



HAL
open science

Modèle fractionnaire pour la sous-diffusion : version stochastique et edp

Solonjaka Hiarintsoa Rakotonasy

► **To cite this version:**

Solonjaka Hiarintsoa Rakotonasy. Modèle fractionnaire pour la sous-diffusion : version stochastique et edp. Autre [cond-mat.other]. Université d'Avignon, 2012. Français. NNT : 2012AVIG0505 . tel-00839892v2

HAL Id: tel-00839892

<https://theses.hal.science/tel-00839892v2>

Submitted on 23 Jun 2014

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.



ACADÉMIE D'AIX-MARSEILLE
UNIVERSITÉ D'AVIGNON ET DES PAYS DE VAUCLUSE

THESE

présentée à l'Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse
pour l'obtention du grade de Docteur

SPÉCIALITÉ : Mécanique

École Doctorale 536 «Sciences et Agronomie»

*Modèle fractionnaire pour la sous-diffusion :
version stochastique et edp*

par

Solonjaka Hiarintsoa RAKOTONASY

Soutenue publiquement le devant un jury composé de :

M ^{me}	Prénom NOM	Professeur, LABO, Ville	Rapporteur
M.	Prénom NOM	Maître de Conférences, LABO, Ville	Rapporteur
M.	Prénom NOM	Ingénieur, Entreprise, Ville	Examineur
M.	Prénom NOM	Professeur, LABO, Ville	Examineur
M ^{me}	M.C. NÉEL	Professeur, Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse	Directeur de thèse
M.	M. JOELSON	HDR, Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse	Co-Directeur de thèse



Date de soutenance : 06 décembre 2012

Résumé

Ce travail a pour but de proposer des outils visant à comparer des résultats expérimentaux avec des modèles pour la dispersion de traceur en milieu poreux, dans le cadre de la dispersion anormale.

Le Mobile Immobile Model (MIM) a été à l'origine d'importants progrès dans la description du transport en milieu poreux, surtout dans les milieux naturels. Ce modèle généralise l'équation d'advection-dispersion (ADE) en supposant que les particules de fluide, comme de soluté, peuvent être immobilisées (en relation avec la matrice solide) puis relâchées, le piégeage et le relargage suivant de plus une cinétique d'ordre un. Récemment, une version stochastique de ce modèle a été proposée. Malgré de nombreux succès pendant plus de trois décades, le MIM reste incapable de représenter l'évolution de la concentration d'un traceur dans certains milieux poreux insaturés. En effet, on observe souvent que la concentration peut décroître comme une puissance du temps, en particulier aux grands temps. Ceci est incompatible avec la version originale du MIM. En supposant une cinétique de piégeage-relargage différente, certains auteurs ont proposé une version fractionnaire, le "fractal MIM" (f-MIM). C'est une classe d'équations aux dérivées partielles (e.d.p.) qui ont la particularité de contenir un opérateur intégral lié à la variable temps. Les solutions de cette classe d'e.d.p. se comportent asymptotiquement comme des puissances du temps, comme d'ailleurs celles de l'équation de Fokker-Planck fractionnaire (FFPE).

Notre travail fait partie d'un projet incluant des expériences de traçage et de vélocimétrie par Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) en milieu poreux insaturé. Comme le MIM, le f-MIM fait partie des modèles servant à interpréter de telles expériences. Sa version "e.d.p." est adaptée aux grandeurs mesurées lors d'expériences de traçage, mais est peu utile pour la vélocimétrie RMN. En effet, elle mesure la fonction caractéristique (transformée de Fourier) de déplacements des molécules excitées. Notre travail propose un outil d'analyse pour ces expériences : il s'agit d'une expression exacte de la fonction caractéristique des déplacements de la version stochastique du modèle f-MIM, sans oublier les MIM et FFPE. Ces processus sont obtenus à partir du mouvement Brownien

(plus un terme convectif) par des changements de temps aléatoires. On dit aussi que ces processus sont des mouvements Browniens, subordonnés par des changements de temps qui sont eux-mêmes les inverses de processus de Lévy non décroissants (les subordinateurs). Les subordinateurs associés aux modèles f-MIM et FFPE sont des processus stables, les subordinateurs associés au MIM sont des processus de Poisson composites. Des résultats expérimentaux très récents ont suggéré d'élargir ceci à des vols de Lévy (plus généraux que le mouvement Brownien) subordonnés aussi.

Le lien entre les e.d.p. fractionnaires et les modèles stochastiques pour la sous-diffusion a fait l'objet de nombreux travaux. Nous contribuons à détailler ce lien en faisant apparaître les flux de soluté, en insistant sur une situation peu étudiée : nous examinons le cas où la cinétique de piégeage-relargage n'est pas la même dans tout le milieu. En supposant deux cinétiques différentes dans deux sous-domaines, nous obtenons une version du f-MIM avec un opérateur intégral-différentiel lié au temps, mais dépendant de la position.

Ces résultats sont obtenus au moyen de raisonnements, et sont illustrés par des simulations utilisant la discrétisation d'intégrales fractionnaires et d'e.d.p. ainsi que la méthode de Monte Carlo. Ces simulations sont en quelque sorte des preuves numériques. Les outils sur lesquels elles s'appuient sont présentés aussi.

Table des matières

Résumé	i
1 Introduction générale	1
1.1 Motivation de la thèse	2
1.2 Contexte économique et social	4
1.3 Structure de la thèse	5
2 Le transport anormal	7
2.1 Diffusion normale et anormale	7
2.1.1 Diffusion normale	8
2.1.2 Diffusion ou dispersion anormale	9
2.2 Modèles de dispersion anormale	10
2.2.1 Diffusion anormale : des expériences aux modèles	10
2.2.2 Le modèle MIM classique	13
2.2.3 L'équation de Fokker-Planck fractionnaire	14
2.3 Du modèle stochastique à la dérivée d'ordre non entier	15
2.4 Conclusion	17
3 Processus de Lévy et sous-jacents	19
3.1 Les lois infiniment divisibles	20
3.1.1 Définition	20
3.1.2 Exemples	20
3.2 La formule de Lévy-Khintchine	22
3.3 Les lois α -stables	22
3.3.1 Définition	23
3.3.2 Densité et fonction caractéristique	25
3.3.3 Condition nécessaire et suffisante de stabilité	27
3.3.4 Comportement asymptotique	29
3.3.5 Moments	29
3.4 Processus de Lévy	30
3.4.1 Définition	30
3.4.2 Processus stable	32

