.

Dans un premier temps, nous allons donner l'expression de la fonction de Green scalaire sous l'hypothèse de champ lointain (*i.e.* $|\vec{r}| \gg |\vec{r}_0|$). On rappelle que la fonction de Green scalaire est définie par :

$$g(\vec{r}, \vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}}{4\pi\|\vec{r} - \vec{r}_0\|} \tag{J.15}$$

avec

$$\|\vec{r}-\vec{r}_0\| = \sqrt{r^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}_0 + r_0^2} = r\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}_0}{r^2} + \frac{r_0^2}{r^2}} \tag{J.16}$$

En calculant le terme $\vec{r}\cdot\vec{r}_0$, on obtient

$$\begin{aligned}\vec{r}\cdot\vec{r}_0 &= r\vec{e}_r\cdot\vec{r}_0 \\ &= rr_0\left[\sin\theta_0\cos\varphi_0\sin\theta\cos\varphi + \sin\theta_0\sin\varphi_0\sin\theta\sin\varphi + \cos\theta_0\cos\theta\right] \\ &= rr_0\left[\sin\theta_0\sin\theta\cos(\varphi-\varphi_0) + \cos\theta_0\cos\theta\right] \\ &= rr_0\cos\gamma\end{aligned} \tag{J.17}$$

où l'on a posé

$$\cos\gamma = \sin\theta_0\sin\theta\cos(\varphi-\varphi_0) + \cos\theta_0\cos\theta \tag{J.18}$$

La quantité $\gamma$ représente l'angle entre les positions $\vec{r}$ et $\vec{r}_0$. En injectant Eq. J.17, puis en effectuant un développement limité ($\|\vec{r}\| \gg \|\vec{r}_0\|$), l'équation Eq. J.16 devient :

$$\begin{aligned}\|\vec{r}-\vec{r}_0\| &= r\sqrt{1 - 2\frac{r_0}{r}\cos\gamma + \frac{r_0^2}{r^2}} \\ &\approx r\left[1 - \frac{r_0}{r}\cos\gamma + \frac{1}{2}\frac{r_0^2}{r^2} - \frac{1}{2}\frac{r_0^2}{r^2}\cos^2\gamma + ...\right] \\ &\approx r\left[1 - \frac{r_0}{r}\cos\gamma + \frac{1}{2}\frac{r_0^2}{r^2}\sin^2\gamma + ...\right]\end{aligned} \tag{J.19}$$

Lorsque l'on injecte la relation Eq. J.19 dans le terme exponentiel de la fonction de Green $e^{-ik_e\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}$, on doit au moins tenir compte des deux premiers termes, puisque même si $\vec{r}_0$ est petit devant $\vec{r}$, $\vec{r}_0$ peut être grand devant la longueur d'onde et de ce fait le terme $k_e r_0$ ne peut pas être négligé. Le troisième terme $\frac{1}{2}\frac{r_0^2}{r^2}\sin^2\gamma$ est négligeable dès lors que l'on choisit $r$ assez loin de la particule. Plus précisément, si l'on considère une particule centrée à l'origine et ayant $L_c$ pour dimension caractéristique telle que $\|\vec{r}_0\| \leq \frac{L_c}{2}$, alors la distance critique d'observation vérifie [Van Bladel, 2007] :

$$\frac{1}{2}\frac{k\left(\frac{L_c}{2}\right)^2}{r} < \frac{\pi}{8} \tag{J.20}$$

Cette condition peut se réécrire sous la forme suivante :

$$r > \frac{2L_c^2}{\lambda_e} \tag{J.21}$$

Lorsque l'hypothèse du champ lointain est valide, il est possible d'écrire d'une part

$$\|\vec{r}-\vec{r}_0\| \approx r - r_0\cos\gamma \approx r - \vec{e}_r\cdot\vec{r}_0 \tag{J.22}$$

et d'autre part, en effectuant un développement limité de $\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}_0\|}$,

$$\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}_0\|} \approx \frac{1}{r}\left[1+\frac{r_0}{r}\cos\gamma+...\right] \approx \frac{1}{r}$$

Ainsi, la fonction de Green $g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ sous l'hypothèse de champ lointain ($|\vec{r}| \gg |\vec{r}_0|$) s'écrit :

$$g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} e^{ik_e \vec{e}_s\cdot\vec{r}_0} \tag{J.23}$$

L'expression de la fonction de Green en champ lointain fournie par Eq. J.23 traduit le fait que le champ rayonné par la particule est une onde sphérique corrigée par un terme de phase qui tient compte de la position $\vec{r}_0$ au sein de la particule par rapport à l'origine du repère. En injectant Eqs. J.17 et J.18 dans l'expression de la fonction de Green scalaire en champ lointain Eq. J.23, il vient :

$$g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} e^{ik_e r_0\cos\gamma} = \frac{e^{-ik_e r}}{4\pi r} e^{ik_e r_0[\sin\theta_0\sin\theta\cos(\varphi-\varphi_0)+\cos\theta_0\cos\theta]}$$

La fonction de Green en champ lointain $g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ étant déterminée, nous allons pouvoir fournir une expression de la dyade de Green en champ lointain $\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$. Par définition de la dyade de Green, nous avons

$$\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) = g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)\bar{\bar{I}} + \frac{1}{k_e^2}\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\, g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0) \tag{J.24}$$

avec $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}\, g^{FF}$ donnée par :

$$\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} g^{FF} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 g^{FF}}{\partial r^2} & \frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\theta}\right] & \frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\varphi}\right] \\ \frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\theta}\right] & \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 g^{FF}}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial g^{FF}}{\partial r} & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\varphi}\right] \\ \frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\varphi}\right] & \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\varphi}\right] & \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 g^{FF}}{\partial\varphi^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial g^{FF}}{\partial r}+\frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\theta} \end{bmatrix} \tag{J.25}$$

Comme on peut le constater via Eq. J.25, $\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ fait intervenir les dérivées de $g^{FF}(\vec{r},\vec{r}_0)$ par rapport aux variables $r,\theta$ et $\varphi$ qui sont données par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial g^{FF}}{\partial r} &= -\left[ik_e+\frac{1}{r}\right] g^{FF} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial g^{FF}}{\partial\theta} &= ik_e\frac{r_0}{r}\left[\sin\theta_0\cos\theta\cos(\varphi-\varphi_0)-\sin\theta\cos\theta_0\right] g^{FF} \\ \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial g^{FF}}{\partial r} &= -\frac{ik_e r_0}{r\sin\theta}\sin(\varphi-\varphi_0) g^{FF} \end{aligned}$$

Or, sous l'hypothèse de champ lointain, la dyade de Green se simplifie puisque l'on ne garde que les termes en $\frac{1}{r}$. Plus précisément, en observant que la fonction de Green scalaire en champ lointain $g^{FF}$ évolue en $\frac{1}{r}$, le seul terme non négligeable est $\frac{\partial g^{FF}}{\partial r} = -ik_e g^{FF}$. Ainsi, le seul terme présent dans la matrice est :

$$\frac{\partial^2 g^{FF}}{\partial r^2} = -k_e^2 g^{FF} + o\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

Ainsi :

$$\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \begin{bmatrix} -k_e^2 g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = -k_e^2 \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) \qquad \text{(J.26)}$$

L'expression de la dyade de Green en champ lointain $\bar{\bar{G}}^{FF}$ est donc :

$$\bar{\bar{G}}^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \left[\bar{\bar{I}} + \frac{\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}} \otimes \overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{r}}}{k_e^2}\right] g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) \approx \left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] g^{FF}(\vec{r}, \vec{r}_0) \qquad \text{(J.27)}$$

# ANNEXE K

# Matrice de passage

## K.1 Rappels sur les matrices de changement de bases

### K.1.1 Matrices de changement de bases

Soit $\mathcal{B} = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ et $\mathcal{B}' = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3)$ deux bases de $\mathbb{R}^3$. La matrice de passage de $\mathcal{B}$ à $\mathcal{B}'$, notée $P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'}$, est la matrice dont la $k^{ème}$ colonne est formée des coordonnées de $\vec{u}_k$ par rapport à $\mathcal{B}'$. On a alors, $\forall k \in [\![1, 3]\!]$,

$$\vec{u}_k = \sum_{l=1}^{3} p_{lk} \vec{e}_l \tag{K.1}$$

où $p_{lk}$ sont les éléments de la matrice de passage $P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'}$ :

$$P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'} = P(\mathcal{B} \to \mathcal{B}') = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix} \tag{K.2}$$

On dit que $\mathcal{B}$ représente l'*ancienne* base, et que $\mathcal{B}'$ représente la *nouvelle* base.

### K.1.2 Changement de base : cas d'un vecteur

Notons $\vec{X}$ un vecteur et deux bases $\mathcal{B}$ et $\mathcal{B}'$. Notons également $P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'}$, la matrice de passage de la base $\mathcal{B}$ à la base $\mathcal{B}'$. La relation reliant le vecteur $\vec{X}$ exprimé dans la base $\mathcal{B}'$ et le vecteur $\vec{X}$ exprimé dans la base $\mathcal{B}$ est donnée par :

$$\vec{X}^{\mathcal{B}} = P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'} \vec{X}^{\mathcal{B}'} \tag{K.3}$$

### K.1.3 Changement de base : cas d'une matrice

Soit deux bases $\mathcal{B}$ et $\mathcal{B}'$. Notons également $P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'}$, la matrice de passage de la base $\mathcal{B}$ à la base $\mathcal{B}'$. Considérons $M^{\mathcal{B}}$ la matrice exprimée dans la base $\mathcal{B}$ et $M^{\mathcal{B}'}$ la matrice exprimée dans la base $\mathcal{B}'$. On a la relation suivante :

$$M^{\mathcal{B}} = {}^t P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'} M^{\mathcal{B}'} P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'} \tag{K.4}$$

avec

$$ {}^{t}P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'} = (P_{\mathcal{B}}^{\mathcal{B}'})^{-1} = P_{\mathcal{B}'}^{\mathcal{B}} \tag{K.5} $$

où ${}^{t}P$ indique la matrice transposée de $P$.

