

---

# Modélisation Stochastique dans le Milieu Interstellaire

---

Côme Tabary  
Septembre 2024

*Cette introduction s'appuie sur un stage de Master 2 réalisé au Laboratoire d'Etude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique à l'Observatoire de Meudon au Printemps 2023, sous la direction d'Emeric Bron et Frank Le Petit.*



## Sommaire

<b>Préambule</b>	<b>1</b>
<b>1 Contexte astrophysique : le Milieu Interstellaire</b>	<b>1</b>
1.1 Le berceau des étoiles . . . . .	1
1.2 Les grains de poussière et leurs manteaux de glace . . . . .	2
<b>2 Le modèle stochastique</b>	<b>2</b>
2.1 Importance des fluctuations . . . . .	2
2.2 <i>L'Equation Maitresse</i> . . . . .	3
<b>3 Analyse mathématique du modèle</b>	<b>3</b>
3.1 En dimension finie: le théorème de Perron-Frobenius . . . . .	4
3.2 En dimension infinie: le théorème de Krein-Rutman . . . . .	4
<b>4 Deux exemples d'applications</b>	<b>6</b>
4.1 Un grain à proximité d'une étoile: un succès de l'approche stochastique . . . . .	6
4.2 Les rayons cosmiques dans les nuages froids: un aperçu de futures difficultés . . . . .	8
<b>5 Conclusion et perspectives</b>	<b>9</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>10</b>

## Préambule

Cette introduction à la modélisation stochastique a pour but de présenter une approche relativement récente de modélisation des grains de poussière présents dans le Milieu Interstellaire (approche initiée dans les années 2000 par Biham et. al. [1] et Draine et Li [2], poursuivie entre autres par Cuppen et. al. [3], et extensivement développée par Bron et. al. [4, 5]). Du côté de l'astrophysique, cette modélisation fondée sur un formalisme stochastique permet de prendre en compte les fluctuations de température des grains, qui jouent un rôle crucial dans la chimie interstellaire. Du côté mathématique, au delà des processus stochastiques, la résolution du modèle fait appel à de l'analyse fonctionnelle et de la théorie spectrale en dimension infinie, ainsi qu'à des méthodes numériques itératives. Si le cas linéaire est bien compris, l'apparition de non-linéarité dans les modèles plus poussés semble inévitable et appelle à de nouveaux développements théoriques comme numériques.

La question astrophysique est présentée en Section 1. La Section 2 introduit le processus stochastique au coeur du modèle, ainsi que le caractère bien posé de l'équation centrale obtenue, dite *Equation Maitresse*. La Section 3 présente deux illustrations de l'approche stochastique, la première relativement bien balisée et la seconde suscitant de nouvelles questions mathématiques.

## 1. Contexte astrophysique : le Milieu Interstellaire

### 1.1. Le berceau des étoiles

Loin d'être vide, l'espace entre les étoiles foisonne de processus physiques et chimiques complexes, dont l'étude est au coeur de la compréhension de la formation des étoiles et des systèmes planétaires. Le Milieu Interstellaire (MIS) est constitué de gaz (en majorité de l'hydrogène) et de grains solides de poussière de l'ordre du nanomètre. Les étoiles déjà présentes chauffent leurs alentours, portant le gaz à des températures de plusieurs centaines de degré Kelvin. Plus l'on s'éloigne de ces régions chaudes, plus le gaz se refroidit et se condense. Au plus profond des nuages de gaz, la température chute jusqu'à une dizaine de Kelvin et autour des grains se forment des manteaux (voir Figure 1). Le gaz finit par être suffisamment froid et dense pour s'effondrer sur lui-même jusqu'au déclenchement de réactions de fusion nucléaire en son sein : une étoile est née. A son tour, elle chauffera le milieu interstellaire environnant, jusqu'à épuisement de son gaz. A sa mort, elle enrichira le MIS des éléments lourds formés par fusion au cours de sa vie, qui formeront une nouvelle génération d'étoiles: c'est le cycle du Milieu Interstellaire.

Bien que les grandes lignes de ce cycle soient maintenant bien comprises, le détail des processus physico-chimiques en jeu et leur variété font que le MIS résiste encore à une modélisation précise et en accord avec les observations, notamment celles du tout récent télescope James Webb. Parmi les éléments encore mal compris figure le rôle des grains de poussière, qui seront les objets principaux des modèles présentés ici. Pour un panorama du milieu interstellaire et de ses autres composants, nous référons au très riche livre de Draine [6].



Figure 1: Une région type du milieu interstellaire, ses grains de poussière et leurs manteaux. La température décroît plus l'on s'éloigne de l'étoile.

## 1.2. Les grains de poussière et leurs manteaux de glace

Les atomes et molécules constituant le gaz interstellaire peuvent rencontrer un grain et s'accrocher temporairement à sa surface. Cela place les grains de poussière au coeur de la chimie du milieu interstellaire : c'est à leur surface plutôt que dans le gaz ambiant que se produisent la plupart des rencontres entre particules du gaz et donc des réactions chimiques [7] notamment celles des composants organiques, potentielles briques élémentaires de la vie [8]. De plus, si suffisamment de particules recouvrent le grain, des manteaux épais de glace se forment qui agglomèrent les grains entre eux (à droite sur la Figure 1), jusqu'à des tailles macroscopiques et la formation de planètes [9, 10]. Comprendre la quantité de particules venues du gaz sur les grains est donc essentiel. Or cette population à la surface des grains est hautement dépendante de la température de ce dernier: sur un grain trop chaud le manteau s'évapore.

Il est ainsi crucial de comprendre précisément la température des grains de poussière. Cette température est essentiellement sujette à deux mécanismes: le chauffage est dû à l'absorption ponctuelle de photons ultraviolets des étoiles voisines, le refroidissement à l'émission continue de photons beaucoup moins énergétiques dans l'infrarouge. C'est la subtilité du dialogue entre ces processus apparemment simples qui motive l'ensemble des travaux présentés dans cette introduction.