3.4.3	Exemples	32
3.5	Subordinateurs	33
3.5.1	Autre exemple	34
4	Les déplacements de certains processus stochastiques représentant le transport	35
4.1	Processus pour représenter le transport de masse avec effets de mémoire	37
4.1.1	Processus stochastique associé à l'équation de Fokker Planck fractionnaire	37
4.1.2	Processus associé au modèle f-MIM	40
4.1.3	Processus associé au modèle MIM	42
4.2	Mesure par RMN du déplacement des particules fluides	44
4.3	Les moments des incréments de Z_t	46
4.3.1	Les moments des incréments de l'inverse d'un subordina- teur de Lévy : cas général	47
4.3.2	Les moments et la transformée de Laplace des incréments de l'inverse d'un subordonneur de Lévy, cas des modèles MIM,f-MIM et FFPE	48
4.3.3	Preuve numérique	54
4.4	L'espérance mathématique des incréments d'un mouvement Brow- nien subordonné par l'inverse d'un subordonneur de Lévy	59
4.4.1	Incréments d'un mouvement Brownien subordonné : cas général d'un subordonneur de Lévy	60
4.4.2	Cas particuliers des modèles F-MIM,FFPE et MIM	61
4.4.3	Illustrations numériques	61
4.5	Limite de la fonction caractéristique du déplacement	64
4.5.1	Cas associé à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire	64
4.5.2	Cas associé au modèle f-MIM	67
4.5.3	Cas associé au modèle MIM	68
4.6	La fonction caractéristique des déplacements d'un vol de Lévy subordonné	69
4.7	Conclusion	73
5	Equation fractionnelle d'ordre variable pour la sous-diffusion	75
5.1	Modèle stochastique et particules mobiles ou immobiles	76
5.1.1	Modèle stochastique	77
5.1.2	Hypothèses et notations	78
5.1.3	Densité de particules mobiles à petite échelle	79
5.1.4	Densité de particules immobiles à petite échelle	82
5.1.5	Relation entre les densités de particules mobiles et immo- biles	82

5.2	L'équation maitresse régissant la distribution de la densité de particule	84
5.2.1	Le flux de particules	84
5.2.2	Equation de conservation	88
5.3	Simulations numériques et comparaisons	88
5.3.1	Méthodes numériques	89
5.3.2	Simulations	90
5.4	Conclusion	97
6	Conclusions générales et perspectives	99
	Bibliographie	103
	Annexes	115
A	Algorithme de simulation de loi α-stable	115
A.1	Première étape	115
A.2	Deuxième étape	116
A.3	Troisième étape	116
B	Les opérateurs fractionnaires	121
B.1	L'intégrale fractionnaire	121
B.1.1	Definition	121
B.1.2	Remarque	122
B.1.3	La transformée de Laplace de $I_{0,+}^{\gamma}f(x)$	122
B.1.4	La transformée de Fourier de $I_{-\infty,+}^{\gamma}f(x)$	123
B.2	La dérivée fractionnaire	123
B.2.1	La dérivée fractionnaire au sens de Riemann-Liouville	123
B.2.2	La dérivée fractionnaire au sens de Caputo	124
B.2.3	La dérivée fractionnaire au sens de Grünwald-Letnikov	124
B.2.4	La transformée de Laplace de $D_{0,+}^{\gamma}f(x)$	125
C	Les Fonctions de Mittag-Leffler	127
C.1	Definition	127
C.1.1	La transformation de Laplace de $E_{\gamma}(-\Lambda t^{\gamma})$	128
D	Discrétisation de l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$	131
D.1	L'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$	131
D.2	Inversion de $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$	132

E	Démonstration de la convergence faible $[(\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id)\tau B_m^\tau] \rightharpoonup 0$	135
F	Comportement limite des flux	139
E.1	Preuve que	
	$\int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} [V^\tau(x+y, t) - V^\tau(x-y, t)] dy \rightharpoonup 0$	
	dans $\mathcal{D}'(E)$	139
G	Une propriété de la Gaussienne	141

Liste des figures

2.1	Courbe de percée tracée en coordonnées logarithmiques, montrant la concentration mesurée (symbole) à la sortie de colonnes de différentes longueurs. Les lignes continues représentent la densité obtenue par des modèles donnant une loi de puissance pour la densité de probabilité [21].	12
3.1	Densité de probabilité d'une loi α -stable symétrique ($\beta = 0$), en coordonnées semi-logarithmiques qui montre la variation de la queue de la distribution en fonction de la valeur de α	24
3.2	Densité de probabilité d'une loi α -stable symétrique ($\beta = 0$).	28
3.3	Densité de probabilité d'une loi α -stable asymétrique ($\beta = 1$).	28
3.4	Densité de probabilité d'une loi α -stable asymétrique avec différentes valeurs de β	29
4.1	Une étape de déplacement d'un marcheur aléatoire correspondant à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire	39
4.2	Différentes trajectoires de x_t^τ définie par (4.3) pour différentes valeurs de γ ($\gamma = 0.5, \gamma = 0.8, \gamma = 1$, avec $D = 1, \Lambda = 1$ et $v = 1$). La figure de droite représente différentes trajectoires obtenues à partir d'un échantillon donné N_1, \dots, N_n et correspond à différentes valeurs de γ . Le côté gauche correspond à d'autres échantillons N_1, \dots, N_n	39
4.3	Une étape de déplacement d'un marcheur aléatoire effectuant (4.6) : l'advection durant τ et le saut dispersif $\sqrt{2D\tau}N_n$ sont suivis d'un temps d'immobilité tiré aléatoirement	41

4.4	Différentes trajectoires de x_t^τ pour $\gamma = 0.5, \gamma = 0.8$ et $\gamma = 1$. La figure de droite représente des trajectoires obtenues à partir d'un échantillon donné N_1, \dots, N_n mais correspondant à différentes valeurs de γ . Le côté gauche correspond à d'autres échantillons N_1, \dots, N_n toutes les trajectoires correspondent à $D = 0.1, \Lambda = 1$ et $v = 1$. Quand $\gamma < 1$ les marcheurs restent parfois immobiles pendant très longtemps et ces périodes d'immobilité diminuent quand γ augmente. A la limite $\gamma = 1$, la durée de piègeage a une moyenne finie et la diffusion devient normale.	41
4.5	Trajectoires de Z_t , pour trois valeurs de γ avec une même valeur de Λ ($\Lambda = 1$). Les lignes et les tirets de même couleur représentent deux trajectoires (c'est à dire deux réalisations) du même processus Z_t	42
4.6	Représentation d'une étape de déplacement d'un marcheur aléatoire correspondant au modèle MIM	43
4.7	Particules se déplaçant dans un gradient du champ magnétique	46
4.8	Illustration numérique de l'équation (4.20), avec $\eta \in \mathbb{R}$ et $t_1 = 0.5$. Les symboles représentent la simulation de $\langle e^{-q[Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}]} \rangle$ par la méthode de Monte Carlo, les lignes représentent la fonction f	55
4.9	Illustration numérique de la partie réelle de l'équation (4.20) avec η imaginaire pur. Les symboles représentent la simulation de Monte Carlo de $\langle e^{-iq[Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}]} \rangle$, les lignes représentent la fonction f	56
4.10	La partie imaginaire de l'équation (4.20) comparée avec la marche au hasard avec les mêmes paramètres que pour la figure (4.9).	56
4.11	La fonction caractéristique de $\langle e^{iq[Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1}]} \rangle$ pour $\gamma = 0.5, \Lambda = 1$ avec deux valeurs de t_1 ($t_1 = 0.1; t_1 = 0.4$). Les lignes continues représentent l'équation (4.31), les symboles sont obtenues par la méthode de Monte Carlo.	58
4.12	Comparaison de la partie réelle de l'expression $\langle e^{iq[Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1}]} \rangle$ avec la méthode de Monte Carlo, pour différentes valeurs de γ ($\gamma = 0.3, \gamma = 0.5, \gamma = 0.8$) et $\Lambda = 1$ avec $D = 1, q = 1$ et $t_1 = 0$. Les lignes continues représentent l'équation (4.27), les symboles sont calculés par la méthode de Monte Carlo.	58
4.13	La partie imaginaire de l'expression $\langle e^{iq[Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1}]} \rangle$ comparée avec la marche au hasard avec le même paramètres que pour la figure (4.12).	59