## K.2 Expression de la matrice de passage $P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}$

Notons $\mathcal{B}_i = (\vec{e}_i, \vec{e}_{\theta_i}, \vec{e}_{\varphi_i})$ et $\mathcal{B}_s = (\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s})$ deux bases associées aux coordonnées sphériques et $\mathcal{B}_c = (\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ la base associé aux coordonnées cartésiennes.

La matrice de passage $P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i}$ est donnée par :

$$ P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_i} = P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_c} P_{\mathcal{B}_c}^{\mathcal{B}_i} \tag{K.6} $$

avec $P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_c}$ la matrice de passage de la base sphérique $\mathcal{B}_s$ à la base cartésienne $\mathcal{B}_c$ :

$$ P_{\mathcal{B}_s}^{\mathcal{B}_c} = \begin{pmatrix} \sin\theta_s \cos\varphi_s & \sin\theta_s \sin\varphi_s & \cos\theta_s \\ \cos\theta_s \cos\varphi_s & \cos\theta_s \sin\varphi_s & -\sin\theta_s \\ -\sin\varphi_s & \cos\varphi_s & 0 \end{pmatrix} \tag{K.7} $$

et $P_{\mathcal{B}_c}^{\mathcal{B}_i}$ la matrice de passage de la base cartésienne $\mathcal{B}_c$ à la base sphérique $\mathcal{B}_i$ :

$$ P_{\mathcal{B}_c}^{\mathcal{B}_i} = \begin{pmatrix} \sin\theta_i \cos\varphi_i & \cos\theta_i \cos\varphi_i & -\sin\varphi_i \\ \sin\theta_i \sin\varphi_i & \cos\theta_i \sin\varphi_i & \cos\varphi_i \\ \cos\theta_i & -\sin\theta_i & 0 \end{pmatrix} \tag{K.8} $$

## K.3 Calcul de $\left\{\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s}\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}$

Notons

$$P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{bmatrix} \tag{K.9}$$

Dans la base sphérique $\mathcal{B}_s = (\vec{e}_s, \vec{e}_{\theta_s}, \vec{e}_{\varphi_s})$, on a

$$\vec{e}_s = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{K.10}$$

Ainsi $\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right]$ s'écrit :

$$\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{K.11}$$

En utilisant Eqs. K.9 et K.11, il vient

$$\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] P^{\mathcal{B}_i}_{\mathcal{B}_s} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix} \tag{K.12}$$

## K.4 Calcul de $\left\{\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] M_1 M_2\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}$

Considérons deux matrices $M_1$ et $M_2$ données par :

$$M_1 = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad M_2 = \begin{pmatrix} r & s & t \\ u & v & w \\ x & y & z \end{pmatrix} \tag{K.13}$$

Nous notons également la matrice $M = M_1 M_2$.

L'objet de cette section est de vérifier l'égalité suivante :

$$\left\{\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] M_1 M_2\right\}_{|\{2,3\}\{2,3\}} = \{M_1 M_2\}_{|\{2,3\}\{2,3\}} = M_{|\{2,3\}\{2,3\}} \tag{K.14}$$

$$\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{K.15}$$

En utilisant Eqs. K.13 et K.15, il vient :

$$\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \tag{K.16}$$

En utilisant, Eqs. K.16 et K.13, il vient :

$$\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] M_1 M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ dr+eu+fx & ds+ev+fy & dt+ew+fz \\ gr+hu+ix & gs+hv+iy & gt+hw+iz \end{pmatrix} \tag{K.17}$$

$\{\left[\bar{\bar{I}} - \vec{e}_s \otimes \vec{e}_s\right] M\}_{|\{2,3\}\{2,3\}}$

Enfin, en utilisant Eq. K.13, $M = M_1 M_2$ s'écrit :

$$M = M_1 M_2 = \begin{pmatrix} ar+bu+cx & as+bv+cy & at+bw+cz \\ dr+eu+fx & ds+ev+fy & dt+ew+fz \\ gr+hu+ix & gs+hv+iy & gt+hw+iz \end{pmatrix} \tag{K.18}$$

$M_{|\{2,3\}\{2,3\}}$

En utilisant Eqs. K.17 et K.18, on en déduit l'égalité Eq. K.14

# *Bibliographie*


Ackerman, S. A. and Stephens, G. L. (1987). The absorption of Solar radiation by cloud droplets : an application of Anomalous Diffraction Theory. *Journal of the atmospheric sciences*, 44(12) :1574–88.

Aiba, S. (1982). Growth Kinetics of Photosynthetic Microorganisms. *Advances in Biochemical Engineering*, 23 :85 – 156.

Ampère, A.-M. (1825). Mémoire. *Mémoires de l'Académie Royales des Sciences de l'Institut de France*, 6 :175 – 388.

Arnoldus, H. F. (2006). Conservation of charge at an interface. *Optics Communications*, 265(1) :52–59.

Asano, S. (1979). Light scattering properties of spheroidal particles. *Applied optics*, 18(5) :712–723.

Asano, S. and Sato, M. (1980). Light scattering by randomly oriented spheroidal particles. *Applied optics*, 19(6) :962–974.

Asano, S. and Yamamoto, G. (1975). Light scattering by a spheroidal particle. *Applied Optics*, 14(1) :29–49.

Assaraf, R. and Caffarel, M. (1999). Zero-Variance Principle for Monte Carlo Algorithms. *Physical Review Letters*, 83(23) :4682–4685.

Avestas, J. (1983). Comments on "Singularity in Green's Function and its numerical evaluation". *IEEE Trans. Antennas Propag.*, AP-31(1) :174–177.

Balanis, C. (1989). *Advanced engineering electromagnetics*.

Barber, P. and Hill, S. (1990). *Light Scattering by Particles : Computational Methods*. World Scientific Publishing.

Bi, L. and Yang, P. (2015). Impact of calcification state on the inherent optical properties of Emiliania huxleyi coccoliths and coccolithophores. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 155 :10–21.

Bi, L., Yang, P., Kattawar, G. W., and Mishchenko, M. I. (2013a). A numerical combination of extended boundary condition method and invariant imbedding method applied to light scattering by large spheroids and cylinders. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 123 :17–22.

Bi, L., Yang, P., Kattawar, G. W., and Mishchenko, M. I. (2013b). Efficient implementation of the invariant imbedding T-matrix method and the separation of variables method applied to large nonspherical inhomogeneous particles. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 116 :169–183.

Bohren, C. F. and Huffman, D. R. (1983). *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*.

Borghese, F., Denti, P., and Saija, R. (2007). *Scattering from Model Nonspherical Particles*. Springer.

Born, M. (1926). Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Zeitschrift für Physik*, 38(11-12) :803–827.

Born, M. and Wolf, E. (1999). *Principles of Optics : Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*.

Boucher, O. (2015). *Atmospheric Aerosols - Properties and Climate Impacts*. Springer Netherlands.

Boulet, P., Collin, A., Merchiers, O., and Vaillon, R. (2014). Propriétés radiatives des milieux diffusants. *Ecole Thématique CNRS "Rayonnement thermique en milieux semi-transparents"*.

Brehat, F., Wyncke, B., and Impr. Dupli-print) (2003). *Repreésentation des états de polarisation des ondes lumineuses*. Publibook.

Bricaud, A. and Morel, A. (1986). Light attenuation and scattering by phutoplanktonic cells : a theorerical modeling. *Applied optics*, 25(4) :571–580.

Bryant, F. and Latimer, P. (1969). Optical efficiencies of large particles of arbitrary shape and orientation. *Journal of Colloid and Interface Science*, 30(3) :291–304.

Burton, S. P., Hair, J., Ferrare, R., Hostetler, C., Vaughan, M., and Omar, A. (2017). Characterization of tropospheric aerosols with polarization lidar. In *ELS XVI*.

Çapoğlu, I. R., Taflove, A., and Backman, V. (2013). Angora : A Free Software Package for Finite-Difference Time-Domain Electromagnetic Simulation. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 55(4) :80–93.

Chappert, A. (2007). *Histoire de l'optique ondulatoire : de Fresnel à Maxwell*. Belin.

Charon, J., Blanco, S., Cornet, J. F., Dauchet, J., El Hafi, M., Fournier, R., Abboud, M. K., and Weitz, S. (2016). Monte Carlo implementation of Schiff's approximation for estimating radiative properties of homogeneous, simple-shaped and optically soft particles : Application to photosynthetic micro-organisms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 172 :3–23.

Chen, D., Cai, W., Zinser, B., and Cho, M. H. (2016). Accurate and efficient Nyström volume integral equation method for the Maxwell equations for multiple 3-D scatterers. *Journal of Computational Physics*, 321 :303–320.

Chen, K. (1977). A simple physical picture of tensor Green's function in source region. *Proceedings of the IEEE*, pages 1202–1204.

Chew, W. (1989). Some observations on the spatial and eigenfunction representations of dyadic Green's functions (electromagnetic theory). *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 37(10) :1322–1327.

Chew, W. C. (1990). *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*.

Chun, K., Kim, H., Kim, H., Jung, K. S., and Chung, Y. (2013). GMES : A Python package for solving Maxwell's equations using the FDTD method. *Computer Physics Communications*, 184(4) :1272–1279.

Chýlek, P. and Klett, J. (1991a). Extinction cross sections of nonspherical particles in the anomalous diffraction approximation. *JOSA A*, 8(2) :274–281.