## 2. Le modèle stochastique

### 2.1. Importance des fluctuations

Comme décrit plus haut, la température d'un grain augmente lorsque ce dernier est frappé par un photon émis par les étoiles voisines, et le grain refroidit en émettant lui-même des photons. Les modèles classiques de physico-chimie du MIS [11, 12] font en général l'hypothèse d'un équilibre entre ces processus d'émission et d'absorption, appelé *équilibre radiatif*. La température du grain est fixée à une valeur d'équilibre  $T_{eq}$ , déterminée par l'égalité des puissances moyennes (énergies par unité de temps):

$$\langle P_{recu} \rangle = \langle P_{emis} \rangle (T_{g,eq}) \propto T_{eq}^4.$$

Cependant, il est connu depuis presque un demi-siècle [13] que les plus petits grains n'ont pas une température constante: un seul photon ultraviolet (UV) suffit à élever leur température de plusieurs dizaines de Kelvin, provoquant un pic de température puis une période de refroidissement (Figure 2). Or, à la surface d'un grain chaud, les particules sont plus agitées et donc plus propices à s'évaporer. Ce processus, appelé *désorption thermique*, dépend exponentiellement de la température: le taux de désorption (en  $s^{-1}$ ) pour une particule sur le grain est

$$k_{th} \propto \exp(-T_{bind}/T)$$

où  $T$  est la température du grain et  $T_{bind}$  est une température typique (correspondant à un potentiel d'énergie à franchir pour s'échapper). Encore une fois, les modèles classiques fixent  $T = T_{eq}$  dans cette formule, et calculent la population sur le grain  $N_{eq}$  qui égalise le nombre de particules arrivant par seconde (un taux fixe) et le nombre quittant le grain ( $N_{eq}k_{th}$ ). Pourtant, à chaque fois qu'un photon frappe un grain, un pic de température s'ensuit, entraînant à son tour un pic de désorption: le manteau de particules autour du grain se vide d'un coup bien plus vite. Ainsi, il est nécessaire de prendre en compte les grandes variations de la température du grain au fil du temps, et fixer sa

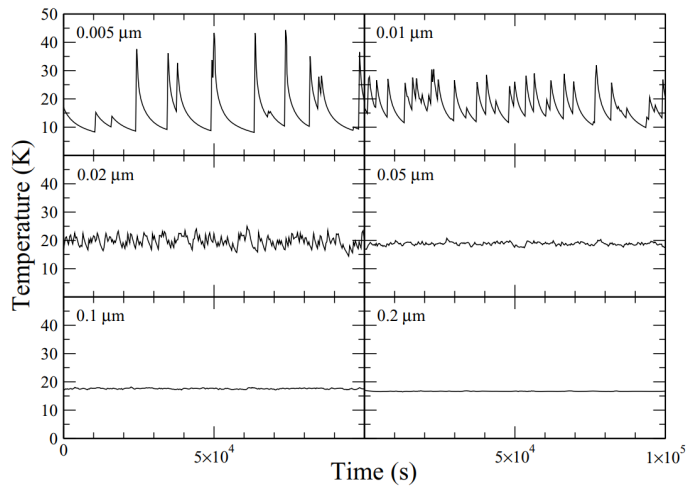


Figure 2: Température de grains de différentes tailles en fonction du temps (simulation, figure adaptée de [3]).

température et sa population à des constantes  $T_{eq}$  et  $N_{eq}$  est injustifié. Le cadre mathématique offrant une réponse adaptée est de remplacer ces constantes par des *processus stochastiques*.

## 2.2. L'Equation Maitresse

Nous présentons ici le processus stochastique décrivant la température d'un grain  $T$  et sa population de surface  $N$ . On considère l'espace d'états  $\mathcal{X} = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{N}$ , et on note  $dx = dT \otimes dCard$  la mesure naturelle sur  $\mathcal{X}$ , produit des mesures de Lebesgue et de comptage. Considérons que le couple température-population  $(X_t)_{t \in \mathbb{R}_+} = (T_t, N_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$  est un processus stochastique à temps continu sur l'espace  $\mathcal{X}$ . C'est un processus *de sauts* décrit par un taux de transition  $(x, y) \in \mathcal{X}^2 \mapsto p_{x \rightarrow y}$  (en probabilité par seconde). Ce taux exprime intuitivement que la probabilité que  $X_{t+dt} = y$  sachant que  $X_t = x$  est au premier ordre  $p_{x \rightarrow y} dt + o(dt)$ .

L'évolution de  $X$  est la suivante: Si à un temps  $t$  le système est dans l'état  $X_t = x$ , donnons-nous  $\Delta t$  une variable exponentielle de paramètre  $\int p_{x \rightarrow y} dy$ . Alors  $t + \Delta t$  est le moment du prochain saut:  $X_s$  est constant sur  $[t, t + \Delta t[$ . On tire ensuite au hasard le nouvel état, selon la loi  $\frac{p_{x \rightarrow y}}{\int p_{x \rightarrow z} dz} dy$ .

Si  $f_t(x)$  est la densité de la loi de  $X_t$  par rapport à  $dx$ ,  $f_t$  obéit à l'équation d'évolution suivante<sup>1</sup>:

$$\partial_t f_t(x) = \int_{\mathcal{X}} f_t(y) p_{y \rightarrow x} dy - f_t(x) \int_{\mathcal{X}} p_{x \rightarrow y} dy. \quad (1)$$

Nous faisons l'hypothèse que le milieu interstellaire est à l'*équilibre statistique*: la probabilité de trouver un grain dans un état  $x \in \mathcal{X}$  ne dépend pas du temps  $t$ . On recherche donc une solution  $f$  indépendante du temps de

$$f(x) \int_{\mathcal{X}} p_{x \rightarrow y} dy = \int_{\mathcal{X}} f(y) p_{y \rightarrow x} dy. \quad (2)$$

L'équation (2) est appelée *Equation Maitresse*. Physiquement, elle exprime qu'à l'équilibre statistique, la proportion de grains quittant l'état  $x$  vers un état  $y$  quelconque est égale à la proportion de grains arrivant à l'état  $x$  depuis n'importe quel état  $y$ .

