

Annexe A

Le code MCRT en détails

A.1 Introduction

Dans cette appendice, nous décrivons le code de transfert radiatif que nous avons mis au point durant notre thèse. Comme précisé dans le Chapitre 8, le code MCRT résoud le problème du transfert de la radiation dans un milieu composé d'atomes/ions à deux niveaux soumis à un champ de vitesse donné en faisant appel à la technique de Monte Carlo. L'idée générale et les principes de base de cette méthode ayant été détaillés dans la Sect. 8.3, nous ne reviendrons pas sur ces points ici. Une première partie de cette annexe sera essentiellement dédiée à la description de la vie des photons, depuis leur émission, le repérage des zones de résonances le long de leur trajectoire et l'obtention de spectres et images à partir des simulations réalisées. Nous décrirons ensuite différentes améliorations apportées au code initial afin de rendre ce dernier plus performant et versatile. La dernière partie montrera comment l'approximation de Sobolev peut être facilement introduite dans le code MCRT.

A.2 monte Carlo et le transfert de la radiation

A.2.1 Emission d'un photon du continuum

Le lieu d'émission du photon sur la photosphère¹ de rayon R_{in} est choisi de façon aléatoire en supposant une émission isotrope sur l'entièreté de la

¹Nous appellerons photosphère la limite de la région dans laquelle les photons sont produits. Dans le cas qui nous intéresse ici, les quasars, cette région correspond à la région du disque d'accrétion, idéalisé ici par un sphère.

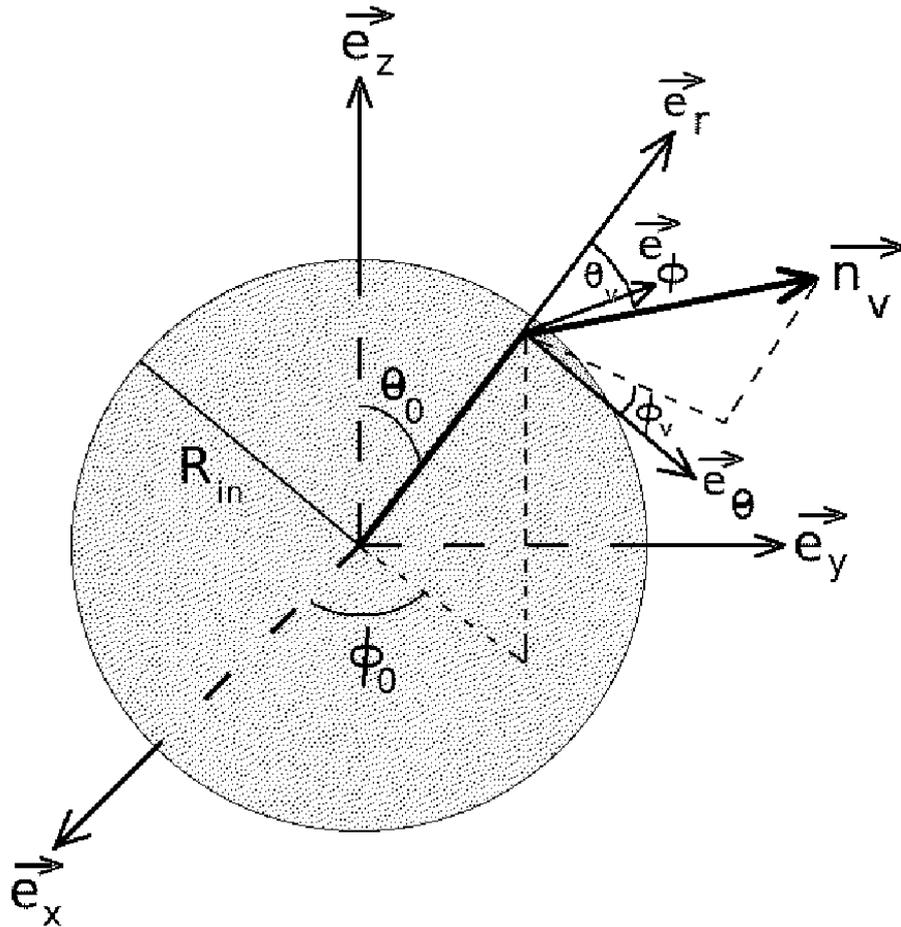


FIG. A.1 – Géométrie de l'émission d'un photon par la photosphère produisant le continuum (ici une sphère de rayon R_{in}). La position du point d'émission $(R_{in}, \theta_0, \phi_0)$ sur la photosphère ainsi que la direction de vol initial $\vec{n}_v(\theta_v, \phi_v)$ du photon créé sont déterminées en échantillonnant aléatoirement les fonctions de distribution correspondantes (voir texte).

surface (4π sr). Etant donné cette isotropie, la probabilité pour un photon d'être émis en un point $(R_{in}, \theta_0 \in \{0, \pi\}, \phi_0 \in \{0, 2\pi\})^2$ est donnée par l'Eq. (eqinver) :

$$P(\theta_0, \phi_0) = \frac{\int_0^{\phi_0} \int_0^{\theta_0} R_{in}^2 \sin \theta \, d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} R_{in}^2 \sin \theta \, d\theta d\phi} \quad (\text{A.1})$$

de laquelle on obtient par intégration sur θ et ϕ et inversion de la relation :

$$\phi_0 = 2\pi \xi \quad (\text{A.2})$$

$$\theta_0 = \text{acos}(1 - 2\xi') \quad (\text{A.3})$$

où ξ et ξ' sont deux nombres aléatoires différents de fonction de distribution uniforme dans l'intervalle $[0, 1]$. Afin d'alléger les notations, toute nouvelle occurrence du symbole ξ dans la suite du texte signifiera implicitement le tirage d'un tel nombre aléatoire. On obtient alors la position d'émission du photon exprimée dans la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$:

$$x_0 = R_{in} \sin \theta_0 \cos \phi_0 \quad (\text{A.4})$$

$$y_0 = R_{in} \sin \theta_0 \sin \phi_0 \quad (\text{A.5})$$

$$z_0 = R_{in} \cos \theta_0 \quad (\text{A.6})$$

La direction de propagation $\vec{n}_v = (n_{\theta_v}, n_{\phi_v}, n_{r_v})$ du photon est ensuite choisie de façon similaire, mais en forçant ce dernier à s'écarter de la photosphère considérée comme étant un absorbeur pur (i.e. d'épaisseur optique $\tau_\nu = \infty$). Pour cela, nous imposons que la direction de vol (θ_v, ϕ_v) du photon soit choisie dans la demi sphère externe à la photosphère en considérant les angles polaires permis $\theta_v \in \{0, \pi/2\}$:

$$P(\theta_v, \phi_v) = \frac{\int_0^{\phi_v} \int_0^{\theta_v} \sin \theta \, d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \sin \theta \, d\theta d\phi} \quad (\text{A.7})$$

nous obtenons par analogie dans la base mobile $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi)$:

$$\phi_v = 2\pi \xi \quad (\text{A.8})$$

$$\theta_v = \text{acos}(1 - \xi') \quad (\text{A.9})$$

et donc la direction de vol \vec{n}_v de composantes :

$$n_{\theta_v} = \sin \theta_v \cos \phi_v \quad (\text{A.10})$$

$$n_{\phi_v} = \sin \theta_v \sin \phi_v \quad (\text{A.11})$$

$$n_{r_v} = \cos \theta_v \quad (\text{A.12})$$

²Etant donné la géométrie des vents considérés, nous utiliserons tout au long du texte les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) et, lors du calcul des trajectoires des photons, les coordonnées cartésiennes (x, y, z) rapportées à la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ attachée au centre du vent.