Chýlek, P. and Klett, J. D. (1991b). Absorption and scattering of electromagnetic radiation by prismatic columns : anomalous diffraction approximation. 8(11).

Ciric, I. and Cooray, F. (2000). *Separation of variables for electromagnetic scattering by spheroidal particles*, pages 90–130. Academic Press.

Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., and Laloë, F. (1977). *Quantum mechanics. Vol. 2*. Wiley.

Colton, D. and Kress, R. (2013). *Integral Equation Methods in Scattering Theory*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA.

Cornet, J.-F. (2007). *Procédés limités par le transfert de rayonnement en milieu hétérogène*. Habilitation à diriger des recherches, Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II.

Cornet, J. F. (2010). Calculation of optimal design and ideal productivities of volumetrically lightened photobioreactors using the constructal approach. *Chemical Engineering Science*, 65 :985–998.

Cornille, P. (2003). *Advanced Electromagnetism and Vacuum Physics*.

Costabel, M., Darrigrand, E., and Kon, E. H. (2010). Volume and surface integral equations for electromagnetic scattering by a dielectric body. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 234(6) :1817–1825.

Cross, D. A. and Latimer, P. (1970). General Solutions for the Extinction and Absorption Efficiencies of Arbitrarily Oriented Cylinders by Anomalous-Diffraction Methods*. *Journal of the Optical Society of America*, 60(7) :904.

Curtiss, J. H. (1953). Monte Carlo Methods for the Iteration of Linear Operators. *Journal of Mathematics and Physics*, 32(1) :209–232.

Dahi, G. (2016). *Etude expérimentale et modélisation par approche radiative d'un photoréacteur pour la production d'hydrogène*. PhD thesis, Université Clermont-Auvergne.

Dannhauser, D., Rossi, D., Ripaldi, M., and Netti, P. A. (2017). Differentiation of leukemia stages by scattering signatures of individual cells. In *ELS XVI*.

Darrigol, O. (2005). *Les équations de Maxwell de MacCullagh à Lorentz*. Belin.

Dauchet, J. (2012). *Analyse radiative des photobioréacteurs*. PhD thesis, Université Blaise Pascal - Clermont II.

Dauchet, J., Bezian, J.-J., Blanco, S., Caliot, C., Charon, J., Coustet, C., Hafi, M. E., Eymet, V., Farges, O., Forest, V., Fournier, R., Galtier, M., Gautrais, J., Khuong, A., Pelissier, L., Piaud, B., Roger, M., Terrée, G., and Weitz, S. (2016a). Monte Carlo and nonlinearities.

Dauchet, J., Blanco, S., Cornet, J.-F., El Hafi, M., Eymet, V., and Fournier, R. (2013). The practice of recent radiative transfer Monte Carlo advances and its contribution to the field of microorganisms cultivation in photobioreactors. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 128 :52–59.

Dauchet, J., Blanco, S., Cornet, J.-F., and Fournier, R. (2015). Calculation of the radiative properties of photosynthetic microorganisms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 161 :60–84.

Dauchet, J., Cornet, J.-F., Gros, F., Roudet, M., and Dussap, C.-G. (2016b). Chapter One - Photobioreactor Modeling and Radiative Transfer Analysis for Engineering Purposes. In Legrand, J., editor, *Advances in Chemical Engineering - Photobioreaction Engineering*, pages 1 – 101. Elsevier.

De la Torre, J. (2011). *Calculs de sensibilités par méthode de Monte-Carlo, pour la conception de procédés à énergie solaire concentrée*. PhD thesis, Ecole des Mines d'Albi-Carmaux.

de Lataillade, A., Blanco, S., Clergent, Y., Dufresne, J., El Hafi, M., and Fournier, R. (2002). Monte Carlo method and sensitivity estimations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75(5) :529–538.

Debye, P. (1915). Zerstreuung von Röntgenstrahlen. *Annalen der Physik*, 351(6) :809–823.

Delatorre, J., Baud, G., Bézian, J., Blanco, S., Caliot, C., Cornet, J.-F., Coustet, C., Dauchet, J., El Hafi, M., Eymet, V., Fournier, R., Gautrais, J., Gourmel, O., Joseph, D., Meilhac, N., Pajot, a., Paulin, M., Perez, P., Piaud, B., Roger, M., Rolland, J., Veynandt, F., and Weitz, S. (2014). Monte Carlo advances and concentrated solar applications. *Solar Energy*, 103 :653–681.

DeVoe, H. (1964). Optical Properties of Molecular Aggregates. I. Classical Model of Electronic Absorption and Refraction. *The Journal of Chemical Physics*, 41(2) :393.

DeVoe, H. (1965). Optical Properties of Molecular Aggregates. II. Classical Theory of the Refraction, Absorption, and Optical Activity of Solutions and Crystals. *The Journal of Chemical Physics*, 43(9) :3199.

Dimov, I. (2008). *Monte Carlo Methods for Applied Scientists*. World Scientific.

Dimov, I. T. and Gurov, T. V. (2000). Monte Carlo algorithm for solving integral equations with polynomial non-linearity. Parallel implementation. *Pliska Studia Mathematica Bulgarica*, 13 :117–132.

Doicu, A., Eremin, Y., Efremenko, D. S., and Trautmann, T. (2015). Methods with discrete sources for electromagnetic scattering by large axisymmetric particles with extreme geometries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 164 :137–146.

Doicu, A. and Wriedt, T. (1997). Extended boundary condition method with multipole sources located in the complex plane. *Optics communications*, 139(June) :85–91.

Doicu, A. and Wriedt, T. (1999). Calculation of the T matrix in the null-field method with discrete sources. *Journal of the Optical Society of America A*, 16(10) :2539.

Doicu, A., Wriedt, T., and Eremin, Y. A. (2006). *Light Scattering by Systems of Particles : Null-Field Method with Discrete Sources : Theory and Programs*. Springer.

Draine, B. T. (1988). The Discrete Dipole Approximation and its application to interstellar graphite grains. *The Astrophysical Journal*, 333 :848–872.

Draine, B. T. (1999). The Discrete DipoleApproximation for Light Scattering by Irregular Targets. In Mishchenko, M., Hovenier, J., and Travis, L., editors, *Light Scattering by Nonspherical Particles - Theory, Measurements and Applications*, chapter V, pages 131–145.

Draine, B. T. and Flatau, P. (1994). Discrete-dipole approximation for scattering calculations. *Journal of the Optical Society of America A*, 11(4) :1491.

Draine, B. T. and Flatau, P. J. (2013). *User Guide for the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT.7.3*. http ://arxiv.org/abs/astro-ph/0309069.

Dunn, W. L. and Shultis, J. K. (2012). *Exploring Monte Carlo Methods*. Elsevier/Academic Press.

Eckhardt, R. (1987). Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo Method. *Los Alamos Science*, Special Is :131–141.

Enguehard, F. (2009). Mie Theory and the Discrete Dipole Approximation. Calculating Radiative Properties of Particulate Media, with Application to Nanostructured Materials. pages 151–212. Springer Berlin Heidelberg.

Eremin, Y. A., Sveshnikov, A. G., and Skobelev, S. P. (2011). Null field method in wave diffraction problems. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 51(8) :1391–1394.

Evans, B. T. and Fournier, G. R. (1994). Analytic approximation to randomly oriented spheroid extinction. *Applied optics*, 33(24) :5796–804.

Eymet, V., Poitou, D., Galtier, M., Hafi, M. E., Terrée, G., and Fournier, R. (2013). Null-collision meshless monte-carlo—application to the validation of fast radiative transfer solvers embedded in combustion simulators. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 129(Supplement C) :145 – 157.

Farges, B., Poughon, L., Creuly, C., and Cornet, J.-f. (2008). Dynamic Aspects and Controllability of the MELiSSA Project : A Bioregenerative System to Provide Life Support in Space. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 151 :686–699.

Farges, O., Bézian, J., Bru, H., El Hafi, M., Fournier, R., and Spiesser, C. (2015). Life-time integration using Monte Carlo Methods when optimizing the design of concentrated solar power plants. *Solar Energy*, 113 :57–62.

Farone, W. a. and Robinson, M. J. (1968). The range of validity of the anomalous diffraction approximation to electromagnetic scattering by a sphere. *Applied optics*, 7(4) :643–5.

Fikioris, J. G. (1965). Electromagnetic Field inside a Current-Carrying Region. *Journal of Mathematical Physics*, 6(11) :1617.

Fikioris, J. G. (1996). Electromagnetic field in the source region of continuouly varying current density. *Quaterly of Applied Mathematics*, LIV :201–209.

Flatau, P. J. and Draine, B. T. (2014). Light scattering by hexagonal columns in the discrete dipole approximation. *Optics express*, 22(18) :21834–46.

Fymat, A. L. (1979). Analytical inversions in remote sensing of particle size distributions . 3 : Angular and spectral scattering in the Rayleigh-Gans-Born approximation for particles of various geometrical shapes. *Applied optics*, 18(1) :126–130.

Galtier, M. (2014). *Approche statistique du rayonnement dans les milieux gazeux hétérogènes : de l'échantillonnage des transitions moléculaires au calcul de grandeurs radiatives*. PhD thesis, Université de Toulouse.

Galtier, M., Blanco, S., Caliot, C., Coustet, C., Dauchet, J., El Hafi, M., Eymet, V., Fournier, R., Gautrais, J., Khuong, A., Piaud, B., and Terrée, G. (2013). Integral formulation of null-collision Monte Carlo algorithms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 125 :57–68.

Gans, R. (1925). Strahlungsdiagramme ultramikroskopischer Teilchen. *Annalen der Physik*, 381(1) :29–38.

Gao, G. and Torres-Verdín, C. (2006). High-order generalized extended born approximation for electromagnetic scattering. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 54(4) :1243–1256.