## 3. Analyse mathématique du modèle

On s'intéresse dans cette section à l'existence et unicité d'une distribution stationnaire (plus souvent appelée *mesure invariante* par les mathématicien.ne.s) c'est à dire d'une solution  $f$  positive d'intégrale 1 de (2). La distribution  $f$  est un vecteur propre de valeur propre 1 pour l'opérateur intégral  $\mathcal{L}$  défini par

$$\mathcal{L}[f](x) = \int_{\mathcal{X}} w(x, y) f(y) dy. \quad (3)$$

dont le noyau est dans notre cas donné par

$$w(x, y) := \frac{p_{y \rightarrow x}}{\int_{\mathcal{X}} p_{x \rightarrow z} dz}. \quad (4)$$

La question de l'existence d'un vecteur propre pour un opérateur est plus délicate en dimension infinie. De plus, nous cherchons plus qu'un quelconque vecteur propre: il faut que  $f$  soit positive et d'intégrale 1 pour représenter une densité de probabilité. Si cette seconde condition n'est qu'une question de normalisation, la positivité est déjà moins évidente à obtenir. Commençons par présenter le cas analogue mais plus simple de la dimension finie, qui permet d'évacuer une partie des difficultés la question.

<sup>1</sup>Si la loi de  $X_t$  n'admet pas de densité, ou que cette dernière n'est pas régulière, on peut écrire (1) en formulation faible.

### 3.1. En dimension finie: le théorème de Perron-Frobenius

Pour un espace d'état  $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$  fini<sup>2</sup>, une probabilité  $\mu$  sur  $\mathcal{X}$  peut être représentée par un vecteur colonnes de  $n$  composantes  $f_i = \mu(\{x_i\})$  de somme 1. L'opérateur  $\mathcal{L}$  se réécrit comme une multiplication matricielle:

$$(\mathcal{L}[f])_i = \sum_{j=1}^n w_{ij} f_j \quad (5)$$

On suppose que pour tout  $i, j$ , le coefficient  $w_{ij} > 0$ : n'oublions pas que  $w_{ij}$  est essentiellement la probabilité de passer de l'état  $j$  à  $i$ , donc pour sûr  $w_{ij} \geq 0$ . La stricte positivité est une condition suffisante pour assurer que tous les états sont visités<sup>3</sup>. Dans ce cas, le théorème de Perron-Frobenius offre une réponse positive à notre question. Rappelons que le rayon spectral  $\rho(W)$  d'une matrice  $W$  est défini comme la plus grande valeur absolue de ses valeurs propres:  $\rho(W) := \max\{|\lambda|, \lambda \in \text{Sp}(W)\}$ . Le théorème est le suivant:

**Théorème 1 (Perron 1907 [14], Frobenius 1912 [15])** Soit  $W = (w_{ij})$  une matrice  $n \times n$  à coefficients strictement positifs.

- Son rayon spectral  $\rho(W)$  est une valeur propre simple, qui admet un vecteur propre à coefficients strictement positifs : il existe  $f = (f_j)$  tel que  $Wf = \rho(W)f$ ,  $f$  est unique à constante multiplicative près, constante que l'on peut choisir telle que  $f_j > 0$ .
- Il n'existe pas d'autre vecteur propre à coefficients positifs que les multiples de  $f$ .
- Les autres valeurs propres  $\lambda$  de  $W$  vérifient  $|\lambda| < \rho(W)$ .

En ajoutant la condition de normalisation  $\sum_j f_j = 1$ , le théorème de Perron Frobenius conclut à l'existence et unicité de  $f$  pourvu que l'on puisse montrer  $\rho(W) = 1$ . On procède pour cela par dualité: la version discrète de (4) est

$$w_{ij} = \frac{p_{j \rightarrow i}}{\sum_k p_{i \rightarrow k}}$$

On remarque alors que si l'on pose  $g_i = \sum_k p_{i \rightarrow k}$  on a:

$$\sum_{i=1}^n g_i w_{ij} = \sum_{i=1}^n \left( \sum_k p_{i \rightarrow k} \right) \frac{p_{j \rightarrow i}}{\sum_k p_{i \rightarrow k}} = \sum_{i=1}^n p_{j \rightarrow i} = g_j.$$

En d'autres termes,  $g$  est un vecteur propre à coefficients positifs pour  $W^T$ , pour la valeur propre 1. Le second point du théorème appliqué à  $W^T$  assure que  $\rho(W^T) = 1$ . Comme  $\rho(W^T) = \rho(W)$ , on a donc montré  $\rho(W) = 1$ . Le premier point du théorème appliqué à  $W$  assure existence et unicité d'une probabilité  $f$  solution de l'Equation Maitresse (2) dans ce cas simplifié de la dimension finie.

### 3.2. En dimension infinie: le théorème de Krein-Rutman

En dimension infinie, plusieurs difficultés apparaissent: premièrement, le spectre d'un opérateur n'est plus constitué uniquement de valeurs propres:  $\mathcal{L} - \lambda Id$  peut être non-inversible mais avoir un noyau trivial. Aussi, il faut choisir soigneusement l'espace sur lequel on définit l'opérateur  $\mathcal{L}$  via l'équation (3), ce qui dépend de la régularité disponible sur  $w$ . Pour exposer ces différences sans se noyer dans la technicité, nous nous contenterons de traiter le cas d'un intervalle borné  $\mathcal{X} = [0, T_{max}]$ . Physiquement, cela correspond à ne s'intéresser qu'à la température du grain interstellaire, en supposant qu'elle n'a aucune chance de dépasser  $T_{max}$ . Comme le grain peut recevoir et émettre des photons de toute énergie (voir Section 4 pour plus de détails), on a un continuum de transitions possibles depuis une température  $y$  vers une température  $x$ . Le taux de transition  $p_{y \rightarrow x}$  est donc

<sup>2</sup>Muni de la tribu de ses parties.

<sup>3</sup>Dans le cas contraire, il peut y avoir plusieurs distributions stationnaires si plusieurs jeux d'états ne communiquent pas: considérer le cas extrême  $w_{ij} = \delta_{ij}$ , où aucune transition n'a lieu et toutes les probabilités  $f$  vérifient  $\mathcal{L}[f] = f$

supposé une fonction continue strictement positive sur  $[0, T_{max}] \times [0, T_{max}]$ . La preuve que nous proposons ci-dessous est celle décrite succinctement par Bron et. al. dans [4].