4.14	La partie réelle de l'équation (4.36) comparée avec la marche au hasard, avec $D = 0.0001$, $v = 0.45$, $K = 0.4$ et $\omega = 500$. Le symbole représente la simulation de Monte Carlo de $\langle e^{-iq(x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1})} \rangle$, les lignes représentent l'équation (4.36) calculée numériquement	62
4.15	La partie imaginaire de l'équation (4.36) comparée avec la marche au hasard, avec les mêmes paramètres que pour la figure 4.14	63
4.16	Expression mathématique de $\langle e^{i[x_{f-MIM,t_2} - x_{f-MIM,t_1}]} \rangle$ pour $\gamma = 0.5$, $\Lambda = 1$, avec deux valeurs de t_1 ($t_1 = 0.1$; $t_1 = 0.4$). Les lignes continues représentent l'équation (4.39), les symboles représentent la méthode de Monte Carlo.	63
4.17	Illustration de la partie réelle et de la partie imaginaire de $\langle e^{i[x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1}]} \rangle$ comparées avec la simulation par la méthode de Monte Carlo. Les lignes continues représentent l'équation (4.38), les symboles sont calculés par la méthode de Monte Carlo.	64
4.18	Expression mathématique de $\langle e^{i[x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1}]} \rangle$ pour différentes valeurs de γ , les traits gras de couleur noire représentent $\left[1 - \frac{\sin \pi \gamma}{\pi(1-\gamma)} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_1} \right)^{1-\gamma} \right]$ Avec $D=1$, $t_1 = 16$ et $t_2 - t_1 = 0.01$	66
4.19	Représentation de la partie réelle et de la partie imaginaire de $\langle e^{ia(x_{f-MIM,t_2} - x_{f-MIM,t_1})} \rangle$ en fonction de q pour différentes valeurs de γ . On a pris $D = 1$, $v = 1$ $\Lambda = 1$.	67
4.20	Comparaison de $\left[1 - \lim_{q \rightarrow \infty} Re \left(\langle e^{iq(x_{f-MIM,t_2} - x_{f-MIM,t_1})} \rangle \right) \right]$, avec $\left(\frac{t_2 - t_1}{t_1} \right)^{1-\gamma}$ en coordonnées logarithmiques. Avec $\gamma = 0.5$ et $D = 0.1$	68
4.21	Illustration numérique de la proposition, dans le cas d'un vol de Lévy $DL_{\alpha,\beta}$ subordonné par l'inverse du subordonneur strictement stable $\cos \frac{\pi\gamma}{2} L_{\gamma,1}$. La partie imaginaire est évidemment nulle. Les paramètres sont $\alpha = 1.5$, $\beta = 0$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$ et $v = 0$. Plusieurs valeurs de t_1 sont représentées et $t_2 = t_1 + dt$ où $dt = 0.01$	70
4.22	Partie réelles des deux membres de (4.42) pour un vol de Lévy asymétrique $L_{\alpha,1}$ subordonné par l'inverse du subordonneur stable $\cos \frac{\pi\gamma}{2} L_{\gamma,1}$. Les paramètres sont $\alpha = 1.5$, $\gamma = 0.5$. Plusieurs valeurs de t_1 ont été représentées et $t_2 = t_1 + dt$ où $dt = 0.01$	71
4.23	Partie imaginaire des deux membres de (4.42) dans les mêmes conditions que pour la figure 4.22	71
4.24	Partie réelles des deux membres de (4.42) comme pour la figure (4.22) mais avec plusieurs paramètres γ , t_1 étant fixé et $t_2 = t_1 + dt$.	72

4.25	Partie imaginaire des deux membres de (4.42) dans les mêmes conditions que pour la figure 4.24.	72
5.1	Le profil de concentration total $P(x, t)$ dans un domaine de longueur $L=1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.1, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, V = 0$ et $dt = 0.0005$. En noir $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$, en bleu $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.2$. Les symboles représentent la méthode de Monte Carlo réalisée avec 100000 particules. Les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.26).	92
5.2	Le profil de concentration totale $P(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à différents instants fixé. Les paramètres sont $D = 0.2, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, V = 0$. et $\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 0.2, x_0 = L/4$ et $x_d = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.26).	92
5.3	Le profil de concentration des particules mobiles $P_m(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.2, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, V = 0.5$ et $\gamma_1 = 0.2, \gamma_2 = 0.5, x_d = x_0 = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.17).	93
5.4	Le profil de concentration des particules mobiles $P_m(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.2, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, V = 0$ et $\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 0.1, x_0 = L/4$ et $x_d = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.17).	93
5.5	Le profil de concentration des particules immobiles $P_{im}(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Les paramètres ont les mêmes valeurs que pour les figures (5.2 et 5.4). Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.14).	94
5.6	Le profil de concentration des particules immobiles $P_{im}(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.2, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, V = 0$. et $\gamma_1 = 0.5, \gamma_2 = 0.2, x_0 = L/4$ et $x_d = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.14).	94