ou encore, si l'on se place dans la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$:

$$n_{x_v} = n_{\theta_v} \cos \theta_0 \cos \phi_0 - n_{\phi_v} \sin \phi_0 + n_{r_v} \sin \theta_0 \cos \phi_0 \quad (\text{A.13})$$

$$n_{y_v} = n_{\theta_v} \cos \theta_0 \sin \phi_0 + n_{\phi_v} \cos \phi_0 + n_{r_v} \sin \theta_0 \sin \phi_0 \quad (\text{A.14})$$

$$n_{z_v} = -n_{\theta_v} \sin \theta_0 + n_{r_v} \cos \theta_0 \quad (\text{A.15})$$

On associe finalement à chaque photon émis une fréquence en échantillonnant le continuum situé autour de la raie de fréquence ν_0 considérée. Etant donné la largeur de la raie considérée, le continuum est supposé plat en fréquence sous cette dernière : $L_\nu(\nu) = 1$. Ainsi si l'on appelle v_{max} la vitesse maximale dans le vent et v_{turb} la vitesse d'agitation résultant de la turbulence dans le vent, alors la fréquence initiale ν_i du photon pour un observateur au repos sera choisie dans l'intervalle $[\nu_0 - \Delta_\nu, \nu_0 + \Delta_\nu]$ par l'intermédiaire d'un nouveau nombre aléatoire ξ tel que :

$$\xi = \frac{\int_{\nu_0 - \Delta_\nu}^{\nu_i} dy}{\int_{\nu_0 - \Delta_\nu}^{\nu_0 + \Delta_\nu} dy} \quad (\text{A.16})$$

ce qui nous permet d'obtenir après intégration et inversion de la relation :

$$\nu_i = \nu_0 + \Delta_\nu - 2 \xi \Delta_\nu \quad (\text{A.17})$$

où $\Delta_\nu = (v_{max} + v_{turb}) \nu_0 / c$ est la demi largeur du profil calculé.

A.2.2 Zones de résonances

Le photon de fréquence ν_i émis ci-dessus va alors entamer son voyage dans le vent. Etant donné l'existence d'un champ de vitesse accéléré $\vec{v} = \vec{v}(r, \theta, \phi)$ défini en tout point ce dernier, la fréquence locale ν_l du photon perçue dans le référentiel en mouvement avec les atomes du vent est constamment modifiée par effet Doppler. La relation liant les fréquences ν_i et ν_l s'exprime de cette façon :

$$\nu_l = \nu_i \left(1 - \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_v}{c} \right) \quad (\text{A.18})$$

Lorsque cette fréquence perçue dans le référentiel mobile s'approche de la fréquence ν_0 du centre de la raie, l'enveloppe devient de moins en moins transparente au photon. On dit qu'il y a résonance avec le milieu environnant et le photon peut alors être absorbé par un ion du milieu. La position et l'étendue de ces zones de résonance sont déterminées par la différence entre la fréquence ν_l perçue dans le référentiel en mouvement et la fréquence ν_0 du centre de la raie qui doit être inférieure à la demi largeur du profil d'absorption $\Delta\nu_{abs}$ dans ce même référentiel. Etant donné l'existence de turbulence

macroscopique dans le vent traduisant les mouvements aléatoires des ions, nous choisissons de représenter le profil d'absorption par un profil gaussien normalisé³ (voir Fig. A.2) :

$$\Phi_A(\nu_l - \nu_0, \sigma_{turb}) = \frac{1}{H} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_{turb}} \exp\left(-\frac{(\nu_l - \nu_0)^2}{\sigma_{turb}^2}\right) + K \right\} \quad (\text{A.19})$$

où $\sigma_{turb} = \Delta\nu_{turb}/(2\sqrt{2\ln 2})$ est tel que $\Delta\nu_{turb} = 2\nu_0(v_{turb}/c)$ soit la largeur à mi-hauteur du profil d'absorption, v_{turb} représentant le module de la vitesse de turbulence totale⁴. Cependant, contrairement à une gaussienne, le profil d'absorption n'a pas une largeur infinie, mais est défini sur un intervalle $\nu_0 \pm \Delta\nu_{abs}$. Les constantes H et K sont introduites afin d'imposer la continuité du profil en $\pm\Delta\nu_{abs}$ et de normaliser le profil d'absorption à l'unité sur la largeur d'absorption choisie⁵. Le profil d'absorption utilisé est maintenant clairement défini :

$$\Phi_A(\nu - \nu_0) = \begin{cases} \Phi_A(\nu - \nu_0, \sigma_{turb}) & \text{si } |\nu - \nu_0| \leq |\Delta\nu_{abs}| \\ 0 & \text{en dehors de cet intervalle} \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Les zones de résonances seront dès lors identifiées le long de la trajectoire du photon comme étant les régions où ν_l remplit la condition :

$$\nu_0 - \Delta\nu_{abs} < \nu_l < \nu_0 + \Delta\nu_{abs} \quad (\text{A.21})$$

La majeure partie du temps de calcul utilisé par le programme MCRT est consacrée à l'identification de la position et de l'étendue de ces régions de résonances. En pratique, on échantillonne la trajectoire du photon à l'aide d'un pas variable $\delta s_i(r, \theta, \phi)$ dont la valeur est fonction de la direction de propagation du photon et de sa position :

$$x_i = x_{i-1} + \delta s_i(r, \theta, \phi) n_{x_v} \quad (\text{A.22})$$

$$y_i = y_{i-1} + \delta s_i(r, \theta, \phi) n_{y_v} \quad (\text{A.23})$$

$$z_i = z_{i-1} + \delta s_i(r, \theta, \phi) n_{z_v} \quad (\text{A.24})$$

En chaque point de la trajectoire (x_i, y_i, z_i) ainsi défini, nous calculons la

³Ce type de profil est généralement préféré aux profils de Voigt lorsque une composante turbulente est considérée dans le vent (e.g. Bernes [1979], Natta & Beckwith [1986], Knigge et al. [1995]).

⁴Ici nous prenons $v_{turb} = v_T + v_M$, où v_T rend compte de l'élargissement thermique du profil de raie et v_M de l'élargissement lié à la turbulence macroscopique dans le vent, cette dernière étant supposée isotrope en première approximation.

⁵Nous utilisons $|\Delta\nu_{abs}| = n \Delta\nu_{turb}/2$. Des tests réalisés quant à l'effet du choix de n sur les profils de raies simulés montrent que les profils produits ne changent plus à partir de $n = 2$. Nous choisissons d'utiliser la valeur $n = 2$ dans la suite de nos travaux.