L'analogie du théorème de Perron-Frobenius en dimension quelconque est le théorème de Krein-Rutman. Ce qui joue l'analogie de la positivité des coefficients est la notion de cône d'un espace de Banach, dont on rappelle la définition.

**Définition 1 (Cône et cône solide)** Soit  $E$  un espace de Banach. On appelle cône une partie  $K$  de  $E$  convexe, fermée, telle que  $\lambda K \subset K$  pour tout  $\lambda \geq 0$  et que  $K \cap (-K) = \{0\}$ . Un cône est dit solide s'il est d'intérieur non vide.

Un cône permet de munir l'espace  $E$  d'une relation d'ordre partielle par  $u \geq v \iff u - v \in K$  pour  $u, v \in E$ . Par exemple, pour reformuler le paragraphe précédent en ces nouveaux termes, l'espace était dans ce cas  $E = \mathbb{R}^n$ , et le cône était  $K = \{f \in E \mid f_j \geq 0, 1 \leq j \leq n\}$ , solide car d'intérieur  $\{f \in E \mid f_j > 0, 1 \leq j \leq n\} \neq \emptyset$ .

Rappelons également qu'en dimension infinie, le spectre de  $\mathcal{L}$  est défini comme

$$\text{Sp}(\mathcal{L}) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \mathcal{L} - \lambda Id \text{ n'a pas d'inverse continu}\},$$

et le rayon spectral reste  $\rho(\mathcal{L}) = \sup\{|\lambda|, \lambda \in \text{Sp}(\mathcal{L})\}$ . Le théorème de Krein-Rutman suppose l'opérateur compact<sup>4</sup>, hypothèse qui élimine les pathologies décrites plus haut: le spectre est alors entièrement constitué de valeurs propres (à l'exception de 0), similairement à la dimension finie (pour plus de détails sur les opérateurs compacts, voir [16], Chapitre VI). Nous pouvons maintenant formuler le:

**Théorème 2 (Krein-Rutman ([17], Théorème 1.2))** Soit  $E$  un espace de Banach et  $K$  un cône solide de  $E$ . Soit  $\mathcal{L} : E \rightarrow E$  un opérateur linéaire compact tel que  $\mathcal{L}(K \setminus \{0\}) \subset K^\circ$  (où  $K^\circ$  est l'intérieur de  $K$ ). Alors:

- Le rayon spectral  $\rho(\mathcal{L})$  de  $\mathcal{L}$  est une valeur propre simple, qui admet un vecteur propre  $f \in K^\circ$ .
- Il n'existe pas d'autre vecteur propre dans  $K$  que les multiples de  $f$ .
- Tout  $\lambda \in \text{Sp}(\mathcal{L}) \setminus \{\rho(\mathcal{L})\}$  vérifie  $|\lambda| < \rho(\mathcal{L})$ .

Nous avons envie de considérer pour cône  $K$  les fonctions positives d'un certain espace. Pour que le cône soit solide, il faut une topologie suffisamment fine pour éloigner les fonctions strictement positives des autres fonctions. Cela élimine les normes  $L^p$  pour  $p$  fini et invite à considérer une norme uniforme. On prend donc  $E = C([0, T_{max}])$ , pour lequel  $K = \{f \in E \mid f \geq 0\}$  est solide, d'intérieur  $K^\circ = \{f \in E \mid f > 0\}$ . L'opérateur  $\mathcal{L}$  est alors compact grâce à la continuité de  $w$  et au Théorème d'Arzelà-Ascoli. La stricte positivité de  $w$  assure quant à elle  $\mathcal{L}(K \setminus \{0\}) \subset K^\circ$ . La preuve présentée au paragraphe précédent s'adapte en remplaçant la transposée par l'opérateur adjoint de  $\mathcal{L}$ <sup>5</sup>. Elle assure ainsi l'existence et unicité d'une solution continue positive à l'Equation Maitresse.

A ce stade, le ou la mathématicien.ne peut s'estimer relativement satisfait.e mais le ou la physicien.ne en nous ne demande qu'une chose: à quoi ressemble la distribution  $f$ ? La section suivante présente deux applications concrètes du modèle.

**Remarque 1** Le caractère bien posé de l'Equation Maitresse sur des espaces d'états plus généraux peut rapidement devenir beaucoup plus technique, voir sortir du cadre du théorème de Krein-Rutman quand l'espace d'état n'est plus compact ou pour des noyaux  $w$  moins réguliers. Le théorème admet des généralisations permettant d'affaiblir l'hypothèse de compacité [18], ce qui pourrait être une piste -à notre connaissance non explorée- pour traiter les équations maitresses sur  $\mathcal{X} = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{N}$  (par exemple le modèle en 4.1 ci-dessous, très proche du problème mentionné dans [5], paragraphe 7.1.1).

<sup>4</sup>Cela signifie que l'image de la boule unité fermée de  $E$  par  $\mathcal{L}$  est compacte

<sup>5</sup>Le dual de  $E$  est l'espace des mesures signées sur  $[0, T_{max}]$ , ce qui demande une certaine précaution, que nous éclipsons ici.

## 4. Deux exemples d'applications

### 4.1. Un grain à proximité d'une étoile: un succès de l'approche stochastique

#### 4.1.1. Modélisation physique

Ce paragraphe est consacré à un premier exemple d'application où le formalisme stochastique est particulièrement fructueux et permet de révéler et corriger les limites des modèles classiques. Il s'agit d'une situation typique du milieu interstellaire où la poussière est éclairée par une étoile voisine.

Comme décrit en Section 1, un petit grain de poussière interstellaire est ponctuellement chauffé par des photons ultraviolets (UV) provenant des étoiles environnantes. Le grain se refroidit en émettant lui aussi des photons de plus basse énergie (typiquement infrarouge). Le grain capture à sa surface des particules du gaz interstellaire ambiant, qui forment autour de lui un manteau de glace plus ou moins épais selon la température.