5.7	Le profil de concentration totale $P(x, t)$ dans un domaine de longueur $L=1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.1, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, V = 0.5$ et $\gamma_1 = 0.2, \gamma_2 = 0.5$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.26).	96
5.8	Le flux $F(x, t)$ à la sortie du domaine de longueur $L=1$. Avec $D = 1, h_1 = h_2 = 1, \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$ et $V = 0.5, \gamma_1 = 0.2, \gamma_2 = 0.5$. Le point source est localisé à $x_0 = L/2$ au temps $t = 0$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues ont été obtenues à partir du calcul numérique de $P_m(x, t)$ en appliquant la relation (5.23) sous sa forme discrétisée.	96
A.1	Simulations numériques d'une variable aléatoire qui suit une loi α -stable avec $\alpha = 2$	117
A.2	Simulations numériques d'une variable aléatoire qui suit une loi α -stable symétrique avec $\alpha = 1.5$	118
A.3	Simulations numériques de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 1$ et $\beta = 1.5$ et $\beta = 1$	118
A.4	Simulations numériques de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 1$ et $\beta = 1.5$ et $\beta = -1$	119
A.5	Simulations numériques de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 0.5$ et $\beta = 1$	119
C.1	Courbe de la fonction de Mittag-Leffler $E_\gamma(-\Lambda t^\gamma)$ pour $\Lambda = 1$ et $\gamma = 0.5$	128
D.1	Comparaison de $I^\gamma t^\beta$ calculer numériquement et de $\frac{\Gamma(\beta + 1)}{\Gamma(\beta + 1 + \gamma)} t^{\gamma + \beta}$ pour $\beta = 1$ et $\gamma = 0.5$	133
D.2	Comparaison entre $(Id + \Lambda I_{0,+}^\gamma)^{-1}(1)$ et e^{-t} , pour $\beta = 1$ et $\gamma = 1$	134

Chapitre 1

Introduction générale

Sommaire

1.1 Motivation de la thèse	2
1.2 Contexte économique et social	4
1.3 Structure de la thèse	5

La présente thèse fait partie d'un effort plus général visant à proposer des modèles adaptés aux différentes formes très variées du transport anormal. Cet effort est motivé par de nombreuses expériences montrant les limites des modèles fondés sur le mouvement Brownien et l'équation de la diffusion, en ce qui concerne la dispersion de soluté dans le sol et dans d'autres milieux complexes. De nombreuses observations suggèrent en effet la nécessité d'examiner des modèles alternatifs, et nous allons proposer quelques exemples. Des processus stochastiques plus généraux que le mouvement Brownien, associés à des équations aux dérivées partielles (edp) dites fractionnaires, fournissent de tels modèles alternatifs, particulièrement intéressants en ce qui concerne la dispersion. Ils représentent un ensemble très vaste, puisqu'ils équivalent à remplacer par des dérivées d'ordre fractionnaire les dérivées d'ordre entier (par rapport à l'espace ou par rapport au temps) présentes dans l'équation de la diffusion. Une bonne connaissance des propriétés de ces processus stochastiques et de ces edp est nécessaire pour choisir le bon modèle dans une situation pratique donnée. Il faut aussi de bons outils de simulation. De plus, la littérature ainsi que des expériences actuellement en cours suggèrent que dans le cadre du transport de soluté en milieu poreux, on doit faire appel selon les circonstances à des modèles qualitativement très différents. Nous pensons plus précisément à des edp très similaires à l'équation de la diffusion, mais avec une dérivée par rapport au temps ou par rapport à l'espace d'ordre non entier. L'une ou l'autre de ces situations semble s'observer, selon les milieux, et même selon les circonstances (par exemple la vitesse moyenne d'un écoulement). Des expériences actuellement

en cours sur des sables non saturés suggèrent d'examiner ces deux possibilités, séparément ou peut être même ensemble.

Des travaux théoriques et numériques réalisés au laboratoire [48] avaient eu pour objet des edp comportant des dérivées fractionnaires en espace. Pour cette raison, notre contribution se concentre principalement sur des edp comportant des dérivées fractionnaires en temps. Ces edp sont étroitement liées à des modèles stochastiques fondés sur le mouvement Brownien subordonné par un changement de temps aléatoire. Nous verrons à la fin du chapitre 4 que cette démarche donne des résultats qui s'étendent facilement à des vols de Lévy subordonnés.

Pour ces modèles nous étudions la possibilité de devoir considérer des dérivées par rapport au temps d'ordre différent dans certains compartiments du domaine. Nous précisons le lien entre les edp et les modèles stochastiques. Nous précisons aussi les outils de simulation issus de ces deux approches en utilisant leur complémentarité. Il y a en effet les expériences de traçage qui fournissent des données sur la densité de probabilité de trouver une particule donnée aux différentes positions à un instant donné. Nous insistons aussi ici sur des outils d'analyse adaptés aux expériences de RMN¹. Ces dernières permettent en particulier de déterminer la distribution des déplacements effectués par les particules de fluide (ou de traceur) pendant un très court intervalle de temps.

1.1 Motivation de la thèse

Dans un milieu poreux, les particules de traceur ne se déplacent pas aussi librement que dans un fluide, et sont obligées de suivre des chemins complexes à travers l'espace poral. Ces chemins sont en partie déterminés par la géométrie du milieu, qui peut imposer des pores sans issue ou de grands pores bien reliés au reste du réseau. Les pores sans issue peuvent donner aux particules des occasions d'être piégées pour des durées très variables. Dans les grands pores continus, au contraire, on peut admettre que les particules se déplacent plus librement (sans contrainte), avec une faible probabilité d'être retenues par les parois de la matrice solide.

L'hétérogénéité des milieux poreux à grande échelle nécessite de développer une théorie du transport capable de tenir compte de ces possibilités. Notons que pour tout milieu poreux complexe, l'hétérogénéité est présente à toutes les échelles. Pour comprendre le problème que cela représente, trois points peuvent être abordés :

¹Résonance Magnétique Nucléaire

- Comme l'hétérogénéité est très variée, a priori on ne peut pas obtenir une connaissance complète du milieu poreux dans lequel les particules sont transportées.
- Le chemin parcouru par une particule dans un milieu poreux est fortement influencé par l'hétérogénéité de celui-ci, ainsi que par les conditions initiales et les conditions aux limites qui déterminent l'écoulement.
- D'autre part, l'hétérogénéité à petite échelle peut influencer considérablement le comportement à grande échelle. C'est sur ce point que nous allons insister.

Dans les milieux poreux, de nombreuses observations, effectuées dans les colonnes de laboratoire ou dans les milieux naturels, montrent que le transport de masse n'obéit pas systématiquement à la loi de Fick et à la loi de Fourier (en d'autres termes la loi de dispersion normale), qui décrivent le flux et la densité de traceur. C'est le cas en particulier en régime insaturé, au moins sous certaines conditions.

Un exemple qui montre cet écart à la loi de Fick est une analyse faite par Bromly et Hinz en 2004 [21], des données recueillies auparavant par Grasser et Sitta en 1993 [41] en sortie de colonnes remplies de sable, donc de milieu poreux insaturé, mais pas particulièrement hétérogène. Ces données montrent des courbes d'élution caractérisées par une rapide montée et une longue trainée. De plus, ces données suggèrent que la concentration de traceur décroît comme une puissance du temps, et il semble que dans ce cas on observe un comportement asymptotique. Des données du CEA² vont dans le même sens, mais avec moins de netteté, parce que la méthode utilisée pour mesurer les concentrations est moins précise aux grands temps. Les longues trainées mises en évidence par Bromly et Hinz par exemple suggèrent que le milieu est capable de retenir anormalement longtemps une fraction du soluté. Si cette interprétation est correcte, le milieu garde une certaine mémoire, et pour décrire ce qui se passe il faut sortir du cadre des modèles classiques de la diffusion basés sur des propriétés markoviennes à petite échelle. En d'autres termes, le devenir d'un système présentant de tels effets ne peut être résumé par sa description à un instant donné. Notons que d'autres données expérimentales ne montrent pas ce comportement, ou pas de manière si nette.