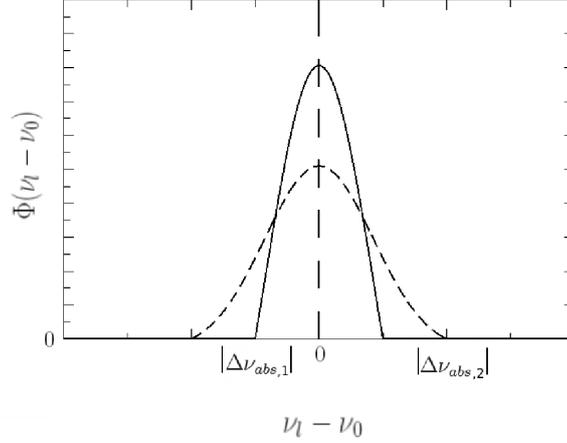


FIG. A.2 – Illustration du profil d’absorption $\Phi_A(\nu_l - \nu_0)$ défini dans le référentiel se déplaçant avec les atomes du vent (référentiel comobile). Le profil est présenté avec deux normalisations différentes : la courbe continue représente le profil d’absorption normalisé pour lequel on a choisi $\Delta\nu_{abs,1} = 1 \Delta\nu_{turb}/2$ alors que la courbe en trait interrompu présente le cas $\Delta\nu_{abs,2} = 2 \Delta\nu_{turb}/2$. Dans la suite nous utiliserons ce dernier profil normalisé comme profil d’absorption (voir texte).

fréquence locale ν_l perçue dans le référentiel se déplaçant avec les atomes du vent. Lorsque le photon entre (ou sort) d’une zone de résonance, la position précise de la transition est identifiée par un algorithme de bisection (routine “rtbis”, Press et al. [1992]). Les n zones de résonance identifiées le long de son parcours dans le vent sont finalement archivées dans un vecteur $reso(n,i)$ tel que :

- $reso(n,1)$ est l’abscisse ds_1 du début de la n ème zone de résonance,
- $reso(n,2)$ est l’abscisse ds_2 de la fin de la n ème zone de résonance.

L’étape la plus critique revient bien entendu à estimer le pas $\delta s_i(r, \theta, \phi)$ à appliquer à chaque étape de la progression du photon dans le vent. En effet, utiliser un pas constant trop petit reviendrait à une perte de temps lors du calcul dans les régions du vent où le gradient de vitesse est faible, alors qu’utiliser un pas trop grand ne permettrait pas d’identifier correctement toutes les zones de résonances présentes. L’idée retenue dans le programme MCRT consiste à réaliser un changement de variable dans lequel le pas est calculé à partir de la loi de vitesse $v(r, \theta, \phi)$ utilisée. En effet, dans l’espace des vitesses projetées le long de la trajectoire, la zone de résonance est simplement une gaussienne de largeur à mi-hauteur $2 v_{turb}$ (cf. Eq. (A.19)). Afin de correctement échantillonner cette gaussienne, nous avons besoin au minimum de trois points à mi-hauteur. Ainsi un échantillonnage du profil avec un pas en vitesse $\delta v = 2 v_{turb}/3$ devrait suffire. Connaissant v et $v + \delta v$,

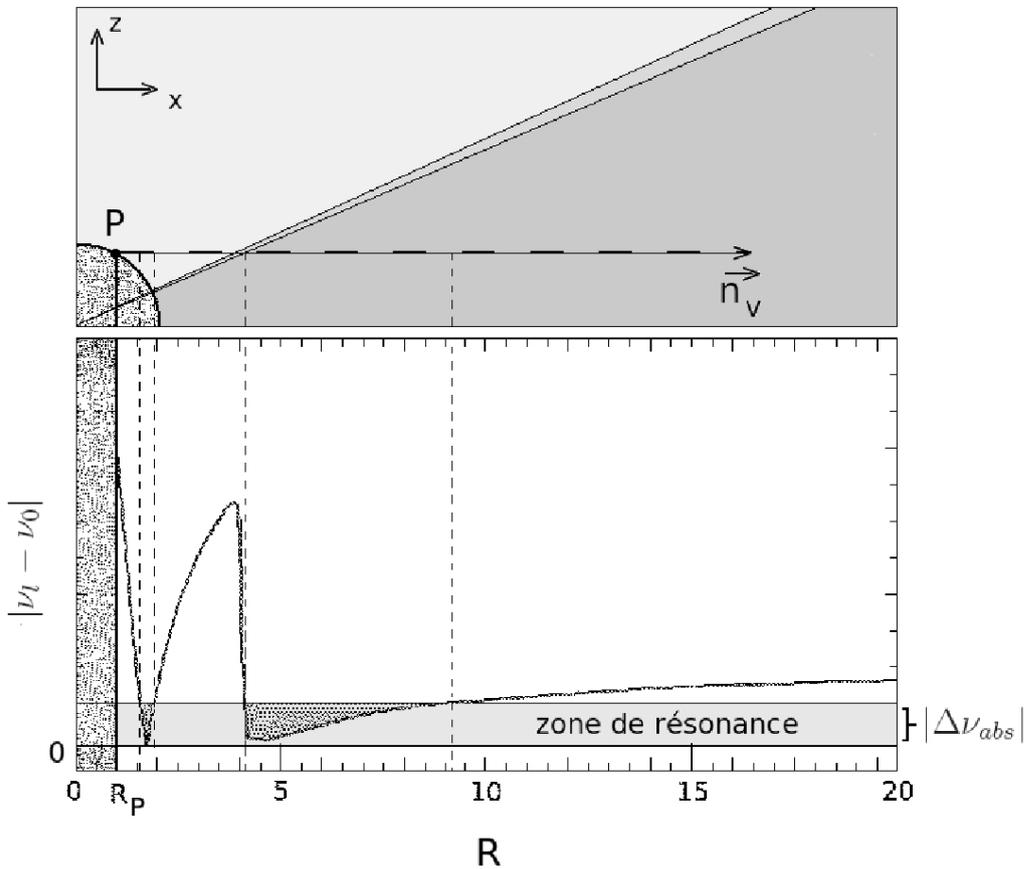


FIG. A.3 – Illustration graphique de la procédure utilisée lors de l'identification des zones de résonance le long de la trajectoire d'un photon de fréquence initiale ν_i se déplaçant selon la direction \vec{n}_v dans un vent à deux composantes pour lequel la vitesse terminale du vent équatorial vaut la moitié de la vitesse terminale du vent polaire. La figure supérieure montre une coupe du vent dans le plan (x, z) sur laquelle on peut noter que le photon passe de la composante polaire du vent à la composante équatoriale en $R \sim 4$. La figure inférieure montre que, dans le repère se déplaçant localement avec le fluide, les zones de résonance sont simplement repérées par le fait que $|\nu_l - \nu_0| < |\Delta\nu_{abs}|$. Deux zones de résonance sont identifiées dans le cas illustré.

on peut inverser la loi de vitesse (si celle-ci n'est pas trop complexe) afin de trouver les points s_i et $s_i + \delta s_i$ correspondant et donc tirer le pas maximal δs_i à appliquer dans la direction où le gradient de vitesse est le plus fort (qui n'est pas nécessairement la direction de vol du photon). Dans un cas plus général où il n'est pas possible d'inverser analytiquement la loi de vitesse, l'approximation de Taylor de la loi de vitesse limitée au premier ordre nous donne :

$$v(s_i + \delta s_i) = v(s_i) + \delta s_i \frac{dv}{ds} + (O^2) \quad (\text{A.25})$$

où dv/ds est le gradient de vitesse le long de la direction de propagation du photon. Comme nous connaissons le pas en vitesse $|v(s_i + \delta s_i) - v(s_i)| = \delta v$ à utiliser afin d'échantillonner correctement la trajectoire et que le gradient dv/ds peut être évalué numériquement, nous pouvons facilement extraire le pas δs_i à appliquer :

$$\delta s_i = \delta v \left(\frac{dv}{ds} \right)^{-1} \quad (\text{A.26})$$

Les deux techniques donnent des résultats identiques. Toutefois le temps de calcul supplémentaire impliqué par l'évaluation numérique du gradient de vitesse dv/ds nous porte à préférer l'utilisation de la technique d'inversion lorsque ceci est possible.