Pour mettre en place le modèle fondé sur l'Equation Maitresse (2), il ne reste qu'à spécifier le taux de transition  $p_{x \rightarrow y}$ . On travaille sur l'espace d'états  $\mathcal{X} = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{N}$  représentant la température et la population de surface du grain  $(T, N) \in \mathcal{X}$ . Les transitions possibles entre états sont les suivantes:

- Un *chauffage* de  $T$  vers  $T' > T$ , à population fixée  $N$ , correspondant à l'absorption d'un photon. Toutes les valeurs de  $T' > T$  sont possibles avec des taux différents  $R(T, T')$  qui dépendent de la fréquence à laquelle un photon de la bonne énergie est susceptible de frapper le grain.
- Un *refroidissement* de  $T$  vers  $T' < T$ , à  $N$  fixé, correspondant à l'émission d'un photon, à un taux  $R(T, T')$ .
- L'*adsorption* (i.e. le collage) d'une particule sur le grain, amenant la population  $N$  à  $N' = N + 1$ , sans changer la température  $T$ . Cela arrive à un taux fixe  $k_{ads}$ , qui est la fréquence moyenne à laquelle une particule du gaz ambiant s'accroche au grain.
- La *désorption* (i.e. l'évaporation) d'une particule amenant la population  $N$  à  $N' = N - 1$ , sans changer la température  $T$ . Cela arrive à un taux  $Nk_{des}(T) \propto N \exp(-T_{bind}/T)$ . Le facteur  $N$  apparaît car chaque particule a une probabilité  $\propto \exp(-T_{bind}/T)$  de désorber par seconde. Remarquons que c'est la désorption à elle seule qui couple la population à la température.

On aboutit alors à l'expression suivante pour le taux de transition de  $x = (T, N)$  vers  $y = (T', N')$ :

$$p_{x \rightarrow y} = R(T, T')\delta_{N=N'} + k_{ads}\delta_{N'=N+1}\delta_{T=T'} + k_{des}(T)\delta_{N'=N-1}\delta_{T=T'}.$$

A ce stade, nous pourrions tenter une résolution numérique de l'Equation Maitresse (2) en y injectant l'expression de  $p_{x \rightarrow y}$ . Néanmoins, comme le problème est bidimensionnel, sa résolution numérique est rapidement coûteuse. On peut se réduire à deux problèmes unidimensionnels, en acceptant de perdre un peu d'information, en considérant des marginales.

Premièrement, comme les transitions de température ne dépendent pas de la population, on peut écrire une Equation Maitresse sur la distribution  $f$  de température uniquement:

$$f(T) \int_{\mathbb{R}_+} R(T, T') dT' = \int_{\mathbb{R}_+} f(T') R(T', T) dT'. \quad (6)$$

Ensuite, plutôt que de la distribution complète en  $(T, N)$ , on peut se contenter de l'espérance conditionnelle de  $N$  sachant  $T$ , notée  $\langle N|T \rangle$ , pour laquelle il est possible de fermer une équation similaire à (2) ou (6) mais avec un noyau inutilement compliqué pour cette présentation. Nous donnons quelques mots sur la résolution numérique de ces deux équations avant de passer aux résultats.

#### 4.1.2. Méthodes numériques

Rappelons que les équations que nous avons à résoudre numériquement sont des équations aux vecteurs propres  $f = \mathcal{L}[f]$  avec

$$\mathcal{L}[f](x) = \int_{\mathbb{R}_+} f(y) w(x, y) dy. \quad (7)$$

Après discrétisation de  $\mathbb{R}^+$ , on est naturellement ramené à l'équivalent discret de (7), où l'opérateur  $\mathcal{L}$  devient une multiplication par une matrice  $W = w_{ij}$  (comme vu à l'équation (5)). Le Théorème 1 (de Perron-Frobenius) assure alors existence et unicité d'un vecteur propre positif normalisé. Pour l'obtenir, on peut se reposer sur le troisième point du Théorème 1:  $W$  a pour valeur propre 1 et les autres sont de module strictement plus petit. En partant d'une donnée initiale non pathologique  $f_0$ , on a alors  $W^n(f_0) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} f$  ou  $f$  est le vecteur propre recherché.

Cette méthode s'avère plus efficace et plus robuste en pratique que la résolution du système  $Wf = f$  par des méthodes style pivot de Gauss. En effet, les erreurs numériques font que 1 n'est jamais exactement valeur propre de  $W$  et le pivot peut rapidement échouer. Itérer la matrice  $W$  par exponentiation rapide tout en renormalisant à chaque étape pour éviter l'explosion permet de récupérer systématiquement le vecteur propre pour la plus grande valeur propre, comme on sait que l'espace propre associé est de dimension 1.

#### 4.1.3. Résultats

Pour un environnement interstellaire typique (comme celui décrit dans [19]), pour un grain interstellaire relativement petit, la solution de l'équation (6) est tracée ci-contre (Figure 3, en échelle log-log), et sa moyenne  $\int T f(T) dT$  est indiquée par une barre verticale. Pour le même environnement et le même grain, la température  $T_{eq}$ , qui se contente d'équilibrer les puissances moyennes recues et émises, est tracée en pointillés orange: c'est la température fixe utilisée par les modèles classiques du milieu interstellaire (comme discuté en Section 1). Le grain est en général plus froid que la température d'équilibre, avec des rares immersions vers des températures élevées lors de la réception d'un photon. La grande amplitude de la distribution injustifie l'hypothèse d'équilibre radiatif pour les petits grains, ce qui a des conséquences importantes sur la modélisation du MIS et remet en question une quantité certaine de prédictions théoriques et numériques.

A titre d'illustration, observons également comment le modèle stochastique permet de retrouver et valider le modèle classique d'équilibre radiatif pour les plus gros grains. En effet, des grains plus massifs sont moins sensibles à l'absorption d'un photon individuel et leur température est donc beaucoup plus piquée. On peut vérifier (au moins formellement) que l'équation (6) converge, lorsque la taille du grain devient grande, vers une équation dont la solution est une distribution de Dirac piquée en la température d'équilibre ([5], 6.3.1). Cette convergence s'observe numériquement sur la Figure 4 ci-contre.