On a besoin, pour discuter ces données, de modèles capables de tenir compte de la mémoire du milieu. On a en particulier besoin de modèles correspondant au comportement asymptotique apparemment mis en évidence par Bromly et Hinz. Les statistiques de Lévy fournissent de tels modèles. En utilisant leurs propriétés de manière approfondie, on peut espérer pouvoir faire la différence entre des effets de mémoire courte ou au contraire persistants, sans toutefois devoir attendre d'observer un comportement asymptotique. D'autre part, il est

²Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives

souhaitable de pouvoir appliquer ces modèles à des expériences comme la RMN. Au lieu de mesurer des densités de traceur à chaque instant, ces expériences déterminent la statistique des déplacements des particules entre deux instants donnés. Ces expériences exigent donc qu'on étudie ces déplacements. Il s'agit d'un problème trivial s'il n'y a pas d'effets de mémoire, mais d'un problème ouvert s'il y en a.

Nous avons donc deux objectifs. Le premier est de progresser dans la discussion des expériences de traçage afin de pouvoir dégager un modèle pouvant représenter des expériences, sans utiliser la notion de comportement asymptotique. Le second est de pouvoir discuter la présence d'effets de mémoire sur la base d'expériences RMN. Nous utiliserons pour cela deux outils complémentaires mais étroitement liés qui sont les statistiques de Lévy et les edp fractionnelles.

1.2 Contexte économique et social

Comme nous l'avons dit ci-dessus, cette thèse a pour but de représenter le transport de masse dans les milieux poreux hétérogènes insaturés. Ce type de milieu existe partout dans notre environnement, en particulier dans le sol et le sous-sol. Mieux connaître le transport dans ces milieux est important en vue de maîtriser les accidents de pollution pouvant être causés par des activités industrielles ou agricoles susceptibles de libérer des polluants qui peuvent traverser le sol et atteindre la nappe phréatique. Une description précise du transport de masse dans les milieux poreux devrait donc permettre de mieux prévoir le devenir d'une pollution, et plus tard de prévenir les pollutions. Les modèles utilisés actuellement ne sont en effet pas suffisants pour décrire ce phénomène, puisque les données de terrain ont montré par des exemples que le transport de traceur peut parfois être beaucoup plus rapide que prévu [24] [75].

Outre les fuites des dispositifs de stockage des déchets, on peut également envisager l'utilisation de ce modèle à des fins moins sombres. L'eau et l'absorption de nutriment par les racines des plantes est en effet aussi une question cruciale dans un monde où de nombreuses personnes doivent être nourries sur la base d'une quantité décroissante d'eau et de surface cultivable. Une étude en cours à l'INRA³ vise à optimiser l'utilisation d'intrants et d'engrais dans un contexte d'irrigation, afin d'améliorer le rendement des cultures et de préserver les ressources en eau [82] [30] [45].

³Institut National de Recherche Agronomique

1.3 Structure de la thèse

La thèse est structurée de la façon suivante. Le chapitre 2 présente à la fois une étude bibliographique et une introduction aux modèles d'équations fractionnaires. La première partie du chapitre 2 traite le phénomène de la diffusion anormale avec effet de mémoire en mettant l'accent sur l'insuffisance des méthodes traditionnelles. Elle aborde aussi plusieurs façons de modéliser ce type de diffusion : les marches aléatoires en temps continu et les équations différentielles fractionnaires semblent bien adaptées pour tenir compte des effets de mémoire. Les rappels sur les propriétés des dérivées et intégrales fractionnaires qui sont les plus utiles pour nous dans ce chapitre, sont donnés dans l'annexe B. Disons pour l'instant qu'il s'agit d'opérateurs non-locaux : la dérivée fractionnaire en temps contient des informations obtenues aux temps précédents.

Le chapitre 3 est consacré aux processus de Lévy et à la notion de subordination qui sont les outils base de notre approche stochastique du transport avec effet de mémoire. Ces outils sont essentiels pour aborder ensuite l'étude des déplacements, qui serait un problème trivial s'il n'y avait pas d'effets de mémoire.

Dans le chapitre 4 nous développons un outil issu de cette approche, pour modéliser et analyser les résultats de mesures issues d'expériences de RMN lorsque des effets de mémoire sont observés ou susceptibles d'être observés. La vélocimétrie par RMN permet en effet de mesurer une fonctionnelle qui résume les propriétés statistiques des déplacements des particules de fluide. Ces effets de mémoire sont modélisés par des processus Markoviens comme le mouvement Brownien (et même un peu plus généraux), soumis à un changement de temps aléatoire. Ces processus représentent eux mêmes la limite hydrodynamique des marches aléatoires incluant diverses formes de retards. Les processus qu'on obtient en passant à la limite macroscopique ont une densité de probabilité qui vérifie le modèle immobile mobile fractal (f-MIM) ou l'équation de Fokker Planck fractionnaire (FFPE). Mais dans ce chapitre nous nous occupons principalement de la fonction caractéristique des déplacements. Nous faisons ceci à cause de la vélocimétrie par RMN qui consiste précisément à mesurer cette fonction caractéristique.

Le chapitre 5 développe un modèle qui s'adresse aux expériences de traçage : il traite plus particulièrement d'une équation fractionnelle en temps dont l'ordre dépend de la position. Ceci permet de traiter des milieux où les particules de traceur sont retenues moins longtemps dans certaines parties que dans d'autres.

Chapitre 2

Le transport anormal

Sommaire

2.1 Diffusion normale et anormale	7
2.1.1 Diffusion normale	8
2.1.2 Diffusion ou dispersion anormale	9
2.2 Modèles de dispersion anormale	10
2.2.1 Diffusion anormale : des expériences aux modèles	10
2.2.2 Le modèle MIM classique	13
2.2.3 L'équation de Fokker-Planck fractionnaire	14
2.3 Du modèle stochastique à la dérivée d'ordre non entier	15
2.4 Conclusion	17

Dans ce chapitre, nous allons préciser l'objet de notre étude. Avant de présenter les grandes lignes des modèles sur lesquels nous allons insister par la suite, il nous faut rappeler ce qu'on appelle transport anormal. Il s'agit d'effets collectifs fortement influencés par les mouvements d'objets trop petits pour être détectés individuellement. D'autre part, le mot « anormal » fait référence à une certaine normalité dont il va falloir pouvoir se démarquer dans certaines circonstances. Nous allons tout d'abord rappeler ce qu'on entend par diffusion anormale, avant d'évoquer d'autres situations, que nous rattacherons ensuite à des modèles mathématiques.