A.2.3 Diffusion des photons

Une fois les n zones de résonance repérées le long de la trajectoire du photon, nous pouvons estimer l'épaisseur optique totale rencontrée par ce dernier lors de son voyage dans le vent :

$$\tau_{tot, \nu_i} = \sum_{i=1}^n \int_{reso(i,1)}^{reso(i,2)} \kappa_{\nu_0} \Phi_A(\nu_l - \nu_0, \sigma_{turb}) ds \quad (\text{A.27})$$

où κ_{ν_0} est le coefficient d'absorption total de la transition considérée (cf. Sect. 8.1.1) et qui dans le cas d'une raie de résonance peut se simplifier comme suit :

$$\kappa_{\nu_0} = \sigma n(r, \theta, \phi) = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{osc} n(r, \theta, \phi) \quad (\text{A.28})$$

où f_{osc} est la force d'oscillateur de la transition, e et m_e la charge et la masse de l'électron et $n(r, \theta, \phi)$ est la densité de l'ion considéré.

Si l'on considère le problème du transfert radiatif sous un point de vue probabiliste, alors un photon de fréquence ν_i traversant une zone d'épaisseur optique totale τ_{tot, ν_i} a une probabilité $p(\tau) = e^{-\tau_{tot, \nu_i}}$ de pouvoir s'échapper du vent sans subir de diffusion et $p'(\tau) = 1 - p(\tau)$ d'être absorbé par un des

atomes du milieu. On utilise cet aspect probabiliste du transfert radiatif dans les simulations de Monte-Carlo afin de déterminer aléatoirement l'épaisseur optique τ_{MC} à laquelle le photon pourrait interagir. Ce τ_{MC} est une fois de plus dérivé à l'aide de la méthode de transformation (cf. Sect. 8.3) appliqué à la distribution cumulative correspondante :

$$\xi = \frac{\int_0^{\tau_{MC}} e^{-\tau} d\tau}{\int_0^{\infty} e^{-\tau} d\tau}. \quad (\text{A.29})$$

Après intégration et inversion de l'équation, nous trouvons la relation fondamentale suivante :

$$\tau_{MC} = -\ln(1 - \xi) \quad (\text{A.30})$$

définissant l'épaisseur optique que le photon de fréquence ν_i pourrait traverser sans subir de diffusion. S'il existe un point s le long de la trajectoire du photon tel que l'épaisseur optique intégrée $\tau(s)$ jusqu'en ce point soit égale à τ_{MC} alors le photon sera absorbé par l'ion : on dit qu'il y a interaction. Aussinon, il s'échappera du vent et sera collecté par un/pusieurs détecteur(s) virtuel(s) (cf. Sect. A.2.4).

Dans le cas des raies de résonance, lorsqu'il y a interaction, nous considérons que le photon absorbé est instantanément réémis dans une direction aléatoire $\vec{n}_{v'}$ et avec une nouvelle fréquence ν_d en faisant l'hypothèse d'une redistribution complète en fréquence et en direction (cf. Sect. 8.1.1). La nouvelle direction de propagation du photon est déterminée de façon semblable à celle décrite en Sect. A.2.1, hormis le fait que cette fois l'émission est isotrope sur l'ensemble de la sphère de surface $4\pi sr$. Nous avons donc :

$$\phi_{v'} = 2\pi\xi \quad (\text{A.31})$$

$$\theta_{v'} = a\cos(1 - 2\xi') \quad (\text{A.32})$$

et donc

$$n_{\theta_{v'}} = \sin \theta_{v'} \cos \phi_{v'} \quad (\text{A.33})$$

$$n_{\phi_{v'}} = \sin \theta_{v'} \sin \phi_{v'} \quad (\text{A.34})$$

$$n_{r_{v'}} = \cos \theta_{v'} \quad (\text{A.35})$$

Cette direction peut aisément s'exprimer dans la base cartésienne $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ (cf. Sect. A.2.1). La fréquence du photon diffusé s'exprime alors comme suit dans un référentiel au repos par rapport au repère fixe $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$:

$$\nu_d = \nu_{emi} \left(1 + \frac{\vec{v}(r_s, \theta_s, \phi_s) \cdot \vec{n}_{v'}}{c} \right) \quad (\text{A.36})$$

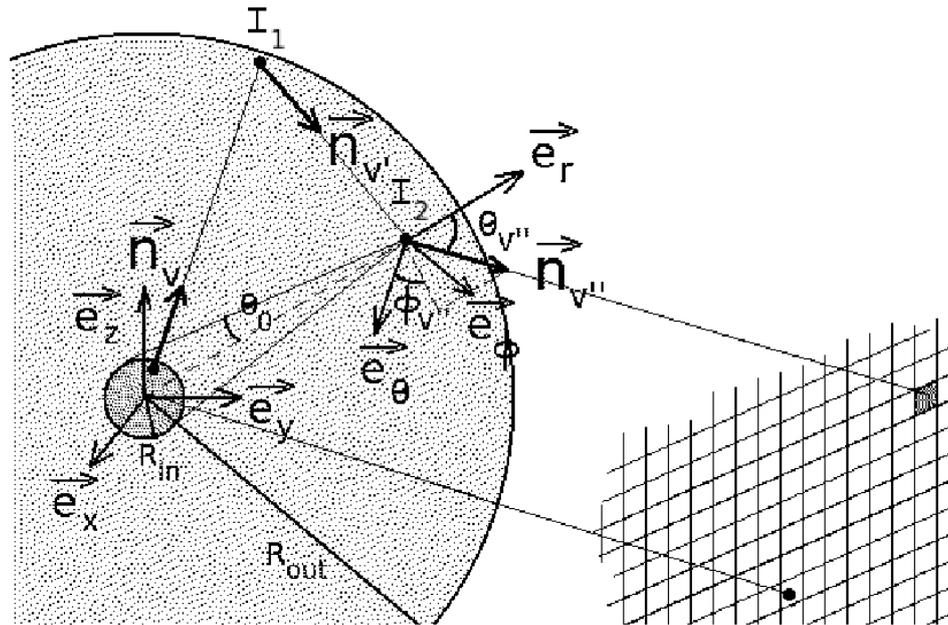


FIG. A.4 – Illustration de la trajectoire d'un photon dans un vent de géométrie sphérique. A chaque diffusion (au nombre de 2 dans ce cas ci : I_1 et I_2), le photon est réémis dans une direction aléatoire. Une fois sorti de l'atmosphère, ce dernier est enregistré par différents détecteurs virtuels (ici représenté par un pseudo capteur CCD). Après chaque interaction, la direction de ré-émission θ_v'' dans la base mobile $(\vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi, \vec{e}_r)$ est comparée au demi angle θ_0 sous tendu par la photosphère au point d'interaction afin de déterminer si le photon pourrait être réabsorbé par cette dernière.

où (r_s, θ_s, ϕ_s) est la position d'interaction en coordonnées sphériques et $\nu_{emi} = \nu_0 + \Delta\nu_{emi}$ est la fréquence à laquelle le photon est réémis dans le référentiel comobile. La déviation en fréquence $\Delta\nu_{emi}$ du photon réémis par rapport à la fréquence centrale de la raie ν_0 est déterminée en faisant appel une fois de plus à la méthode de transformation :

$$\xi = \frac{\int_{-\Delta\nu_{abs}}^{\Delta\nu_{emi}} \Phi_E(\nu_l - \nu_0) d\nu}{\int_{-\Delta\nu_{abs}}^{\Delta\nu_{abs}} \Phi_E(\nu_l - \nu_0) d\nu} \quad (\text{A.37})$$

dans laquelle, étant donné l'hypothèse de redistribution complète en fréquence dans le profil de raie, le profil d'émission $\Phi_E(\nu_l - \nu_0)$ est identique au profil d'absorption $\Phi_A(\nu_l - \nu_0)$ défini par l'Eq. (A.20).