Garcia-Lopez, A. C., Snider, A. D., and Garcia-Rubio, L. H. (2006). Rayleigh-Debye-Gans as a model for continuous monitoring of biological particles : Part I, assessment of theoretical limits and approximations. *Optics express*, 14(19) :8849–65.

Gay-Lussac and Arago (1820). Annales de chimie et de physique,. 15.

Gielis, J. (2003). A generic geometric transformation that unifies a wide range of natural and abstract shapes. *American Journal of Botany*, 90(3) :333–338.

Gilev, K. V., Eremina, E., Yurkin, M. A., and Maltsev, V. P. (2010). Comparison of the discrete dipole approximation and the discrete source method for simulation of light scattering by red blood cells. *Optics express*, 18(6) :5681–90.

Gomez, L., Yucel, A., and Michielssen, E. (2015). Low-Frequency Stable Internally Combined Volume-Surface Integral Equation for High-Contrast Scatterers. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 1225(c) :1–1.

Gordon, H. R. (2011). Light scattering and absorption by randomly-oriented cylinders : dependence on aspect ratio for refractive indices applicable for marine particles. *Optics express*, 19(5) :4673–4691.

Gordon, J. E. (1985). Simple method for approximating Mie scattering. *J. Opt. Soc. Am. A*, 2(2) :156.

Gustafson, B. Å. S. (2009). *Scaled analogue experiments in electromagnetic scattering*, pages 3–30. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

Hammer, M., Schweitzer, D., Michel, B., Thamm, E., and Kolb, A. (1998). Single Scattering by Red Blood Cells. *Applied Optics*, 37(31) :7410.

Hammersley, J. M. and Handscomb, D. C. (1964). *Monte Carlo Methods*. Springer Netherlands, Dordrecht.

Hanson, G. W. and Yakovlev, A. B. (2002). *Operator Theory for Electromagnetics : An Introduction*. Springer Science & Business Media.

Harrington, R. F. (1993). *Field Computation by Moment Methods*. IEEE Press.

Hellmers, J., Schmidt, V., and Wriedt, T. (2011). Improving the numerical stability of T-matrix light scattering calculations for extreme particle shapes using the null-field method with discrete sources. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(11) :1679–1686.

Helrich, C. S. (2012). The Classical Theory of Fields : Electromagnetism. 2 :462.

Hölder, O. (1882). *Beiträge zur Potentialtheorie*. J. Metzlersche Buchd.

Huang, C., Yao, W., T-raissi, A., and Muradov, N. (2011). Development of efficient photoreactors for solar hydrogen production. *Solar Energy*, 85(1) :19–27.

Iskander, M. F. and Lakhtakia, A. (1984). Extension of the iterative EBCM to calculate scattering by low-loss or lossless elongated dielectric objects. *Applied Optics*, 23(6) :948.

Ivanova, O. V., Dlugach, J. M., and Afanasiev, V. L. (2017). The scattering properties of dust in distant comets. In *ELS XVI*.

Jackson, J. D. (1998). Classical Electrodynamics, 3rd Edition. *Classical Electrodynamics, 3rd Edition, by John David Jackson, pp. 832. ISBN 0-471-30932-X. Wiley-VCH , July 1998.*, -1.

Jin, J.-M. (2014). *The Finite Element Method in Electromagnetics, 3rd Edition*. Wiley-IEEE Press.

Jin, J.-M. (2015). *Theory and Computation of Electromagnetic Fields, 2nd Edition*. Wiley-IEEE Press.

Johnson, B. (1988). Invariant Imbedding T-Matrix approach to electromagnetic scattering. *Appl. Opt.*, 27(23) :4861–4873.

Jones, A. (1999). Light scattering for particle characterization. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25(1) :1–53.

Jones, D. (1979). Low frequency electromagnetic radiation. *IMA Journal of Applied Mathematics*, (December 1978) :421–447.

Kahnert, F. (2003). *Numerical methods in electromagnetic scattering theory*, volume 79-80.

Kahnert, F., Stamnes, J. J., and Stamnes, K. (2003). Surface-integral formulation for electromagnetic scattering in spheroidal coordinates. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 77(1) :61–78.

Kahnert, F. M., Stamnes, J. J., and Stamnes, K. (2001). Application of the extended boundary condition method to homogeneous particles with point-group symmetries. *Applied optics*, 40(18) :3110–23.

Kahnert, M. (2013). The T-matrix code Tsym for homogeneous dielectric particles with finite symmetries. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 123 :62–78.

Kahnert, M. (2016). Numerical solutions of the macroscopic Maxwell equations for scattering by non-spherical particles : A tutorial review.

Kaissar Abboud, M. (2016). *Modélisation électromagnétique des propriétés radiatives des micro-organismes de forme sphéroïdale*. PhD thesis, Université Blaise Pascal - Clermont II.

Kalos, M. H. and Whitlock, P. A. (2008). *Monte Carlo methods*. Wiley-Blackwell.

Kandilian, R., Pruvost, J., Artu, A., Lemasson, C., Legrand, J., and Pilon, L. (2016). Comparison of experimentally and theoretically determined radiation characteristics of photosynthetic microorganisms. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 175 :30–45.

Kellogg, O. D. (1953). *Foundations of Potential Theory*. Dover.

Kerker, M. (1969). *The scattering of light, and other electromagnetic radiation*.

Kilgore, K., Moskow, S., and Schotland, J. C. (2017). Convergence of the Born and inverse Born series for electromagnetic scattering. *Applicable Analysis*, 96(10) :1737–1748.

Kleijnen, J. P. C., Ridder, A. A. N., and Rubinstein, R. Y. (2013). *Variance Reduction Techniques in Monte Carlo Methods*, pages 1598–1610. Springer US, Boston, MA.

Kleinman, R. E., Roach, G. F., and van den Berg, P. M. (1990). Convergent Born series for large refractive indices. *Journal of the Optical Society of America A*, 7(5) :890.

Kokhanovsky, A. (2008). *Aerosol Optics - Light Absorption and Scattering by Particles in the Atmosphere*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Kómar, L. A., Kocifaj, M. I., and Kohút, I. G. O. R. (2013). An extension to the Rayleigh – Gans formula : model of partially absorbing particles. XLIII(2).

Konoshonkin, A. V., Kustova, N. V., Borovoi, A. G., Grynko, Y., and Förstner, J. (2016). Light scattering by ice crystals of cirrus clouds : Comparison of the physical optics methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 182(June) :12–23.

Kunz, K. and Luebbers, R. (1993). *The Finite Difference Time Domain Method for Electromagnetics*. CRC Press.

Kylling, A., Kahnert, M., Lindqvist, H., and Nousiainen, T. (2014). Volcanic ash infrared signature : Porous non-spherical ash particle shapes compared to homogeneous spherical ash particles. *Atmospheric Measurement Techniques*, 7(4) :919–929.

Lakhtakia, A. (1990). Macroscopic theory of the coupled dipole approximation method. *Optics Communications*, 79(1-2) :1–5.

Lakhtakia, A. (1992). Strong and weak forms of the method of moments and the coupled dipole method for scattering of time-harmonic electromagnetic fields.

Lakhtakia, A. and Mulholland, G. (1993). On two numerical techniques for light scattering by dielectric agglomerated structures.

Lee, S.-W., Boersma, J., Law, C.-L., and Deschamps, G. (1980). Singularity in Green's function and its numerical evaluation. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 28(3) :311–317.

Li, J., Wang, X., and Wang, T. (2010). On the Validity of Born Approximation. *Progress In Electromagnetics Research*, 107(July) :219–237.

Liou, K., Takano, Y., and Yang, P. (2010). On geometric optics and surface waves for light scattering by spheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 111(12-13) :1980–1989.

Liou, K.-N. (1986). Influence of cirrus clouds on weather and climate processes : a global perspective. *American Meteorological Society*, 114 :1167 – 1199.

Liou, K.-N. and Yang, P. (2016). *Light Scattering by Ice Crystals : Fundamentals and Applications*. Cambridge University Press.

Liu, C., Bi, L., Panetta, R. L., Yang, P., and Yurkin, M. A. (2012). Comparison between the pseudo-spectral time domain method and the discrete dipole approximation for light scattering simulations. 20(15) :16763–16776.

Liu, J., Yang, P., and Muinonen, K. (2015). Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer Dust-aerosol optical modeling with Gaussian spheres : Combined invariant-imbedding T-matrix and geometric-optics approach. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 161 :136–144.

Liu, Y., Arnott, W. P., and Hallett, J. (1998). Anomalous diffraction theory for arbitrarily oriented finite circular cylinders and comparison with exact T-matrix results. *Applied Optics*, 37(21) :5019–5030.

Liu, Y., Feng, P., and Technology, C. (2016). Primary study on scattering property for irregular suspended particles in water with T-matrix theory. 10030 :1–6.

Lu, J. Q., Yang, P., and Hu, X.-H. (2005). Simulations of light scattering from a biconcave red blood cell using the finite-difference time-domain method. *Journal of Biomedical Optics*, 10(2) :024022.

Lu, Y., Clothiaux, E. E., Aydin, K., and Verlinde, J. (2014). Estimating ice particle scattering properties using a modified Rayleigh-Gans approximation. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 119(17) :10471–10484.

Lumme, K. (2011). Model of light scattering by dust particles in the solar system : Applications to cometary comae and planetary regoliths. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(11) :1658–1670.

Ma, Y. and Xu, Y. (2015). Computing Highly Oscillatory Integrals. pages 1–15.

Mackowski, D. W. (2002). Discrete dipole moment method for calculation of the T matrix for nonspherical particles. *Journal of the Optical Society of America A*, 19(5) :881.