2.1 Diffusion normale et anormale

De même que la loi normale joue un rôle central dans la description statistique de la plupart des phénomènes (pas seulement en physique), on s'attend

a priori à ce que la diffusion s'observe dans tous les milieux de la même façon. Lorsque les mouvements d'un traceur ne suivent pas les lois de la diffusion, on parle de diffusion anormale.

2.1.1 Diffusion normale

Dans un fluide homogène au repos, on observe que la concentration d'un soluté tend toujours à s'uniformiser. On précise même qu'un flux diffusif est proportionnel à l'opposé du gradient de la concentration, c'est la loi de Fick

$$\text{Flux} = -D\nabla C.$$

Les mesures directes des flux sont difficiles, cependant les conséquences qu'on déduit de cette loi phénoménologique sont vraies et vérifiables dans les fluides homogènes et au repos. Dans un fluide avec un champ des vitesses uniforme il faut ajouter le flux convectif, proportionnel à la vitesse macroscopique et à la concentration.

C'est Einstein [32] qui a montré que cette loi de Fick a la même origine que le mouvement Brownien. Dans les deux cas cette origine est invisible alors qu'on observe ses manifestations. Le mouvement Brownien [31] s'observe sur des particules en suspension dans un fluide homogène au repos. Einstein l'a interprété comme étant la manifestation de mouvement incessants des molécules de fluide elles mêmes. Le mouvement Brownien mathématique n'était alors pas inventé, cependant il a montré que le coefficient D , ou diffusivité présent dans la loi de Fick, est lié à l'échelle de longueur l (l'écart type) des mouvements aléatoires effectués par les particules de traceurs pendant une échelle de temps τ , par $D = \frac{l^2}{2\tau}$. Ce rapport est une propriété intrinsèque du fluide et du traceur dans des conditions données de température. De plus les mouvements aléatoires des molécules d'un fluide au repos à l'échelle macroscopique ont une moyenne nulle.

Les mathématiciens ont inventé un modèle stochastique qui est une représentation idéalisée de ces mouvements à petite échelle. Dans la suite, lorsque nous évoquerons le mouvement Brownien, nous ferons référence à cet objet mathématique idéal et précis. Ce qu'on observe dans la réalité lui ressemble beaucoup [76] même si cette ressemblance est difficile à mettre en évidence directement.

Lorsqu'on est satisfait de cette ressemblance on dit que dans le milieu considéré la diffusion est normale. Pour aller vite, ceci se produit lorsque les conséquences de la loi de Fick sont observées, c'est à dire lorsque la concentration

évolue selon l'équation d'advection diffusion

$$\partial_t C = \nabla \cdot (D \nabla C) - v \cdot \nabla C.$$

Le moyen le plus simple sur le plan théorique, pour vérifier si tel est le cas consiste à déterminer la variance $\langle x^2(t) \rangle$ des positions de particules de soluté et à vérifier qu'elle évolue en restant proportionnelle au temps suivant

$$\langle x^2(t) \rangle = D_m t$$

(D_m étant la diffusivité moléculaire), si au départ le soluté a été déposé en $x = 0$. Ceci est en effet une propriété du mouvement Brownien, et peut aussi se déduire de l'équation d'advection diffusion. Notons que tout ceci n'est pas toujours facile à vérifier expérimentalement.

Dans certains milieux ou certaines circonstances on observe des comportements différents. On parle alors de diffusion anormale.

2.1.2 Diffusion ou dispersion anormale

Dans certains fluides complexes, le mouvement Brownien peut être gêné à cause de la composition même du milieu. On observe aussi (mais indirectement) que la variance des positions des particules d'un traceur n'obéit pas toujours à la loi ci-dessus dans des fluides homogènes ne présentant pas cette anomalie, comme de l'eau par exemple, lorsqu'ils sont le siège d'un champ de vitesse non uniforme à l'échelle macroscopique.

Pensons à un écoulement de Poiseuille de vitesse moyenne v dans un tuyau cylindrique. Taylor [98] a démontré que les déplacements effectués par un traceur sur de petits intervalles de temps t vérifient

$$\langle x^2(t) \rangle = \alpha t^{\frac{1}{2}}$$

pour des durées t appartenant à un intervalle fini, au delà duquel on obtient

$$\langle x^2(t) \rangle = Dt,$$

avec

$$D = D_m + K \left(\frac{vd}{D_m} \right)^2,$$

d étant le diamètre du tuyau.

On voit que l'interaction entre la diffusion de soluté et un champ des vitesses non uniforme a un effet non trivial en termes de transport.

Des expériences ont montré des résultats qui semblent voisins dans certains milieux poreux. Leur interprétation n'est pas simple, le champ des vitesses à l'échelle du pore étant loin d'être unidirectionnelle, même lorsqu'on impose un flux dans une colonne. Des expériences en milieux poreux ont suggéré que [52]

$$\langle x^2(t) \rangle = at^\nu, \quad \nu \neq 1$$

Il faut cependant rester prudent car $\langle x^2(t) \rangle$ n'est pas facile à observer directement. Les mesures concernent souvent des grandeurs reliées à $\langle x^2(t) \rangle$ sur la base d'un modèle. Cependant, on peut considérer la relation ci-dessus comme un guide donnant une première idée des écarts à une situation « normale ». Plutôt que de nous attacher à une relation impliquant $\langle x^2(t) \rangle$ qui, dans certains cas pourrait ne pas être fini, nous préférons vérifier si l'évolution d'un traceur est conforme à l'équation d'advection dispersion. Nous pouvons aussi penser à des expériences de RMN visant à tester un modèle de déplacement utilisant le mouvement Brownien. Lorsqu'une telle démarche montre qu'on n'a pas affaire à de la dispersion normale, il reste à chercher si des modèles alternatifs permettent une meilleure description de la réalité. Nous allons donner une liste non exhaustive de ces modèles en indiquant des circonstances privilégiant l'un ou l'autre.

2.2 Modèles de dispersion anormale

2.2.1 Diffusion anormale : des expériences aux modèles

La diffusion anormale est connue depuis 1926 [81]. Dans la théorie du transport, elle a été étudiée depuis les années 1960. En particulier, son étude théorique a été initiée par Scher et Montroll dans leur description du transport dispersif dans les semiconducteurs amorphes [89]. L'approche de la diffusion anormale par une marche aléatoire en temps continu (CTRW¹ en anglais) généralise le mouvement Brownien et a fourni des explications pour beaucoup de grandeurs physiques et de phénomènes dans de nombreuses réalisations expérimentales [91][17]. Une importante contribution dans ce cadre est due à Weiss [102] et Shlesinger [95]. Outre la description des marches aléatoires, des généralisations de l'équation de la diffusion ont été développées sur la base de modèles du transport anormal.