Une fois ces paramètres définis, le nombre de diffusions réalisées par le photon est actualisé et l'on choisit une nouvelle épaisseur optique $\tau_{MC} = -\ln(1 - \xi)$ correspondant à un point d'interaction auquel le photon pourra éventuellement de nouveau interagir. Etant donné sa nouvelle direction de vol $\vec{n}_{v'}$, on estime ensuite si le photon risque ou non de retourner vers la photosphère et d'y être absorbé. Pour cela, on compare l'angle de réémission $\theta_{v'}$ dans le repère mobile $(\vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi, \vec{e}_r)$ au demi angle θ_0 sous-tendu par la photosphère à la position d'interaction (r_s, θ_s, ϕ_s) :

$$\theta_0 = \text{acos} \left(\sqrt{1 - \frac{R_{in}^2}{r_s^2}} \right) \quad (\text{A.38})$$

Ainsi si $\theta_{v'} > \pi - \theta_0$ le photon risque d'être absorbé par la photosphère, sauf s'il est diffusé dans une autre direction avant d'atteindre cette dernière (voir Fig. A.4).

On recommence alors la boucle à partir de la Sect. A.2.2 en recherchant les différentes zones de résonance se situant le long de la trajectoire du photon diffusé et l'identification du point d'interaction, et ainsi de suite, jusqu'à ce que le photon parvienne à s'échapper du vent en R_{out} ou soit absorbé par la photosphère en R_{in} .

A.2.4 Création de spectres et d'images

Tous les photons parvenant à s'échapper du vent sont collectés par deux types de détecteurs répartis uniformément sur une sphère de rayon $R_s \gg R_{out}$ de telle sorte que les photons sont collectés dans un plan se confondant localement avec l'enveloppe de la sphère. Le premier type de détecteur est un spectrographe séparant les photons provenant d'une même direction (θ_f, ϕ_f) selon leur fréquence en des bins de taille $d\nu$ afin de produire des spectres

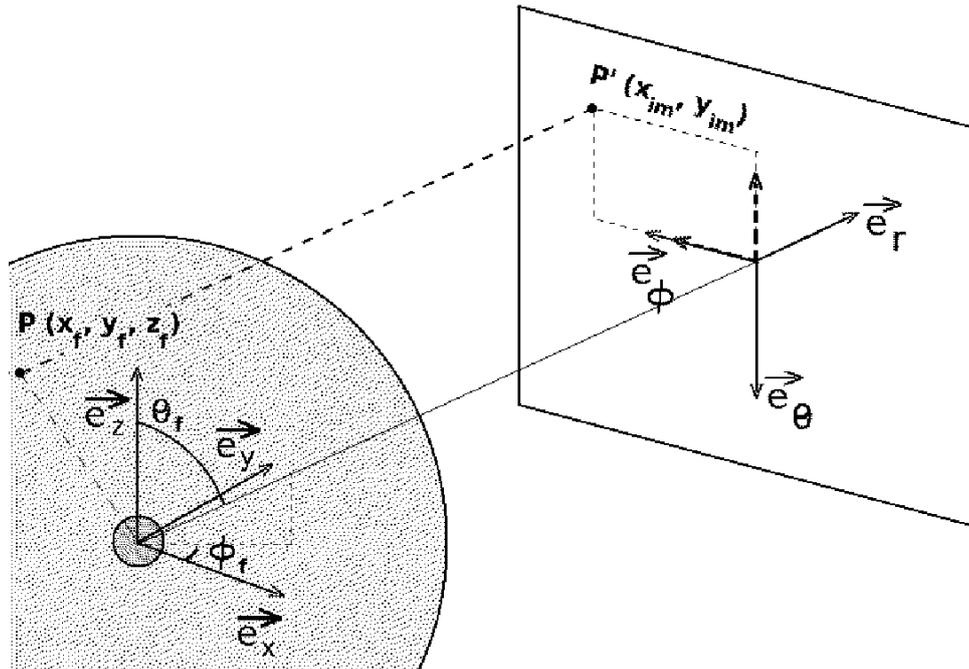


FIG. A.5 – Les photons parvenant à s'échapper du vent sont collectés selon leur direction de sortie (θ_f, ϕ_f) afin de former notamment des images. Cette figure illustre la projection réalisée afin d'obtenir les coordonnées (x_{im}, y_{im}) correspondant à un photon dont le dernier site d'interaction est situé au point $P(x_f, y_f, z_f)$. Notons que la coordonnée x_{im} est comptée négativement le long de l'axe \vec{e}_θ et la coordonnée y_{im} est comptée positivement le long de l'axe \vec{e}_ϕ .

$f(\nu, \theta_f, \phi_f)$. La taille des bins est choisie de façon à obtenir un spectre présentant un échantillonnage correct.

Le deuxième type de détecteur est également un spectrographe, mais permettant de produire une image 2D $I(\nu, x_{im}, y_{im}, \theta_f, \phi_f)$ de résolution choisie ($n_{pix} * n_{pix}$) pour chaque élément de résolution spectrale $d\nu$, et donnant l'intensité spectrale émise en chaque point du vent, intégrée sur la ligne de visée. Notons ici que la connaissance de la position d'émission/de dernière interaction des photons suivis par MCRT nous permet également de décomposer les spectres/images produits en les parties en absorption et émission du profil modélisé.

Afin de réaliser ces images, les photons sortant du vent sont projetés sur un plan positionné perpendiculairement à leur direction de sortie (θ_f, ϕ_f) et groupés en pixels dont la taille dépend de la résolution choisie n_{pix} . Les coordonnées (x_{im}, y_{im}) de chaque photon contribuant à l'élaboration de l'image (voir Fig. A.5) sont simplement calculées en déterminant les coordonnées (x_θ, y_ϕ, z_r) dans la base mobile $(\vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi, \vec{e}_r)$ du dernier point d'interaction⁶ P du photon :

$$P = x_f \vec{e}_x + y_f \vec{e}_y + z_f \vec{e}_z = x_\theta \vec{e}_\theta + y_\phi \vec{e}_\phi + z_r \vec{e}_r \quad (\text{A.39})$$

où (x_f, y_f, z_f) sont les coordonnées cartésiennes du point P . Or les vecteurs de base $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ peuvent facilement être exprimés en fonction des vecteurs de base $(\vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi, \vec{e}_r)$ de la base mobile :

$$\vec{e}_x = \sin \theta_f \cos \phi_f \vec{e}_r + \cos \theta_f \cos \phi_f \vec{e}_\theta - \sin \phi_f \vec{e}_\phi \quad (\text{A.40})$$

$$\vec{e}_y = \sin \theta_f \sin \phi_f \vec{e}_r + \cos \theta_f \sin \phi_f \vec{e}_\theta + \cos \phi_f \vec{e}_\phi \quad (\text{A.41})$$

$$\vec{e}_z = \cos \theta_f \vec{e}_r - \sin \theta_f \vec{e}_\theta \quad (\text{A.42})$$

En poussant ces relations dans le second membre de l'Eq. (A.39) et en identifiant les coefficients membre à membre, nous trouvons les coordonnées de la position du photon projeté dans le plan d'observation :

$$x_{im} = z_f \sin \theta_f - y_f \cos \theta_f \sin \phi_f - x_f \cos \theta_f \cos \phi_f \quad (\text{A.43})$$

$$y_{im} = y_f \cos \phi_f - x_f \sin \phi_f \quad (\text{A.44})$$

Pour des raisons d'ordre pratique, nous posons arbitrairement $x_{im} = -x_\theta$ et $y_{im} = y_\phi$. Ainsi lorsque $\theta_f = 0 = \phi_f$, x_{im} et y_{im} sont comptés positivement le long des axes \vec{e}_z et \vec{e}_y respectivement.