Le modèle stochastique nous renseigne aussi sur la population de particules à la surface du grain. Rappelons que nous calculons numériquement la population moyenne con-

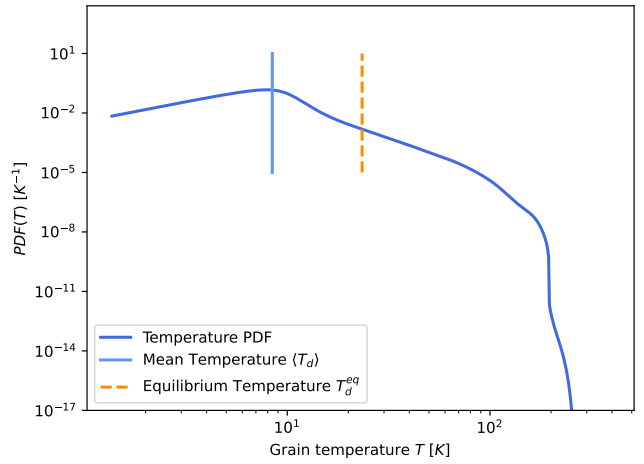


Figure 3: Distribution de température d'un petit grain interstellaire. Sont indiquées la moyenne de la distribution et la température d'équilibre.

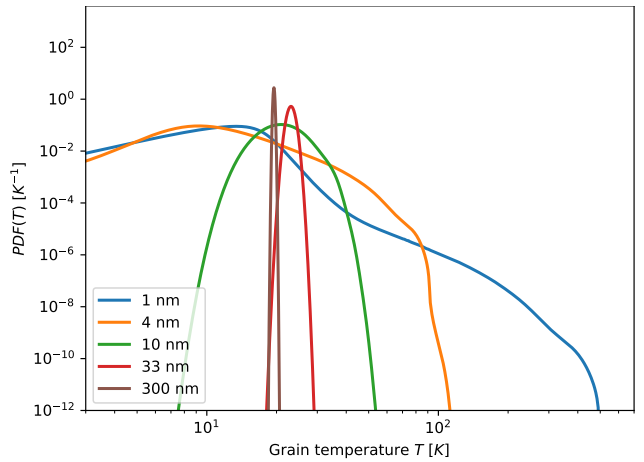


Figure 4: Distribution de température pour différentes tailles de grains interstellaires.

naissant la température  $\langle N|T \rangle$ . Cette dernière est tracée en Figure 5 sous la distribution de température correspondante. En pointillés gris est tracée la population  $N_{eq}(T) = k_{ads}/k_{des}(T)$ , prédite par le modèle classique<sup>6</sup> en supposant la température du grain à  $T$ . Sans rentrer dans une analyse détaillée, le modèle classique, consistant à fixer la population à  $N_{eq}(T_{eq})$ , fournit un résultat grandement différent de la véritable population moyenne  $\int \langle N|T \rangle f(T) dT$  (cette moyenne n'est pas indiquée sur la figure mais de l'ordre du plateau observé à basse température).

Même s'il est satisfaisant en soit de savoir modéliser plus précisément un grain interstellaire seul, l'intérêt premier de ces recherches est l'intégration des corrections au modèle classique apportées par le stochastique dans des codes plus larges, simulant toute la chimie du milieu interstellaire (comme le code Meudon-PDR [20] ou Kosma- $\tau$  [21]). Pour éviter de répéter une résolution couteuse des équations maitresses à chaque étape de ces codes itératifs, le développement d'approximations efficaces une fois les apports du modèle stochastique complet bien compris est également un sujet important à explorer. L'intégration de ces approximations dans les grands codes de simulation du MIS cités plus haut est en encore à l'état de projet, mais une fois achevée fournirait le premier aperçu des retombées des modèles stochastiques de grains à l'échelle du Milieu Interstellaire. Nous présentons maintenant une deuxième application physiquement pertinente du formalisme stochastique, qui révèle de nouvelles difficultés.

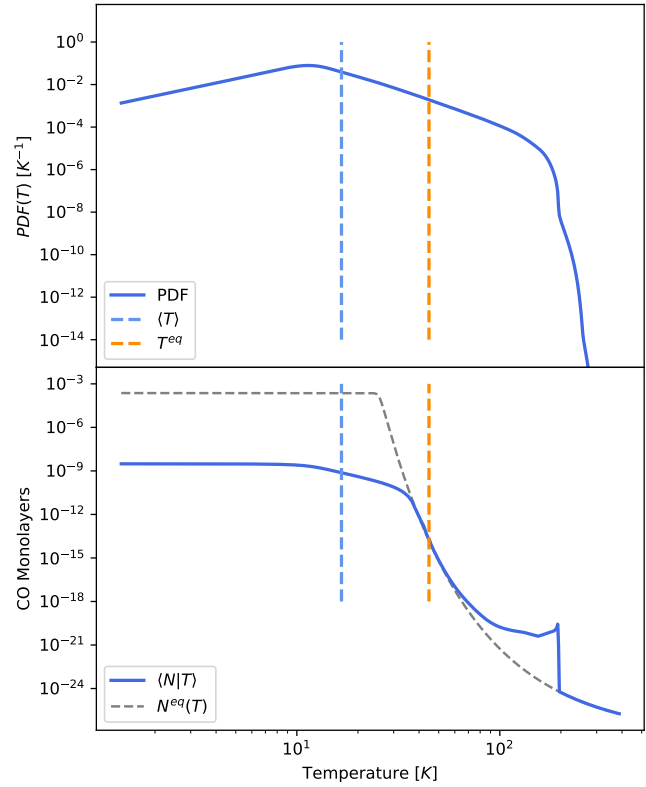


Figure 5: Distribution de température et population moyenne conditionnelle sur un petit grain interstellaire typique.