Actuellement, beaucoup de systèmes montrent des comportements anormaux [2][11][16][90]. Notons quelques cas de la sous-diffusion : outre le trans-

¹Continuous Time Random Walk

port de charge cité plus haut [91], il y a les milieux poreux [101][29] ou la dynamique d'une bille dans un réseau polymérique [3][7].

La diffusion anormale avec ou en absence d'un champ de vitesse (ou champ de force) externe a été modélisée de plusieurs façons, notons (i) le mouvement brownien fractionnaire de Mandelbrot [57][33], (ii) l'équation de la diffusion généralisée [72], (iii) la marche aléatoire en temps continu (CTRW) [47][91][17][90][16][88], (iv) l'équation de Langevin [93][36], (v) l'équation de Langevin généralisée [67][100], (vi) l'équation maîtresse généralisée [46]. Pour la diffusion anormale, les approches (iii) et (v) tiennent compte de la mémoire du système et semblent correspondre à des comportements de la densité de traceur réellement observés en milieux poreux. L'inconvénient de la CTRW et de l'équation maîtresse généralisée c'est qu'il n'y a aucun moyen simple d'intégrer des champs de force extérieures aux conditions aux limites.

Une approche alternative de la diffusion anormale est l'utilisation d'équations différentielles fractionnaires. Cette approche semble bien adaptée pour tenir compte des effets de mémoire qui semblent observés dans de nombreux systèmes complexes. De plus, elle permet d'inclure plus ou moins facilement des conditions aux limites et des forces extérieures. Le modèle le plus simple utilisé pour la dispersion provient des lois expérimentales de Fick et de la conservation de la masse. La probabilité $P(x, t)$ de trouver une particule en position x à l'instant t dans ce cas suit alors l'équation advection-dispersion (ADE) suivant

$$\partial_t P(x, t) = \nabla \cdot [D \nabla P(x, t) - v P(x, t)] \quad (2.1)$$

où D représente la diffusivité alors que v est la vitesse moyenne à l'échelle macroscopique. Ce modèle s'applique dans les fluides homogènes, on l'utilise aussi en milieu poreux saturé, dit homogène. Dans certains milieux très hétérogènes (nous pensons surtout à des milieux poreux naturels), les particules se propagent comme si un champ de vitesse très désordonné à petite échelle pouvait les mener rapidement plus loin que ce que le modèle ADE ne peut prévoir [59] [107]. Dans d'autres milieux poreux, on a plutôt l'impression que les particules peuvent se retrouver piégées par la matrice solide. Ces particules peuvent être relâchées (ou non) à des temps ultérieurs suffisamment tardifs pour modifier le régime de la décroissance de la concentration de la masse dispersée. Ce scénario peut être désigné par le terme d'effet de mémoire, dans le sens où l'historique (ou le passé) de la dispersion agit sur la dynamique en cours d'observation. Des observations [13] [1] [18] montrent une asymétrie et une trainée importante de la densité $P(x, t)$ de traceur. Ces observations ne sont pas compatibles avec le modèle ADE [15] [16]. Ce comportement a été observé dans les colonnes insaturées [21] [22] comme sur la figure (2.1). Cette figure montre deux courbes de percée, mesurées en sortie de deux colonnes de longueurs différentes, afin de vérifier que ce n'est pas la longueur de la colonne qui est responsable de la

trainée. Notons que d'autres auteurs n'ont pas constaté de telles défaillances de la loi de Fick : c'est le cas de Nutzmann par exemple [71]. Alors que dans [74], Padilla a montré que la teneur en eau influence les flux lors de l'infiltration dans des conditions insaturés, les données de Bromly [21] montrent différentes valeurs de la teneur en eau et de la vitesse moyenne qui n'ont pas de relation précise avec l'exposant du comportement asymptotique de la courbe de percée. Par ailleurs, ces flux dépendent fortement du domaine occupé par fluide [73], et donc du passé du milieu (drainage ou imbibition) [10] [83] .

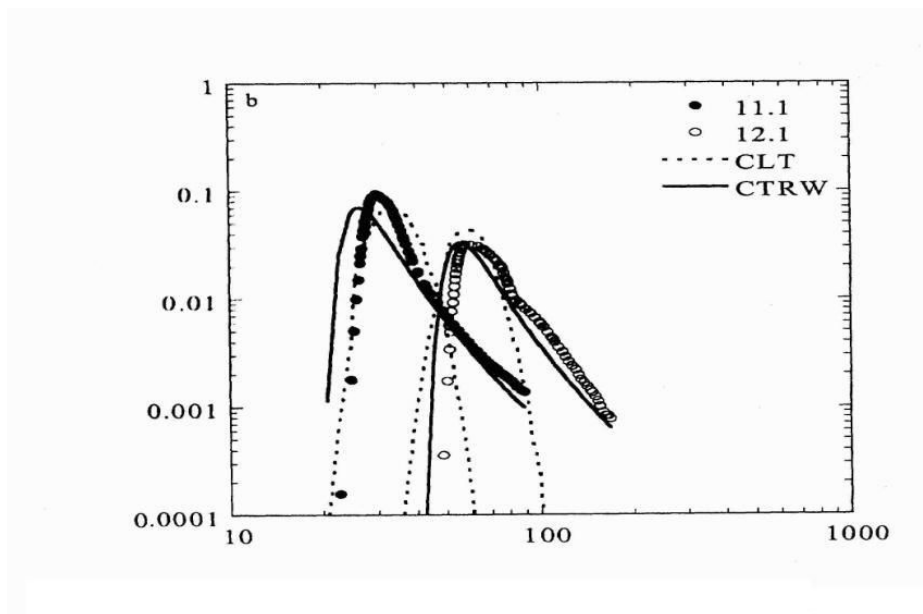


FIG. 2.1: Courbe de percée tracée en coordonnées logarithmiques, montrant la concentration mesurée (symbole) à la sortie de colonnes de différentes longueurs. Les lignes continues représentent la densité obtenue par des modèles donnant une loi de puissance pour la densité de probabilité [21].

Les courbes de percée montrant un tel comportement (décroissance en puissance du temps) sont mal décrites par l'équation (2.1). L'introduction de la notion de phase mobile et immobile [99] (Modèle Immobile Mobile equation (2.3)) dans la représentation du fluide a permis d'inclure les effets des zones de stagnation dans les milieux poreux. Ce modèle a été utilisé pendant trois décennies pour étudier la convection et la dispersion dans les milieux poreux et en particulier dans l'environnement. Le modèle est basé sur l'idée que le déplacement du traceur se divise en deux phases, une phase mobile et une phase immobile, et les déplacements (forcément dans la phase mobile) suivent la loi de Fick. La matière est échangée entre les deux phases selon une cinétique de premier ordre. Bien qu'il ait permis d'importants progrès, ce modèle n'inclut pas la décroissance en puissance du temps de la courbe de percée de la figure (2.1). Les

longues trainées décroissant comme des puissances de temps sont mieux décrites par une version améliorée sur le base de données et de suggestions de Haggerty [42].