Pour les vents considérés dans notre étude, nous pouvons réduire le nombre de détecteurs nécessaires en utilisant les symétries des systèmes modélisés.

⁶Où la coordonnée du point d'émission si le photon n'a pas interagi au moins une fois avec les atomes du vent.

En effet, pour un vent en expansion sphérique, chaque direction d'observation (θ_f, ϕ_f) du vent doit conduire à l'observation du même flux sortant, vu la symétrie du vent selon les angles (θ, ϕ) . Ainsi les angles θ_f et ϕ_f de l'équation fournissant la position du photon sur l'image peuvent être remplacés par la direction de vol finale du photon et nous n'avons donc besoin que de grouper les photons selon leur fréquence lors de la production des spectres et des images. Pour un vent considérant une composante équatoriale sous forme d'un disque, il est également clair que l'observation des propriétés spectrales du vent est indépendante de l'angle ϕ , de sorte qu'il ne reste plus qu'à grouper les photons selon leur fréquence et leur angle polaire θ_f .

A.2.5 Opacité totale de l'enveloppe

Similairement à Beckwith & Natta [1987] nous normalisons la loi définissant la densité dans le vent à l'aide d'un paramètre n_0 :

$$n(r, \theta, \phi) = n_0 f(r, \theta, \phi) \quad (\text{A.45})$$

où $f(r, \theta, \phi)$ est une fonction décrivant non seulement la distribution de densité de l'atome considéré mais dépendant également de la fraction $\Xi(r)$ d'atomes dans l'état d'ionisation considéré. Cette normalisation se fait au moyen de ce que l'on appelle l'opacité radiale totale de l'enveloppe le long de l'axe polaire $\tau_{tot}(\nu_i)$ et que l'on définit comme suit :

$$\tau_{tot}(\nu_i) = \int_{R_{in}}^{R_{out}} \sigma n(r, 0, 0) \Phi_A(\nu_l - \nu_0, \sigma_{turb}) dr, \quad (\text{A.46})$$

expression dans laquelle les termes intervenants ont déjà été décrits dans les sections précédentes. Etant donné les lois de vitesse et de densité utilisées, cette opacité radiale totale dépend de la fréquence initiale ν_i du photon émis par la photosphère : généralement, les photons de fréquence initiale $\nu_i \sim \nu_0$ proches du centre de la raie ν_0 feront face à une épaisseur optique plus large que les photons émis dans les ailes du profil Φ_A . Pour cette raison on normalise plutôt la loi de densité en utilisant l'opacité radiale totale intégrée sur les fréquences :

$$\tau_{tot_E} = \int_{-\Delta\nu}^{\Delta\nu} \tau_{tot}(\nu_i) d\nu_i. \quad (\text{A.47})$$

Ainsi, en imposant une opacité radiale totale intégrée sur les fréquences τ_{tot_E} , nous pouvons estimer la densité d'ion n_0 correspondante en $r = R_{in}$. L'intérêt de cette quantité τ_{tot_E} moyennée sur les fréquences réside dans le fait qu'elle permet de donner une indication quant au degré de saturation du profil d'absorption. Ainsi, ce dernier sera généralement saturé dans les régions proches

du centre de la raie pour des valeurs $\tau_{tot_E} \gg 1$ ce qui permet de faire un lien avec l'expérience commune du faisceau de lumière traversant un gaz optiquement épais (cf. Sect. 8.1.1).

A.3 Amélioration du code MCRT

Le programme MCRT a subi au cours de son élaboration plusieurs raffinements afin d'améliorer ses performances de calcul et son domaine d'applicabilité. Dans un premier temps nous décrivons les deux évolutions principales consistant en l'implémentation d'une routine de "First Forced Scattering" et d'une routine permettant de rendre compte d'une émission intrinsèque au vent. Dans un second temps, nous montrons comment il est aisé de tenir compte de l'effet produit par un doublet de résonance dans MCRT.

A.3.1 First Forced Scattering (FFS)

Un des buts du programme MCRT est de fournir une image bidimensionnelle $I(\nu, x_{im}, y_{im}, \theta_f, \phi_f)$ de l'intensité spectrale émise en chaque point du vent, en projection, pour chaque élément de résolution spectrale $d\nu$ et chaque direction d'observation (θ_f, ϕ_f) du système afin d'étudier les modifications induites par un effet de microlentille sur les profils de raies. Le bruit présent dans les résultats des simulations de Monte-Carlo répond à une statistique de type Poissonienne (comptage de photons), de sorte que si l'on souhaite obtenir un rapport signal sur bruit (S/N) suffisant dans les images produites, un grand nombre de simulations est requise. Comme nous l'avons vu en Sect. A.2.4 les symétries du vent permettent de réduire grandement le nombre de photons nécessaires lors du calcul. Ainsi pour un vent de symétrie sphérique les photons seront collectés indépendamment de leur direction de vol final, chaque photon émis participant à l'élaboration du spectre et des images du vent. Cependant, dans les régions optiquement minces de l'enveloppe, seule une faible partie des photons émis par le continuum à la fréquence appropriée⁷ peut statistiquement être diffusée au minimum une fois, la majeure partie des photons s'échappant directement du vent, résultant en des images de faible S/N dans les régions les moins opaques à la radiation.

Une solution proposée afin de pallier à ce problème consiste en l'utilisation de la technique du "First Forced Scattering", dans laquelle on ne simule plus le déplacement d'un seul photon à la fois, mais bien celui d'un paquet de photons aux propriétés (direction, fréquence) identiques (e.a. Cashwell &

⁷C'est-à-dire des photons pour lesquels au minimum une zone de résonance a été repérée le long de la trajectoire.

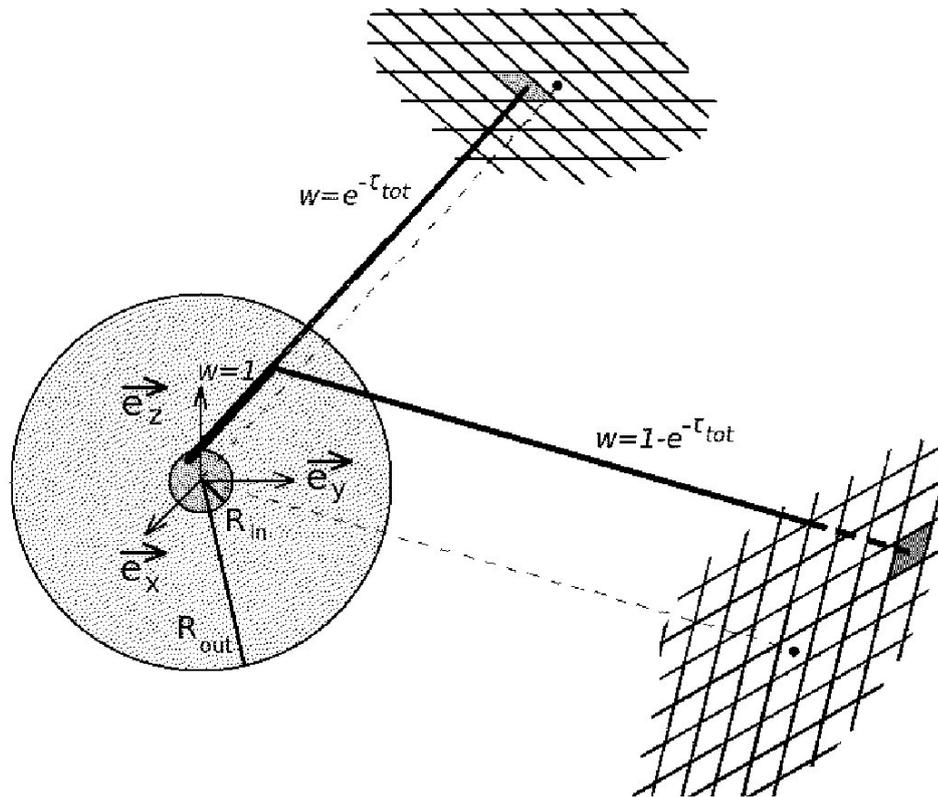


FIG. A.6 – Lorsque le vent est optiquement mince à certaines fréquences, seule une faible fraction des photons émis par le continuum interagissent avec ce dernier, produisant des images de faible S/N dans les régions incriminées. Une solution afin de pallier à ce problème consiste à forcer les photons à interagir avec les ions du vent (voir texte).