## 4.2. Les rayons cosmiques dans les nuages froids: un aperçu de futures difficultés

### 4.2.1. Situation physique

Au plus profond des nuages interstellaires, la lumière des étoiles environnantes est fortement éteinte, et le gaz et la poussière sont très froids. Les modèles classiques prédisent un *gel total*: à l'équilibre, la quasi-totalité du gaz devrait finir sur les grains. On observe pourtant plus d'espèces en phase gaz que prévu [22]. Il faut donc proposer et justifier des mécanismes capables d'évaporer efficacement les manteaux de glace.

Nous étudions ici un candidat possible: les rayons cosmiques. Les rayons cosmiques sont des noyaux atomiques accélérés à des vitesses relativistes qui traversent le milieu interstellaire. Ils peuvent très rarement frapper un grain et lui transmettre une partie de leur énergie, à la façon des photons du paragraphe précédent mais bien plus énergétiques. Le caractère ponctuel et rare de la rencontre du grain avec un rayon cosmique en fait un phénomène difficile à intégrer dans un modèle déterministe et stationnaire. Par contre, il s'intègre très facilement dans un modèle stochastique, comme une transition possible mais à taux très faible.

<sup>6</sup>La solution classique est obtenue comme équilibre stationnaire de  $\frac{dN}{dt} = k_{ads} - Nk_{des}(T)$

#### 4.2.2. Nouvelles difficultés mathématiques

Cependant, un autre mécanisme doit être pris en compte, avec des conséquences mathématiques handicapantes. En effet, l'évaporation du manteau de glace qui suit le chauffage par un rayon cosmique est si importante qu'elle devient un mécanisme efficace de refroidissement du grain: l'énergie dépensée par le grain pour faire évaporer une particule était négligeable précédemment mais doit maintenant être prise en compte.

Mathématiquement, cela induit des transitions de la forme  $(T, N) \rightarrow (T - \Delta T, N - 1)$  à chaque évaporation, qui couple la température à la population. Il n'est alors plus possible de fermer une équation pour la température seule: cette équation fait intervenir  $\langle N|T \rangle$ . Plus important, l'équation pour la population moyenne  $\langle N|T \rangle$  contient quant à elle le moment d'ordre deux de  $N$ . Il est possible d'écrire une équation sur ce moment  $\langle N^2|T \rangle$ , mais elle fait sans surprise intervenir  $\langle N^3|T \rangle$ , et ainsi de suite. Pour éviter une hiérarchie infinie d'équations, il faut tronquer le système, par exemple avec une approximation de  $\langle N^2|T \rangle$  par  $\langle N|T \rangle^2$ . On obtient tout de même un système non linéaire contrairement au cas précédent.<sup>7</sup>

Au niveau théorique, la question d'existence et unicité pour ces problèmes non-linéaires sort du cadre de la Section 3 et impulserait la recherche de nouveaux outils. Au niveau numérique, la résolution des non-linéarités repose en général sur une méthode itérative de type point fixe, assez naïve et sans preuve préalable de convergence. Bien qu'elles fonctionnent individuellement, ces techniques coûteuses interdisent pour l'instant toute intégration dans des codes plus larges où elles seraient imbriquées dans d'autres boucles d'exécution. Le développement de nouvelles méthodes adaptées ou d'approximations efficaces est donc un sujet brûlant.

L'intérêt principal d'une étude stochastique des interactions entre rayons cosmiques et grains est de pouvoir évaluer les différents modèles simplifiés de la littérature, actuellement employés dans les simulations numériques de par leur faible coût computationnel. Leur nombre et leur complexité dépasse d'un peu trop loin la portée de cette introduction pour que nous les détaillions ici. On peut montrer que là aussi, les résultats du modèle stochastique invalident encore une fois les modèles plus classiques, appelant au développement de nouvelles approximations. Les curieux.ses sont invité.e.s à parcourir la bibliographie ci-dessous ou le rapport de stage intitulé *Stochastic Treatment of the Formation of Ice Mantles on Interstellar Dust Grains*<sup>8</sup> ayant motivé cette introduction.

## 5. Conclusion et perspectives

Les processus stochastiques se révèlent un outil efficace pour construire un modèle stationnaire d'un système hors équilibre, comme c'est le cas pour les grains de poussière peuplant le milieu interstellaire. Mathématiquement, l'existence et unicité d'une distribution stationnaire des états du système est souvent assurée par le théorème de Krein-Rutman. Cependant, la résolution numérique d'une équation multidimensionnelle même linéaire est trop coûteuse pour permettre une implémentation efficace. Considérer des équations sur les marginales permet d'abaisser la dimension du problème mais peut faire apparaître des termes non-linéaires qui échappent aux résultats déjà connus, tant théoriques que numériques.

Les rôles cruciaux joués par la poussière et son manteau de glace dans le Milieu Interstellaire, de la formation de planètes par agglomération à celle de molécules organiques complexes par réactions chimiques, motive la poursuite des travaux présentés ici via deux perspectives: à court terme, le développement d'approximations des conclusions des modèles stochastiques existants et leur implémentation dans les codes de simulation du MIS pour mieux expliquer les observations récentes. A long terme, le développement de nouveaux modèles non-linéaires prenant par exemple en compte différentes espèces chimiques, ainsi que des outils mathématiques pour les traiter. A la clé, savoir si sur ces particules nanométriques, à des années lumières de la Terre, pourraient se former les premières briques d'une autre vie.

<sup>7</sup>Ce genre de non-linéarité n'est pas un cas isolé car elle est aussi attendue dans d'autres situations physiques, par exemple dès que l'on considèrera différentes espèces chimiques sur le grain pouvant réagir entre elles.

<sup>8</sup>Normalement consultable en ligne, même si la refonte en cours du site de l'Observatoire de Paris semble avoir fait passer à la trappe la page contenant les rapports de stage de Master 2.