Markkanen, J. and Ylä-Oijala, P. (2016). Numerical comparison of spectral properties of volume-integral-equation formulations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 178 :1–7.

Masłowska, A., Flatau, P., and Stephens, G. (1994). On the validity of the anomalous diffraction theory to light scattering by cubes. *Optics communications*, 107(April) :35–40.

Mattis, D. C. (1981). *The Theory of Magnetism I*, volume 17 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

Maxwell, J. C. (1873). *A treatise on electricity and magnetism*. Oxford : Clarendon Press.

Metropolis, N. (1987). The beginning of the Monte Carlo Method. *Los Alamos Science*, (Special Issue) :125–130.

Mie, G. (1908). Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*, 330(3) :377–445.

Mishchenko, M. (1991). Light scattering by randomly oriented axially symmetric particles. *J. Opt. Soc. Am. A*, 8(6) :871 – 882.

Mishchenko, M. and Martin, P. (2013). Peter Waterman and T-matrix methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 123 :2–7.

Mishchenko, M., Travis, L., and Lacis, A. (2006). *Multiple Scattering of Light by Particles : Radiative Transfer and Coherent Backscattering*. Cambridge University Press.

Mishchenko, M., Travis, L., and Mackowski, D. W. (1996). T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles : A review. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 55(5) :535–575.

Mishchenko, M. I. (2000). Calculation of the amplitude matrix for a nonspherical particle in a fixed orientation. *Appl. Opt.*, 39(6) :1026–1031.

Mishchenko, M. I. (2006). Far-field approximation in electromagnetic scattering. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 100(1-3) :268–276.

Mishchenko, M. I. (2014). *Electromagnetic Scattering by Particles and Particle Groups : An Introduction*. Cambridge University Press.

Mishchenko, M. I., Hovenier, J. W., and Travis, L. D. (2000). *Light scattering by nonspherical particles : theory, measurements, and applications*. Academic Press.

Mishchenko, M. I. and Travis, L. D. (1994). T-matrix computations of light scattering by large spheroidal particles. *Optics Communications*, 109(1-2) :16–21.

Mishchenko, M. I. and Travis, L. D. (1998). Capabilities and limitations of a current FORTRAN implementation of the T-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 60(3) :309–324.

Mishchenko, M. I., Travis, L. D., and Lacis, A. A. (2002). *Scattering, Absorption, and Emission of Light by Small Particles*. Cambridge University Press.

Mishchenko, M. I., Zakharova, N. T., Khlebtsov, N. G., Videen, G., and Wriedt, T. (2017). Comprehensive thematic t-matrix reference database : A 2015–2017 update. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 202 :240 – 246.

Mitchell, D. (2000). Parameterization of the Mie Extinction and Absorption Coefficients for Water Clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 57(9) :1311–1326.

Morris, V. J. and Jennings, B. R. (1977). Anomalous diffraction approximation to the low-angle scattering from coated spheres : a model for biological cells. *Biophysical journal*, 17(1) :95–101.

Moskalensky, A. E., Strokotov, D. I., Chernyshev, A. V., Maltsev, V. P., and Yurkin, M. A. (2014). Additivity of light-scattering patterns of aggregated biological particles Additivity of light-scattering patterns of aggregated biological particles. *Journal of biomedical optics*, 19(8).

Moskalensky, A. E., Yurkin, M. A., Konokhova, A. I., Strokotov, D. I., Nekrasov, V. M., Chernyshev, A. V., Tsvetovskaya, G. A., Chikova, E. D., and Maltsev, V. P. (2013). Accurate measurement of volume and shape of resting and activated blood platelets from light scattering. *Journal of biomedical optics*, 18(1) :17001.

Müller, C. (1969). *Foundations of the mathematical theory of electromagnetic waves*.

Muñoz, O. and Hovenier, J. W. (2011). Laboratory measurements of single light scattering by ensembles of randomly oriented small irregular particles in air . A review. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112 :1646–1657.

Napper, D. (1967). A diffraction theory approach to the total scattering by cubes. *Kolloid-Zeitschrift und Zeitschrift für Polymere*, 218(1) :41–46.

Neumann, V. (1951). Various techniques used in connection with random digits. *Bur. Stand. Math. Ser.*, 12 :36–38.

Nieminen, T. A., Rubinsztein-Dunlop, H., and Heckenberg, N. R. (2003). Calculation of the T-matrix : General considerations and application of the point-matching method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 79-80 :1019–1029.

Nousiainen, T., Zubko, E., Niemi, J. V., Kupiainen, K., Lehtinen, M., Muinonen, K., and Videen, G. (2009). Single-scattering modeling of thin, birefringent mineral-dust flakes using the discrete-dipole approximation. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 114(7) :1–12.

Oguchi, T. (1973). Attenuation and phase rotation of radio waves due to rain : Calculations at 19.3 and 34.8 GHz. *Radio Science*, 8(1) :31–38.

Orlova, D. Y., Yurkin, M. a., Hoekstra, A. G., and Maltsev, V. P. (2014). Light scattering by neutrophils : model, simulation, and experiment. *Journal of biomedical optics*, 13(5) :054057.

Oskooi, A. F., Roundy, D., Ibanescu, M., Bermel, P., Joannopoulos, J. D., and Johnson, S. G. (2010). Meep : A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method. *Computer Physics Communications*, 181(3) :687–702.

Osnabrugge, G., Leedumrongwatthanakun, S., and Vellekoop, I. M. (2016). A convergent Born series for solving the inhomogeneous Helmholtz equation in arbitrarily large media. *Journal of Computational Physics*, 322 :1–15.

Pankratov, O., Avdeyev, D., and Kuvshinov, A. (1995). Electromagnetic field scattering in a heterogeneous earth : A solution to the forward problem. *Physics of the Solid Earth*, 31(3) :201–209.

Penttilä, A., Zubko, E., Lumme, K., Muinonen, K., Yurkin, M. A., Draine, B., Rahola, J., Hoekstra, A. G., and Shkuratov, Y. (2007). Comparison between discrete dipole implementations and exact techniques. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 106(1-3) :417–436.

Peterson, A. (2006). Volume Integral Equations for Electromagnetic Scattering from Dielectric Objects : Observations and Questions. *Forum for Electromagnetic Research Methods and ...*, I.

Petrov, D., Shkuratov, Y., and Videen, G. (2007). Optimized matrix inversion technique for the T-matrix method. *Optics letters*, 32(9) :1168–70.

Pharr, M., Jakob, W., and Humphreys, G. (2016). *Physically Based Rendering : From Theory to Implementation (3rd ed.)*. Morgan Kaufmann, second edi edition.

Pruvost, J. and Cornet, J.-F. (2012). Knowledge models for the engineering and optimization of photobioreactors. In Posten, Clemens / Walter, C., editor, *Microalgal Biotechnology : Potential and Production*, pages 181 – 224. DE GRUYTER.

Purcell, E. and Pennypacker, C. (1973). Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains. *The Astrophysical Journal*, 186 :705–714.

Rayleigh, L. (1914). On the diffraction of Light by spheres of small relative index. *Roy. Soc. Proc.*, 84 :219–225.

Rayleigh, L. (1918). On the dispersal of light by a dielectric cylinder. *Philosophical Magazine*, 36(215) :365–376.

Rochatte, V. (2016). *Développement et modélisation d'un photobioréacteur solaire à dilution interne du rayonnement*. PhD thesis, Université Blaise Pascal - Clermont II.

Roger, M. (2006). Modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de Monte-Carlo : illustrations en transfert radiatif.

Roger, M., Blanco, S., El Hafi, M., and Fournier, R. (2005). Monte Carlo Estimates of Domain-Deformation Sensitivities. *Physical Review Letters*, 95(18) :180601.

Rother, T. and Kahnert, M. (2014). *Electromagnetic Wave Scattering on Nonspherical Particles*, volume 145 of *Springer Series in Optical Sciences*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

Saleh, H. (2017). *Analogie microonde appliquée à l'étude de la diffraction par des arbres, par des particules atmosphériques et des micro-organismes*. PhD thesis, Université Aix-Marseille.

Saleh, H., Charon, J., Dauchet, J., Tortel, H., and Geffrin, J.-M. (2017). Microwave analog experiments on optically soft spheroidal scatterers with weak electromagnetic signature. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 196 :1–9.

Saxon, D. (1973). Lectures on the scattering of light. In Kuriyan, J., editor, *The UCLA international conference on radiation and remote probing of the atmosphere*, pages 227–308.

Schiff, L. I. (1956). Approximation method for high-energy potential scattering. *Physical Review*, 103(2) :443–453.

Schulz, F. M., Stamnes, K., and Stamnes, J. J. (1998). Scattering of electromagnetic waves by spheroidal particles : a novel approach exploiting the T matrix computed in spheroidal coordinates. *Applied optics*, 37(33) :7875–7896.

Shapovalov, K. (2015). Scattering light by a cylindrical capsule with arbitrary end caps in the Rayleigh-Gans-Debye approximation. *Science and Education of the Bauman MSTU*, 15(5) :309–318.

Shapovalov, K. A. (2011). Light scattering by particles of toroidal shape in the Rayleigh-Gans-Debye approximation. *Optics and Spectroscopy*, 110(5) :806–810.

Shapovalov, K. A. (2013). Light Scattering by a Prism and Pyramid in the Rayleigh-Gans-Debye Approximation. *Optics*, 2(2) :32.

Sharma, S. (1992). On the Validity of the Anomalous Diffraction Approximation. *Journal of Modern Optics*, 39(11) :2355–2361.

Sharma, S. and Banerjee, S. (2012). On the validity of the anomalous diffraction approximation in light-scattering studies of soft biomedical tissues. *Journal of Modern Optics*, 59(8) :701–709.