Everett [1959], Mattila et al. [1970], Witt [1977]). L'idée à la base de cette technique est relativement simple : afin d'augmenter le nombre d'interaction des photons de fréquence appropriée dans les régions de faible opacité, il suffit de forcer les photons pour lesquels $\tau_{tot} > 0$ (voir Sect. A.2.3) à interagir au moins une fois avec les ions du vent avant de s'échapper de ce dernier. Pour rappel, selon la vision probabiliste du transfert radiatif, un photon de fréquence ν_i traversant une épaisseur optique τ_{tot} a une probabilité $p(\tau) = e^{-\tau_{tot}}$ de pouvoir s'échapper du vent sans subir de diffusion et $p'(\tau) = 1 - e^{-\tau_{tot}}$ d'être absorbé par un des atomes du milieu. Considérons maintenant un paquet constitué de photons identiques confronté à une opacité τ_{tot} . D'un point de vue probabiliste, seule une fraction $w = e^{-\tau_{tot}}$ de ce paquet s'échappera du vent selon la direction de vol initiale et contribuera directement à l'élaboration de l'image. Le reste du paquet de photons, de poids $w' = 1 - w = 1 - e^{-\tau_{tot}}$, étant quant à lui contraint d'interagir avec le vent. Nous pouvons identifier cette position d'interaction par le fait qu'elle est caractérisée par la condition $\tau_{MC} \leq \tau_{tot}$. A cette fin nous devons modifier l'Eq. (A.29) définissant la profondeur optique τ_{MC} en restreignant le domaine des profondeurs optiques possibles à $\{0, \tau_{tot}\}$:

$$\xi = \frac{\int_0^{\tau_{MC}} e^{-\tau} d\tau}{\int_0^{\tau_{tot}} e^{-\tau} d\tau}. \quad (\text{A.48})$$

En intégrant cette équation, nous obtenons :

$$\xi = \frac{1 - e^{-\tau_{MC}}}{1 - e^{-\tau_{tot}}}. \quad (\text{A.49})$$

que nous pouvons facilement inverser afin de trouver l'équation :

$$\tau_{MC} = -\ln(1 - \xi (1 - e^{-\tau_{tot}})). \quad (\text{A.50})$$

Cette relation nous permet, par inversion de la relation $\tau(s) = \int \tau(\nu_i) ds$, de déterminer le point d'interaction s le long de la trajectoire du paquet de photons où aura lieu l'interaction. Une fois diffusé selon une nouvelle direction de vol (et donc avec une nouvelle fréquence ν'), cette fraction w' du paquet initial de photons pourra éventuellement interagir un nouvelle fois avec le vent ou bien s'échapper de celui-ci et contribuer à l'élaboration des images et du spectre final. Ce traitement statistique particulier (utilisation de la pondération) permet donc d'augmenter la participation d'un paquet de photons initial à la construction des images, augmentant par là même le S/N dans les régions du vent les plus transparentes à la radiation tout en réduisant le nombre de photons à utiliser par rapport au cas où l'on ne considère pas de diffusion forcée.

A.3.2 Emission dans le vent

Comme nous l'avons rappelé dans la Sect. 8.1.1, différents processus physiques (collisions, émission spontanée, ...) peuvent être responsables de la création de photons au sein du vent lorsque son opacité devient importante (Knigge et al. [1997], Harries [2000]). Afin de rendre compte de cette émissivité intrinsèque du vent (i.e. le second membre de l'Eq. (8.10)), nous avons implémenté une routine permettant de produire une fraction ϵ de photons directement dans le vent. Ainsi dans un premier temps, nous déterminons si le photon considéré est émis par le continuum ou dans le vent en tirant un nombre aléatoire ξ que l'on compare à la valeur de ϵ : si $\xi > \epsilon$, le photon est émis par le continuum (cf. Sect. A.2.1), par contre si $\xi \leq \epsilon$, le photon est émis dans le vent. Dans ce dernier cas, on détermine premièrement la position d'émission du photon à l'aide de nombres aléatoires en échantillonnant la loi d'émissivité du gaz $\zeta(r, \theta, \phi)$. Ceci nous permet de déterminer la position d'émission (θ_0, ϕ_0) :

$$p(r_0, \theta_0, \phi_0) = \frac{\int_0^{\phi_0} \int_0^{\theta_0} \int_{R_{in}}^{r_0} \zeta(r, \theta, \phi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_{R_{in}}^{R_{out}} \zeta(r, \theta, \phi) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi}. \quad (\text{A.51})$$

En pratique la loi d'émissivité $\zeta(r, \theta, \phi)$ peut dépendre d'un grand nombre de facteurs tels la loi de distribution de la température dans le vent, de l'opacité, de l'ionisation, ... Il est donc difficile d'en donner une forme analytique correcte. Cependant, nous pouvons supposer en bonne approximation que l'émissivité est proportionnelle à la densité $n(r, \theta, \phi)$ de l'ion considéré. Afin de tenir compte d'éventuels autres facteurs, nous prenons une loi d'émissivité de forme générale de type :

$$\zeta(r, \theta, \phi) = n(r, \theta, \phi) \left(\frac{R_{in}}{r} \right)^n \quad (\text{A.52})$$

où la valeur de n est choisie arbitrairement afin de plus ou moins concentrer l'émission dans les régions centrales du vent.

Une fois la position d'émission (r_0, θ_0, ϕ_0) spécifiée, la direction de vol \vec{n}_v du photon est définie de façon analogue à celle présentée en Sect. A.2.1 en considérant une émission isotrope sur la sphère unité. La fréquence initiale ν_i du photon émis dans le système en mouvement avec l'ion est choisie en échantillonnant le profil d'absorption de l'ion (Eq. (A.37)). La fréquence ν_p du photon perçue dans le repère de l'observateur (i.e. au repos par rapport à la base $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$) est alors calculée de la façon suivante :

$$\nu_p = \nu_i \left(1 + \frac{\vec{v}(r_0, \theta_0, \phi_0) \cdot \vec{n}_v}{c} \right) \quad (\text{A.53})$$

où $\vec{v}(r_0, \theta_0, \phi_0)$ est la vitesse du vent au point d'émission considéré. Connaissant la position et la direction d'émission du photon, on estime finalement dans quelle mesure ce dernier pourrait être ou non absorbé par la photosphère s'il n'interagit pas avant de l'atteindre (cf. calcul de θ_0 en Sect. A.2.3).