## Bibliographie

- [1] Ofer Biham et al. “Master Equation for Hydrogen Recombination on Grain Surfaces”. In: *ApJ* 553.2 (June 2001), pp. 595–603. DOI: 10 . 1086 / 320975. arXiv: astro - ph / 0012267 [astro-ph] (cit. on p. 1).
- [2] B. T. Draine and Aigen Li. “Infrared Emission from Interstellar Dust. I. Stochastic Heating of Small Grains”. In: *ApJ* 551.2 (Apr. 2001), pp. 807–824. DOI: 10 . 1086 / 320227. arXiv: astro - ph / 0011318 [astro-ph] (cit. on p. 1).
- [3] H. M. Cuppen, O. Morata, and Eric Herbst. “Monte Carlo simulations of H<sub>2</sub> formation on stochastically heated grains”. In: *MNRAS* 367.4 (Apr. 2006), pp. 1757–1765. DOI: 10 . 1111 / j . 1365 - 2966 . 2006 . 10079 . x. arXiv: astro - ph / 0601554 [astro-ph] (cit. on pp. 1, 2).
- [4] Emeric Bron, Jacques Le Bourlot, and Franck Le Petit. “Surface chemistry in the interstellar medium. II. H<sub>2</sub> formation on dust with random temperature fluctuations”. In: *A&A* 569, A100 (Sept. 2014), A100. DOI: 10 . 1051 / 0004 - 6361 / 201322101. arXiv: 1407 . 4473 [astro-ph.GA] (cit. on pp. 1, 5).
- [5] Emeric Bron. “Stochastic processes in the interstellar medium”. PhD thesis. Laboratoire d’Études du Rayonnement de la Matière en Astrophysique, Nov. 2014 (cit. on pp. 1, 5, 7).
- [6] Bruce T. Draine. *Physics of the interstellar and intergalactic medium*. Princeton series in astrophysics. Princeton, N.J: Princeton University Press, 2011. ISBN: 978-0-691-12213-7 978-0-691-12214-4 (cit. on p. 1).
- [7] David Hollenbach and E. E. Salpeter. “Surface Recombination of Hydrogen Molecules”. In: *ApJ* 163 (Jan. 1971), p. 155. DOI: 10 . 1086 / 150754 (cit. on p. 2).
- [8] F. Fontani et al. “Seeds of Life in Space (SOLIS). I. Carbon-chain growth in the Solar-type protocluster OMC2-FIR4”. In: *A&A* 605, A57 (Sept. 2017), A57. DOI: 10 . 1051 / 0004 - 6361 / 201730527. arXiv: 1707 . 01384 [astro-ph.GA] (cit. on p. 2).
- [9] A. P. Jones et al. “The global dust modelling framework THEMIS”. In: *A&A* 602, A46 (June 2017), A46. DOI: 10 . 1051 / 0004 - 6361 / 201630225. arXiv: 1703 . 00775 [astro-ph.GA] (cit. on p. 2).
- [10] M. K. McClure et al. “An Ice Age JWST inventory of dense molecular cloud ices”. In: *Nature Astronomy* 7 (Apr. 2023), pp. 431–443. DOI: 10 . 1038 / s41550 - 022 - 01875 - w. arXiv: 2301 . 09140 [astro-ph.GA] (cit. on p. 2).
- [11] H. M. Cuppen et al. “Grain Surface Models and Data for Astrochemistry”. In: *Space Sci. Rev.* 212.1-2 (Oct. 2017), pp. 1–58. DOI: 10 . 1007 / s11214 - 016 - 0319 - 3 (cit. on p. 2).
- [12] V. Taquet, C. Ceccarelli, and C. Kahane. “Multilayer modeling of porous grain surface chemistry. I. The GRAINOBLE model”. In: *A&A* 538, A42 (Feb. 2012), A42. DOI: 10 . 1051 / 0004 - 6361 / 201117802. arXiv: 1111 . 4165 [astro-ph.GA] (cit. on p. 2).
- [13] E. M. Purcell. “Temperature fluctuations in very small interstellar grains.” In: *ApJ* 206 (June 1976), pp. 685–690. DOI: 10 . 1086 / 154428 (cit. on p. 2).
- [14] Oskar Perron. “Zur Theorie der Matrizes”. In: *Mathematische Annalen* 64 (1907), pp. 248–263. URL: <http://eudml.org/doc/158317> (cit. on p. 4).
- [15] Georg Frobenius. “Ueber Matrizen aus nicht negativen Elementen”. In: *Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Akademie der Wissenschaften* (1912), pp. 456–477 (cit. on p. 4).
- [16] Haïm Brezis. *Analyse fonctionnelle : théorie et applications*. Éditions Dunod, 1999. ISBN: 9782100043149 (cit. on p. 5).

- [17] Y. Du. Order Structure and Topological Methods in Nonlinear Partial Differential Equations. WORLD SCIENTIFIC, 2006 (cit. on p. 5).
- [18] Xing Liang, Lei Zhang, and Xiao-Qiang Zhao. “The Principal Eigenvalue for Degenerate Periodic Reaction-Diffusion Systems”. In: SIAM Journal on Mathematical Analysis 49.5 (Jan. 2017), 3603–3636. ISSN: 1095-7154. DOI: 10.1137/16m1108832. URL: <http://dx.doi.org/10.1137/16M1108832> (cit. on p. 5).
- [19] J. S. Mathis, P. G. Mezger, and N. Panagia. “Interstellar radiation field and dust temperatures in the diffuse interstellar medium and in giant molecular clouds”. In: A&A 128 (Nov. 1983), pp. 212–229 (cit. on p. 7).
- [20] Franck Le Petit et al. “A Model for Atomic and Molecular Interstellar Gas: The Meudon PDR Code”. In: The Astrophysical Journal Supplement Series 164.2 (2006), p. 506. DOI: 10.1086/503252. URL: <https://dx.doi.org/10.1086/503252> (cit. on p. 8).
- [21] M. Röllig and V. Ossenkopf-Okada. “The KOSMA- $\tau$  PDR model. I. Recent updates to the numerical model of photo-dissociated regions”. In: A&A 664, A67 (Aug. 2022), A67. DOI: 10.1051/0004-6361/202141854. arXiv: 2205.04233 [astro-ph.GA] (cit. on p. 8).
- [22] A. C. Adwin Boogert, Perry A. Gerakines, and Douglas C. B. Whittet. “Observations of the icy universe.” In: ARA&A 53 (Aug. 2015), pp. 541–581. DOI: 10.1146/annurev-astro-082214-122348. arXiv: 1501.05317 [astro-ph.GA] (cit. on p. 8).