Sharma, S. K. (2015). A modified Rayleigh-Gans-Debye formula for small angle X-ray scattering by interstellar dust grains. *Astrophysics and Space Science*, 357(1) :80.

Sharma, S. K. and Somerford, D. J. (1988). Modified Rayleigh-Gans-Debye approximations applied to sizing transparent homogeneous long fibres of intermediate size. *Journal of Physics D : Applied ...*, 21 :403–406.

Sharma, S. K. and Somerford, D. J. (2006). *Light Scattering by Optically Soft Particles*, volume 1. Springer.

Shimizu, K. (1979). *Remote sensing of microparticles by laser scattering for medical applications : approach with transport theory and picosecond optical range-gating.* PhD thesis, University of Washington.

Shimizu, K. (1983). Modification of the Rayleigh-Debye approximation. *Journal of the Optical Society of America*, 73(4) :504–507.

Siegel, R. (2001). *Thermal Radiation Heat Transfer, Fourth Edition.* Taylor & Francis.

Somerville, W. R. C., Auguié, B., and Le Ru, E. C. (2012). Severe loss of precision in calculations of T-matrix integrals. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 113(7) :524–535.

Somerville, W. R. C., Auguié, B., and Le Ru, E. C. (2016). Smarties : User-friendly codes for fast and accurate calculations of light scattering by spheroids. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 174 :39–55.

Stephens, G. L. (1984). Scattering of plane waves by soft obstacles : anomalous diffraction theory for circular cylinders. *Applied optics*, 23(6) :954.

Stratton, J. A. (1941). *Electromagnetic Theory.* IEEE Press.

Streekstra, G. J., Hoekstra, A., and Heethaar, R. M. (1994). Anomalous diffraction by arbitrarily oriented ellipsoids : applications in ektacytometry. *Applied optics*, 33(31) :7288–96.

Sun, B., Kattawar, G. W., Yang, P., Twardowski, M. S., and Sullivan, J. M. (2016). Simulation of the scattering properties of a chain-forming triangular prism oceanic diatom. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 178 :390–399.

Sun, B., Yang, P., and Kattawar, G. W. (2013). Many-body iterative T-matrix method for large aspect ratio particles. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 127 :165–175.

Sun, W. and Fu, Q. (1999). Anomalous diffraction theory for arbitrarily oriented hexagonal crystals. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 63(2-6) :727–737.

Taflove, A. (2007). Advances in fdtd techniques and applications in photonics. Ottawa, Canada. Photonics North.

Taflove, A. and Hagness, S. C. (2005). Computational Electrodynamics : The Finite-Difference Time-Domain Method, Third Edition.

Tai, C. T. (1987). Some essential formulas in dyadic analysis and their applications. *Radio Science*, 22(7) :1283–1288.

Tai, C.-T. (1994). *Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory*.

Tien, C. L. and Drolen, B. L. (1987). Thermal Radiation in Particulate Media with Dependent and Independent Scattering. In *Annual Review of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer*, volume 1, pages 1–32.

Tsang, L., Kong, J. A., and Ding, K.-H. (2000). *Scattering of electromagnetic waves. Theories and applications*. Wiley.

Tyynelä, J., Leinonen, J., Westbrook, C. D., Moisseev, D., and Nousiainen, T. (2013). Applicability of the Rayleigh-Gans approximation for scattering by snowflakes at microwave frequencies in vertical incidence. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 118(4) :1826–1839.

Vaillon, R. and Geffrin, J.-M. (2014). Recent advances in microwave analog to light scattering experiments. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 146 :100–105.

Vaillon, R., Geffrin, J.-M., Eyraud, C., Merchiers, O., Sabouroux, P., and Lacroix, B. (2011). A new implementation of a microwave analog to light scattering measurement device. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(11) :1753–1760.

Van Bladel, J. (1961). Some remarks on green's dyadic for infinite space. *IRE Transactions on Antennas and Propagation*, 9(6) :563–566.

Van Bladel, J. G. (2007). *Electromagnetic Fields*.

Van de Hulst, H. C. (1957). *Light Scattering by Small Particles*. Courier Corporation.

Vartia, O. S., Ylä-Oijala, P., Markkanen, J., Puupponen, S., Seppälä, A., Sihvola, A., and Ala-Nissila, T. (2016). On the applicability of discrete dipole approximation for plasmonic particles. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 169 :23–35.

Volakis, J. L., Chatterjee, A., and Kempel, L. C. (1998). *Finite Element Method for Electromagnetics*. IEEE Press.

Wait, J. R. (1955). Scattering of a Plane Wave From a Circular Dielectric Cylinder At Oblique Incidence. *Canadian Journal of Physics*, 33(5) :189–195.

Wang, J. (1982). A unified and consistent view on the singularities of the electric dyadic Green's function in the source region. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 30(3) :463–468.

Warren, C., Giannopoulos, A., and Giannakis, I. (2016). gprMax : Open source software to simulate electromagnetic wave propagation for Ground Penetrating Radar. *Computer Physics Communications*, 209 :163–170.

Waser, A. (2000). On the Notation of Maxwell' s Field Equations. pages 1–14.

Waterman, P. (1965). Matrix formulation of electromagnetic scattering. *Proceedings of the IEEE*, 53(8) :805–812.

Waterman, P. C. (1971). Symmetry, unitarity, and geometry in electromagnetic scattering. *Physical Review D*, 3(4) :825–839.

Weisstein, E. W. (2003). *CRC concise encyclopedia of Mathematics*. Chapman & Hall/CRC.

Weitz, S., Blanco, S., Charon, J., Dauchet, J., El Hafi, M., Eymet, V., Farges, O., Fournier, R., and Gautrais, J. (2016). Monte Carlo efficiency improvement by multiple sampling of conditioned integration variables. *Journal of Computational Physics*, 326 :30–34.

Wen, G. (2010). *Foundations of applied electrodynamics*. Wiley.

Whittaker, E. T. (1910). A history of the theories of aether and electricity : from the age of Descartes to the close of the nineteenth century.

Wriedt, T. (2007). Review of the null-field method with discrete sources. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 106(1-3) :535–545.

Wriedt, T. (2009). Light scattering theories and computer codes. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 110(11) :833–843.

Wriedt, T. and Comberg, U. (1998). Comparison of computational scattering methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 60(3) :411–423.

Wriedt, T. and Doicu, A. (1998). Formulations of the extended boundary condition method for three-dimensional scattering using the method of discrete sources. *Journal of modern optics*, 45(45) :199–213.

Wriedt, T., Hellmers, J., Eremina, E., and Schuh, R. (2006). Light scattering by single erythrocyte : Comparison of different methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 100(1-3) :444–456.

Wyatt, P. J. (1968). Differential light scattering : a physical method for identifying living bacterial cells. *Appl. Opt.*, 7(10) :1879–1896.

Xing, Z., Zong, X., Pan, J., and Wang, L. (2013). On the engineering part of solar hydrogen production from water splitting : Photoreactor design. *Chemical Engineering Science*, 104 :125–146.

Xu, F., Ren, K. F., Cai, X., and Shen, J. (2006a). Extension of geometrical-optics approximation to on-axis Gaussian beam scattering. II. By a spheroidal particle with end-on incidence. *Applied optics*, 45(20) :5000–9.

Xu, F., Ren, K. F., Cai, X., and Shen, J. (2006b). Extension of geometrical-optics approximation to on-axis Gaussian beam scattering. II. By a spheroidal particle with end-on incidence. *Applied optics*, 45(20) :5000–9.

Xu, G., Sun, B., Brooks, S. D., Yang, P., Kattawar, G. W., and Zhang, X. (2017). Modeling the Inherent Optical Properties of Aquatic Particles using an Irregular Hexahedral Ensemble. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*.

Xu, M. and Katz, A. (2008). Statistical interpretation of light anomalous diffraction by small particles and its applications in bio-agent detection and monitoring. *Light Scattering Reviews 3*, pages 27–67.

Yadav, M. K. and Sharma, S. K. (2008). On the validity of Rayleigh–Gans–Debye type approximations in red blood cell size determination. *Journal of Modern Optics*, 55(6) :921–929.

Yaghjian (1980). Electric dyadic Green's functions in the source region. *Proceedings of the IEEE*, 68(2) :248–263.

Yan, W. Z., Du, Y., Wu, H., and Liu, D. W. (2008). EM Scattering from a long dielectric circular cylinder. *Progress In Electromagnetics Research*, 85 :39–67.

Yang, P. and Liou, K. (1996a). Finite-difference time domain method for light scattering by small ice crystals in three-dimensional space. 13(10) :2072–2085.

Yang, P. and Liou, K. (2000). Finite Difference Time Domain Method for Light Scattering by Nonspherical and Inhomogeneous Particles. In Mishchenko, M. I., Hovenier,

J. W., and Travis, L. D., editors, *Light Scattering by Nonspherical Particles - Theory, Measurements and Applications*, chapter 7, pages 173 – 221. Academic Press.

Yang, P. and Liou, K. N. (1996b). Geometric-optics–integral-equation method for light scattering by nonspherical ice crystals. *Applied Optics*, 35(33) :6568.

Yang, P. and Liou, K. N. (1997). Light scattering by hexagonal ice crystals : solutions by a ray-by-ray integration algorithm. *Journal of the Optical Society of America A*, 14(9) :2278.

Yang, P. and Liou, K.-N. (2006). *Light scattering and absorption by nonspherical ice crystals*, pages 31–71. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

Yang, P., Liou, K.-n., Bi, L., Liu, C., Yi, B., and Baum, B. a. (2015). On the Radiative Properties of Ice Clouds : Light Scattering , Remote Sensing , and Radiation Parameterization. 32(JANUARY) :32–63.

Yee, K. (1966). Numerical Solution of Initial Value Problems of Maxwells Equations in Isotropic Media. *IEEE Antennas and Propagation*, 14(3) :302 – 307.