Notons finalement qu'afin d'améliorer le S/N dans les résultats obtenus dans les cas où le paramètre ϵ prend des valeurs extrêmes (par exemple $\epsilon = 10^{-5}$ ou encore $\epsilon = 0.999$), nous avons adjoint à cette routine un système de pondération statistique pour chaque photon émis (Harries [2000]). Ainsi, lorsque $\epsilon \neq 0$ ou 1 (i.e. tous les photons sont émis par le continuum ou dans le vent) on oblige systématiquement une certaine fraction a (resp. $1 - a$) du nombre total de photons n_{sim} à être émis dans le vent (resp. par le continuum). Afin de ne pas introduire de biais dû à cette contrainte, nous corrigeons le poids statistique de chaque paquet de photons émis par le continuum par un facteur $(1 - \epsilon)/(1 - a)$ et le poids des paquets émis dans le vent par un facteur ϵ/a . Cette technique permet d'augmenter le S/N des contributions des deux zones d'émissions considérées.

A.3.3 Doublet de résonance

Tenir compte de l'effet produit par les doublets de résonance est aisé dans les codes de transfert radiatifs de type Monte Carlo tel MCRT. Ainsi il suffit de localiser successivement les zones de résonances pour chacune des composantes du doublet en suivant la méthode présentée dans la Sect. A.2.2 et en remplaçant tour à tour la fréquence centrale de la raie ν_0 par les fréquences $\nu_{1 \rightarrow 2}$ et $\nu_{1 \rightarrow 3}$ correspondant aux composantes du doublet. Une fois les vecteurs $reso_{1 \rightarrow 2}(n_1, i)$ et $reso_{1 \rightarrow 3}(n_2, i)$ construits, il suffit d'intégrer l'épaisseur optique sur ces régions afin d'identifier la position d'interaction de coordonnées (r_s, θ_s, ϕ_s) . Le photon est ensuite réémis selon le profil d'émission de la raie (en supposant que les deux composantes du doublet ont un profil d'émission identique) avec une fréquence ν_d (cf. Sect. A.2.3) telle que :

$$\nu_d = \nu_{emi} \left(1 + \frac{\vec{v}(r_s, \theta_s, \phi_s) \cdot \vec{n}_v'}{c} \right) \quad (\text{A.54})$$

où $\nu_{emi} = \nu_c + \Delta\nu_{emi}$ est la fréquence à laquelle est réémis le photon dans le référentiel comobile et $\nu_c = \nu_{1 \rightarrow 2}$ ou $\nu_{1 \rightarrow 3}$ selon la transition possible à la position d'interaction considérée. Notons que la présence de turbulence dans l'enveloppe peut élargir le profil d'absorption de chaque transition jusqu'à ce que ces derniers se confondent en partie. Ainsi lorsque les deux composantes du doublet participent à l'opacité en un point donné du vent, nous déterminons de façon aléatoire la transition responsable de l'absorption du

photon. Ce type de choix est également opéré lors de l'émission d'un photon par l'atmosphère.

A.4 L'approximation de Sobolev et le code MCRT

Le traitement exact des multiples interactions se produisant dans les régions optiquement épaisses peut être très long. En effet étant donné l'hypothèse de redistribution complète en fréquence d'après laquelle le profil d'émission est identique à celui d'absorption, le photon diffusé possède une fréquence telle que l'opacité locale perçue par ce dernier est non nulle (i.e. le photon est réémis au sein de la zone de résonance). Il pourra dès lors être de nouveau absorbé et réémis dans son voisinage proche, cette situation pouvant se produire un grand nombre de fois avant que le photon n'acquière finalement un déplacement en fréquence suffisant pour s'échapper de la région de résonance (e.a. Rybicki & Hummer [1968]). L'existence de ces interactions multiples se traduit dans la pratique par une augmentation très nette du temps de simulation d'un profil lorsque l'on considère le cas de vents optiquement épais ($\tau_{tot_E} \sim 10$).

Une solution bien connue afin de pallier à ce problème de multiples interactions consiste en l'utilisation de l'approximation de Sobolev, cette dernière réduisant les zones de résonance spatialement étendues en des points (cf. Sect. 8.1.2). Etant donné les gradients de vitesses existants dans les régions centrales des vents considérés, cette approximation devrait permettre à tout le moins de fournir une estimation de la forme générale du profil de raie à moindre coût du point de vue du temps de calcul nécessaire. C'est pourquoi nous avons également réalisé une version du programme MCRT faisant appel à cette approximation.

Les points de résonances sont identifiés par la condition $\nu_l = \nu_0$, ν_l étant la fréquence locale du photon (cf. Eq. (A.18)). La recherche de la position de ces points le long de la trajectoire du photon se fait d'une façon similaire à celle présentée dans la Sect. A.2.2 en utilisant le même type de pas variable lors de l'échantillonnage de la trajectoire. Une fois le(s) point(s) de résonance (r_R, θ_R, ϕ_R) repéré(s), l'opacité de Sobolev y est évaluée :

$$\tau_S = \frac{\pi e^2}{mc} n(r_R, \theta_R, \phi_R) f_{osc} \frac{\lambda_0}{|dv_s/ds|} \quad (\text{A.55})$$

où $n(r_R, \theta_R, \phi_R)$ est la densité de l'ion considéré à la position de résonance et dv_s/ds , calculé de façon numérique, est le gradient de vitesse le long de la

direction de vol du photon. Similairement au cas turbulent, nous décidons si il y a interaction ou non en ce point de résonance en comparant la valeur de l'opacité τ_S à l'opacité τ_{MC} . S'il y a interaction (i.e. $\tau_S > \tau_{MC}$), alors le photon est directement réémis selon une nouvelle direction $\vec{n}_{v'}$ choisie aléatoirement sur la sphère unité. La fréquence ν_d du photon diffusé telle que perçue dans le repère de l'observateur au repos par rapport au vent est simplement donnée par :

$$\nu_d = \nu_0 \left(1 + \frac{\vec{v}(r_R, \theta_R, \phi_R) \cdot \vec{n}_{v'}}{c} \right) \quad (\text{A.56})$$

où $\vec{v}(r_R, \theta_R, \phi_R)$ est la vitesse du vent au point d'interaction considéré. Dans le cas contraire, le photon est déplacé au point de résonance suivant et un traitement similaire est appliqué jusqu'à ce que ce dernier s'échappe du vent. Notons qu'en pratique, les photons pour lesquels un point de résonance a été repéré le long de la trajectoire sont forcés à interagir avec les ions du vent afin d'augmenter le S/N des images produites dans les régions les plus transparentes à la radiation (cf. Sect. A.3.1).

Une des différences majeures entre le traitement exact du problème du transfert radiatif et celui utilisant l'approximation de Sobolev provient du fait que ce dernier ne considère pas les interactions multiples se produisant dans les zones de résonances (e.a. Knigge et al. [1995], Boroson et al.[2001], Bjorkman et al.[2002]) produisant des profils de raies dont la composante en émission est plus piquée. En effet, une fois diffusé, le photon peut s'échapper directement du voisinage du point de résonance, ne subissant dès lors plus le processus de diffusion multiples aplatisant la partie en émission.

Notons cependant que différents auteurs ont tenté de prendre en compte de façon très approximative l'effet des diffusions multiples dans leurs simulations de Sobolev en faisant appel à un formalisme simple utilisant les probabilités de fuite (e.a. Long & Knigge [2002], Knigge 2008 communication personnelle). Dans nos simulations, nous préférons utiliser uniquement l'approximation de Sobolev plutôt que de faire appel à des techniques de correction dont la signification physique n'est pas nécessairement claire (en effet la zone de résonance peut avoir une forme relativement complexe, et donc donner lieu à des probabilités de fuite différentes selon la direction de vol). Notons cependant que nous utiliserons cette technique uniquement dans le but d'obtenir une estimation des paramètres du vent à utiliser, étant donné le moindre coût en temps de calcul. Les paramètres dérivés lors de l'ajustement de profils seront quant à eux obtenus en utilisant la méthode d'intégration exacte implémentée dans MCRT.