Ylä-Oijala, P., Markkanen, J., Järvenpää, S., and Kiminki, S. P. (2014). Surface and Volume Integral Equation Methods for Time-Harmonic Solutions of Maxwell's Equations. *Progress In Electromagnetics Research*, 149(August) :15–44.

Yuan, Y., Ren, K., Rozé, C., and Girasole, T. (2010). Extended geometrical optics approximation and Monte Carlo ray tracing for light scattering by an irregular object. *researchgate.net*, (1996) :5–8.

Yurkin, M. and Hoekstra, A. (2007). The discrete dipole approximation : An overview and recent developments. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 106(1-3) :558–589.

Yurkin, M., Maltsev, V., and Hoekstra, A. (2007a). The discrete dipole approximation for simulation of light scattering by particles much larger than the wavelength. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 106(1) :546–557.

Yurkin, M. A. (2007). *Discrete dipole simulations of light scattering by blood cells*. PhD thesis, Universiteit van Amsterdam.

Yurkin, M. A. (2016). Capabilities of the Discrete Dipole Approximation for Large Particle Systems. In *2016 URSI International Symposium on Electromagnetic Theory (EMTS)*, pages 388–391.

Yurkin, M. A. and Hoekstra, A. A. (2016). Corrigendum to "The discrete dipole approximation : An overview and recent developments" [J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 106 (2007) 558–589].

Yurkin, M. A. and Hoekstra, A. G. (2011). The discrete-dipole-approximation code ADDA : Capabilities and known limitations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112(13) :2234–2247.

Yurkin, M. A., Hoekstra, A. G., Brock, R. S., and Lu, J. Q. (2007b). Systematic comparison of the discrete dipole approximation and the finite difference time domain method for large dielectric scatterers. 15(26) :17902–17911.

Yurkin, M. A. and Kahnert, M. (2013). Light scattering by a cube : Accuracy limits of the discrete dipole approximation and the T-matrix method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 123 :176–183.

Zhao, J.-Q., Shi, G., Che, H., and Cheng, G. (2006). Approximations of the scattering phase functions of particles. *Advances in Atmospheric Sciences*, 23(5) :802–808.

Zhu, Y. and Cangellaris, A. C. (2006). Multigrid Finite Element Methods for Electromagnetic Field Modeling. page 439.

# *Table des figures*


I.1 Illustration des entrées et sorties d'un photobioréacteur . . . . . 5
I.2 Chaîne de modélisation prédictive développée dans le cadre de l'étude des photobioréacteurs pour l'obtention des propriétés radiatives des micro-organismes photosynthétiques . . . . . 8
I.3 Phénomène de diffusion d'une onde électromagnétique plane par une particule . . . . . 12
I.4 Approximation du champ lointain . . . . . 13
I.5 Définition des bases et des angles utilisés pour définir la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$. . . . . 16
I.6 Illustration des notations utilisées pour la section efficace différentielle de diffusion $\hat{W}_{sca}$ et la fonction de phase $p(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ d'une particule isolée. $\vartheta_{sca}$ est l'angle de diffusion. . . . . 19

II.1 Méthodes de résolution numérique du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule . . . . . 25
II.2 Illustration des différentes améliorations de la méthodes T-Matrix . . . . 31
II.3 Discrétisation du volume de la particule dans le cadre de la méthode DDA 32
II.4 Schématisation d'une discrétisation d'une particule dans le cadre de la méthode FDTD . . . . . 35
II.5 Notations dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye . . . 40
II.6 Efficacités de diffusion et d'absorption d'une particule sphérique isolée en fonction du paramètre de taille dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye - $m_r = 1.01 - 0.005i$ . . . . . 41
II.7 Efficacités de diffusion et d'absorption d'une particule sphérique isolée en fonction du paramètre de taille dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye - $m_r = 1.1 - 0.005i$ . . . . . 41
II.8 Fonction de phase d'une particule sphérique dans le cadre de l'approximation de Rayleigh-Gans-Debye . . . . . 42
II.9 Efficacités de diffusion et d'absorption en fonction du paramètre de taille dans le cadre de l'approximation de la diffraction anomale . . . . . 45

II.10 Approximations du problème de diffusion d'une onde électromagnétique par une particule . . . . . 47
II.11 Fichier CAO d'une spiruline . . . . . 51
II.12 Illustration du micro-organisme *Arthospira platensis* . . . . . 55

III.1 Illustration du principe d'équivalence en volume utilisé en électromagnétisme. . . . . 64
III.2 Schématisation de l'approximation de Born . . . . . 73
III.3 Représentation des bases $\mathcal{B}_i$ et $\mathcal{B}_s$ . . . . . 74
III.4 Illustration du développement en série de Born . . . . . 79
III.5 Volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ centré au point singulier $\vec{r}_0$ contenue dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule . . . . . 81
III.6 Volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ centré au point singulier $\vec{r}_0$ contenue dans le volume $\mathcal{V}_p$ de la particule . . . . . 84
III.7 Notations utilisées pour définir la dyade $\bar{\bar{L}}$ . . . . . 85
III.8 Illustration de l'apparition de charge à la surface du volume d'exclusion $\mathcal{V}_\delta$ 86
III.9 Illustration d'un volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ centré autour du point singulier $\vec{r}_0$ . . . . . 87
III.10 Représentation de la zone de phase stationnaire pour le calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_1$ pour les petits angles de diffusion . . . . . 99
III.11 Représentation de la zone de phase stationnaire pour le calcul de l'intégrale $\mathcal{I}_q$ pour les petits angles de diffusion . . . . . 100
III.12 Représentation de la zone de phase stationnaire dans le cas des grands angles de diffusion . . . . . 102
III.13 Illustration des deux contributions dans le cadre de l'approximation de Schiff. . . . . 105
III.14 Représentation des quantités géométriques et notations intervenant dans le calcul de l'amplitude de diffusion $S(\vec{e}_i, \vec{e}_s)$ dans le cadre de l'approximation de Schiff . . . . . 110

IV.1 Représentation des quantités géométriques dans le cadre de l'approximation de Schiff . . . . . 115
IV.2 Influence du nombre de réalisations sur l'évaluation d'une grandeur par la méthode de Monte Carlo . . . . . 117
IV.3 Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, la section efficace d'extinction $\hat{\sigma}_{ext}$ d'une particule isolée . . . . . 117

IV.4 Organigramme estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, les sections efficaces $\sigma_k$ par la méthode de Monte Carlo . . . . . 125
IV.5 Organigramme estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, l'amplitude de diffusion $S$ par la méthode de Monte Carlo . . . . . 127
IV.6 Organigramme estimant, dans le cadre de l'approximation de Schiff, la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ par la méthode de Monte Carlo . . . . . 130
IV.7 Définition des angles d'Euler $(\theta_o, \varphi_o, \gamma_o)$ pour l'orientation d'une particule. 132
IV.8 Représentation des quantités géométriques d'une particule sphéroïdale . . 156
IV.9 Surface projetée $\mathcal{P}(\theta_o, r_{eq})$ d'un cylindre . . . . . 162
IV.10 Surface projetée d'un cylindre avec les variables réduites $\xi_0$ et $\eta_0$. . . . . 163
IV.11 Illustration du calcul de la longueur de traversée d'une particule à géométrie complexe . . . . . 170
IV.12 Illustration de l'échantillonnage d'une position sur la surface projetée . . 172
IV.13 Échantillonnage isotrope d'une orientation de particule . . . . . 173
IV.14 Adaptation de la longueur d'onde du rayonnement incident suivant la taille de la géométrie fixée . . . . . 174
IV.15 Efficacités de diffusion et d'absorption en fonction du paramètre de taille d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes, homothétiques avec prise en compte des distributions de taille et d'orientation des particules . . . . . 179
IV.16 Efficacités de diffusion et d'absorption en fonction du paramètre de taille d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques cylindriques homogènes, homothétiques avec prise en compte des distributions de taille et d'orientation des particules . . . . . 180
IV.17 Fonction de phase en fonction de l'angle de diffusion pour une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques en tenant compte des prises de moyenne sur les tailles et les orientations . . . . . 181
IV.18 Fonction de phase en fonction de l'angle de diffusion pour une suspension de micro-organismes photosynthétiques cylindriques homogènes et homothétiques en tenant compte des prises de moyenne sur les tailles et les orientations . . . . . 181
IV.19 Sensibilités $\partial_{n_r}\sigma_{sca}$ de la section efficace de diffusion d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques en tenant compte des prises de moyenne sur les tailles et les orientations . . . . . 182

IV.20 Représentation schématique de la détermination de la sensibilité de la grandeur $G$ suivant le paramètre $\pi$ en utilisant la méthode des différences finies à partir des résultats de l'estimation de la grandeur $G$ par la méthode de Monte Carlo. . . . . 183
IV.21 Sensibilités $\partial_{\kappa_r}\sigma_k$ des sections efficaces d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques en tenant compte des prises de moyenne sur les tailles et les orientations . . . . . 184
IV.22 Sensibilités $\partial_{\lambda_e}\sigma_k$ des sections efficaces d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux homogènes et homothétiques en tenant compte des prises de moyenne sur les tailles et les orientations . . . . . 184
IV.23 Sections efficaces en fonction du paramètre de taille d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux de tailles fixées en tenant compte de la distribution sur les orientations des particules . . . . 186
IV.24 Section efficace différentielle de diffusion en fonction de l'angle de diffusion d'une suspension de micro-organismes photosynthétiques sphéroïdaux de tailles fixées en tenant compte de la distribution sur les orientations des particules . . . . . 187
IV.25 Principe de l'analogie micro-onde . . . . . 189
IV.26 Particules sphéroïdales analogues usinées dans trois mousses différentes . 190
IV.27 Représentation schématique des trois configurations angulaires étudiées . 191
IV.28 Section efficace différentielle de diffusion et amplitude de diffusion en fonction de l'angle de diffusion - sphéroïde Hardy . . . . . 194
IV.29 Section efficace différentielle de diffusion et amplitude de diffusion en fonction de l'angle de diffusion - sphéroïde Laurel . . . . . 195
IV.30 Illustration de l'intérêt du calcul de sensibilité par la méthode de Monte Carlo pour la propagation d'incertitude sur la valeur d'un paramètre . . . 196

V.1 Représentation d'un chemin dans le cadre de l'approximation de Born. . . 201
V.2 Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la matrice amplitude de diffusion $\bar{\bar{S}}$ . . 203
V.3 Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace différentielle de diffusion $W_{sca}$ . . . . . 206
V.4 Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ . . 210
V.5 Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace d'absorption $\sigma_{abs}$ . . 211

V.6 Échantillonnage d'une position dans une particule à l'aide d'un volume englobant . . . 216
V.7 Adaptation de la longueur d'onde du rayonnement incident suivant la taille de la géométrie fixée . . . 218
V.8 Organigramme traduisant l'algorithme de Monte Carlo estimant, dans le cadre de l'approximation de Born, la section efficace de diffusion $\sigma_{sca}$ . . . 223
V.9 Section efficace différentielle de diffusion en fonction de l'angle de diffusion obtenue, dans le cadre de l'approximation de Born, pour une suspension de particules sphériques (respectivement cylindriques) . . . 228
V.10 Section efficace différentielle de diffusion en fonction de l'angle de diffusion obtenue, dans le cadre de l'approximation de Born, pour une suspension de particules cylindriques avec des extrémités sphériques . . . 229
V.11 Section efficace de diffusion en fonction du paramètre de taille obtenue, dans le cadre de l'approximation de Born, pour une suspension de particules sphériques (respectivement cylindriques) . . . 229
V.12 Sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à la partie réelle $n_r$. . . . 230
V.13 Sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à la partie imaginaire $\kappa_r$. . . . 230
V.14 Sensibilité de la section efficace différentielle de diffusion par rapport à la longueur d'onde $\lambda_e$. . . . 231

VI.1 Chemin au sein du volume $\mathcal{V}_p$ de la particule . . . 240
VI.2 Exemple de réalisation de la variable contribution $\vec{W}$ le long d'un chemin $\vec{\Gamma}$ 242
VI.3 Illustration de l'échantillonnage d'une position dans le volume de la particule privé du volume d'exclusion . . . 256
VI.4 Influence du rayon $\delta$ du volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ . . . 260
VI.5 Influence du nombre de réalisations de l'algorithme de Monte Carlo sur le rayon du volume d'exclusion sphérique . . . 260
VI.6 Sections efficaces de diffusion et d'extinction d'un ensemble de particules cylindriques en fonction du paramètre de taille $\bar{x}$ . . . 261
VI.7 Section efficace différentielle de diffusion d'une suspension de particules sphériques en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ et du paramètre de taille $\bar{x}$ 262
VI.8 Section efficace différentielle de diffusion d'une suspension particules cylindriques en fonction de l'angle de diffusion $\vartheta_{sca}$ et du paramètre de taille $\bar{x}$ . . . 263

VII.1 Construction d'une position $\vec{r}_0$ au sein du volume d'une particule sphérique 269

VII.2 Tracé de la fonction $f$ . . . 271
VII.3 Tracé de la fonction h . . . 272
VII.4 Procédure d'échantillonnage par la méthode de rejet . . . 274
VII.5 Construction d'une position $\vec{r}_0$ au sein du volume d'une particule sphéroïdale 278
VII.6 Comparaison de l'écart type obtenu avec deux PDFs optimisées et une PDF uniforme en fonction du paramètre de taille - particule sphéroïdale . 282
VII.7 Comparaison de l'écart type obtenu avec deux PDFs optimisées et une PDF uniforme en fonction de l'angle de diffusion - particule sphéroïdale . 283
VII.8 Comparaison de l'écart type obtenu avec une PDF optimisée et une PDF uniforme en fonction du paramètre de taille - particule sphéroïdale . . . . 285
VII.9 Comparaison de l'écart type obtenu avec une PDF optimisée et une PDF uniforme en fonction de l'angle de diffusion - particule sphéroïdale . . . . 286

B.1 Représentation des notations pour l'utilisation du second théorème de Green vectorielle-dyadique . . . 302

C.1 Discrétisation de la particule dans le cadre de la méthode DDA : exemple d'une discrétisation cubique. . . . 308

D.1 Représentation des notations utilisées pour le calcul du facteur de forme d'une particule sphérique . . . 312
D.2 Particule cylindrique avec extrémités sphériques . . . 314
D.3 Fonction de phase en fonction de l'angle de diffusion d'une particule sphérique homogène non absorbante . . . 319
D.4 Fonction de phase en fonction de l'angle de diffusion d'une particule sphérique de paramètre de taille $x = 10$ pour deux indices de réfractions relatifs réels $n_r = 1.01$ et $n_r = 1.1$. . . . 321
D.5 Fonction de phase en fonction de l'angle de diffusion d'une particule sphérique d'indice de réfraction relatif réel $n_r = 1.1$ et pour quatre paramètres de tailles $x = 2, x = 5, x = 15$ et $x = 25$ . . . 321
D.6 Efficacité de diffusion d'une particule sphérique en fonction du paramètre de taille pour deux indices de réfractions relatifs réels $n_r = 1.01$ et $n_r = 1.1$ 323

E.1 Représentation schématique de la diffraction de Fraunhofer. . . . 326

F.1 Fonction densité de probabilité uniforme et sa fonction de répartition. . . 331
F.2 Loi log-normale : représentation de la fonction densité de probabilité (PDF) et de la fonction de répartition (CDF). . . . 332
F.3 Représentation schématique de la méthode de la cumulée inverse. . . . 335

F.4 Schématisation de la procédure d'échantillonnage par la méthode de rejet 338

G.1 Représentation de la zone de phase stationnaire dans le cas des grands angles de diffusion . . . . . 342
G.2 Étude du sphéroïde Hardy - Cas $n_r = 1.17$ . . . . . 352
G.3 Étude du sphéroïde Laurel - Cas $n_r = 1.17$ . . . . . 353
G.4 Étude du sphéroïde Hardy - Cas $n_r = 1.20$ . . . . . 354
G.5 Étude du sphéroïde Laurel - Cas $n_r = 1.20$ . . . . . 355

I.1 Volume d'exclusion sphérique $\mathcal{V}_\delta$ de rayon $\delta$ centré en $\vec{r}_c$ . . . . . 366

J.1 Représentation des notations. . . . . 383

## Résolution par la méthode de Monte Carlo de formulations intégrales du problème de diffusion électromagnétique par une suspension de particules à géométries complexes

**Résumé :** L'étude du problème de la diffusion d'une onde électromagnétique par une suspension de particules non sphériques est une difficulté récurrente dans de nombreux domaines de la recherche et de l'ingénierie. Cela implique d'utiliser des dispositifs expérimentaux hautement spécialisés ou de résoudre les équations de Maxwell, ce qui représente un véritable défi lorsque les particules sont de géométries complexes et avec des distributions statistiques de taille, d'orientation et de forme. L'objectif de la présente thèse est d'explorer l'utilisation de la méthode de Monte Carlo pour résoudre des formulations intégrales du champ électromagnétique diffusé déduites des équations de Maxwell. En particulier, nous résolvons celles de l'approximation de Schiff, de l'approximation de Born ainsi que celle du développement en série de Born. Notre approche est basée sur un travail de reformulation intégrale permettant de concevoir des algorithmes incluant les avancées les plus récentes de la méthode. Cette approche originale, utilisant les outils de la synthèse d'image pour gérer n'importe quelle géométrie, permet de traiter des statistiques de particules ainsi que d'évaluer les sensibilités à des paramètres d'intérêts, sans augmentation significative du temps de calcul. Les outils développés répondent d'ores et déjà aux besoins d'optimisation des photobioréacteurs qui mettent en œuvre des particules à faible contraste d'indice (micro-algues). À l'issue de ce travail, des pistes de recherches ont émergé pour explorer le verrou bien identifié des grandes particules et des forts contrastes d'indice à partir du principe de zéro-variance.

**Mots-clés :** Méthode de Monte Carlo, formulation intégrale, propriétés radiatives, particules à géométries complexes, diffusion électromagnétique.

## Resolution by Monte Carlo method of the electromagnetic scattering by a suspension of complex-shaped particles

**Abstract :** The resolution of the problem of an electromagnetic wave scattered by non-spherical particles suspensions is a significant difficulty encountered in many fields of research and engineering. This implies to use highly specialized experiments or to solve Maxwell's equations, which is a real challenge when we consider particles with complex shapes and with statistical distributions of size, orientation and shape. The aim of this thesis is to investigate the use of the Monte Carlo method in order to solve the integral formulations of electromagnetic scattering deduced from Maxwell's equations. In particular, we solve those of Schiff's approximation, Born's approximation as well as the Born series expansion. Our approach is based on integral reformulation in order to design algorithms including the most recent advances of the method. This original approach, using computer graphics algorithms in order to manage arbitrary shape, permits treating any distributions of parameters as well as evaluating sensitivities to parameters of interest, without additionnal CPU time. The developed tools already meet the needs for the optimisation of photobioreactors which bring into play soft particles (micro-algae). From this work, some research ideas have emerged to explore the well-identified issue of large particles and large refractive indices from zero-variance principle.

**Keywords :** Monte Carlo method, integral formulation, radiative properties, complex-shaped particles, electromagnetic and light scattering.