La section suivante rapelle le principe du modèle MIM. Nous passerons ensuite à la version fractionnaire.

2.2.2 Le modèle MIM classique

Le modèle MIM a été développé par Coats et Smith [27] pour le génie pétrolier, ensuite le modèle a été adapté par Van Genuchten et Wierenga [99] pour les sols et par beaucoup d'autres parmi lesquels Gaudet et al. [37] qui ont étudié les milieux poreux insaturés.

Le modèle est basé sur l'existence dans ces milieux de pores en cul de sac, donc de zones stagnantes. Cette idée revient à considérer qu'une fraction de traceur est à l'état immobile cependant qu'une autre fraction est à l'état mobile. De plus ces deux fractions échangent continuellement de la matière. On parle aussi, dans les mêmes conditions, de modèle à double milieu. Il s'agit en fait du même modèle, qui équivaut à considérer le milieu poreux comme la superposition de deux continua de porosités et de comportements différents : une de ces régions appelée macroporosité, permet l'écoulement du soluté, l'autre région, la microporosité est une zone de stagnation du fluide. La principale conséquence de ce concept de deux phases est la nécessité de considérer que la probabilité de trouver une particule donnée de contaminant au voisinage du point x , à l'instant t , se décompose en la probabilité de trouver cette particule mobile et la probabilité de trouver cette même particule immobile.

En notant respectivement P , P_m et P_{im} les densités correspondantes, on a alors

$$P = P_m + P_{im} \quad (2.2)$$

Une autre implication du concept du MIM est la nécessité de modéliser les échanges entre la phase immobile et la phase mobile. Dans le cadre du modèle MIM classique, ceci est fait en considérant une cinétique du premier ordre entre les particules mobiles et immobiles. En admettant que la dispersion dans la fraction mobile obéit à l'équation d'advection-dispersion (2.2), le modèle MIM est formulé de la manière suivante :

$$\partial_t [P_m(x, t) + P_{im}(x, t)] = \nabla \cdot [D \nabla P(x, t) - vP(x, t)] + r(x, t), \quad (2.3)$$

avec

$$\partial_t P_{im}(x, t) = \omega [KP_m(x, t) - P_{im}(x, t)] \quad (2.4)$$

où D, v et r représentent respectivement le coefficient de dispersion, la vitesse d'advection et un terme source. Le paramètre ω est le coefficient d'échange entre les phases mobile et immobile. Ceci permet aussi d'écrire une relation entre les densités de probabilités P_m et P_{im} des populations mobiles et immobiles sous la forme

$$\begin{cases} P_m = K\omega \exp(-\omega t) * P_{im} \\ P_{im} = (Id + \exp(-\omega t) * K\omega) P_m \end{cases} \quad (2.5)$$

où $*$ désigne un opérateur de convolution (temporelle). A partir des équation (2.2) et (2.5), on peut donner au modèle MIM une forme proche du modèle ADE ci-dessus (équation (2.1)).

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x (D \partial_x \mathcal{H} P(x, t) - v \mathcal{H} P(x, t)) + r(x, t). \quad (2.6)$$

Dans cette équation l'opérateur \mathcal{H} est défini par

$$\mathcal{H} = (Id + K\omega \cdot \exp(-\omega t) *)^{-1}, \quad (2.7)$$

où Id est l'opérateur identité.

2.2.3 L'équation de Fokker-Planck fractionnaire

L'équation de Fokker-Planck représente à l'échelle macroscopique le mouvement Brownien avec un champ de force extérieur. Ce modèle de Fokker-Planck classique lui aussi est inadapté pour représenter la diffusion anormale. Pour décrire le transport anormal avec un champ de force extérieure, Metzler et Klafter [63] ont introduit à la suite de Zaslavsky [105], une version fractionnaire en temps de l'équation de Fokker-Planck (TFFPE²). Elle s'écrit

$$\partial_t P(x, t) = D_{0,+}^{1-\gamma} \left(\partial_x F(x) + D_\gamma \frac{1}{2} \partial_x^2 \right) P(x, t), \quad (2.8)$$

où $D_{0,+}^{1-\gamma}$ est la dérivée fractionnaire au sens de Riemann-Liouville par rapport au temps (voir annexe B), D_γ le coefficient de diffusion anormale de dimension $\frac{L^2}{T^\gamma}$ avec $0 < \gamma < 1$ et $F(x)$ est une force extérieure. Cette équation permet de modéliser la sous diffusion. Nous l'utiliserons sous la forme

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x^2 D_\gamma D_{0,+}^{1-\gamma} P(x, t) - \partial_x v D_{0,+}^{1-\gamma} P(x, t), \quad (2.9)$$

qui représente la diffusion dans un champ de vitesse moyenne v , mais sans force extérieure.

²Time Fractional Fokker-Planck Equation

2.3 Du modèle stochastique à la dérivée d'ordre non entier

Le modèle MIM original (équations 2.3 - 2.4) est construit sur l'idée que dans les milieux poreux, les traceurs peuvent s'arrêter temporairement dans des sites immobiles liés à la matrice solide. La version fractionnaire du modèle, le MIM fractal (f-MIM) a été proposée par Schumer [92] pour représenter de longues trainées des courbes de percée observées sur des données de terrain, et qui sont incompatibles avec l'ADE mais aussi avec le MIM. Cette version est bien adaptée pour capter les longues trainées des courbes de percée. Elle correspond à des données qui ressemblent aux temps courts aux solutions de l'ADE ci-dessus, et qui pour cette raison ne peuvent pas être décrites par l'équation de Fokker Planck fractionnaire. Le modèle f-MIM s'écrit sous la forme de l'équation (2.6), l'opérateur \mathcal{H} étant cette fois-ci défini par

$$\mathcal{H} = \left(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} \right)^{-1}. \quad (2.10)$$

Dans cette expression, $I_{0,+}^{1-\gamma}$ représente une intégrale fractionnaire d'ordre $1 - \gamma$, sa définition est donnée dans l'annexe B.

Le modèle f-MIM s'écrit aussi de la façon suivante :

$$(\partial_t + \lambda \partial_t^\gamma)P(x, t) = \nabla \cdot (D \nabla - v)P(x, t). \quad (2.11)$$

Ici ∂_t^γ représente une dérivée fractionnaire d'ordre γ dite de Caputo, en fait c'est $\partial_t I_{0,+}^{1-\gamma}$. Le modèle fractionnaire (2.11) est similaire à l'équation d'advection dispersion (ADE) mais comporte une dérivée d'ordre fractionnaire [107] [92] [79]. Toutes ces équations peuvent être étroitement associées à des marches au hasard.

En effet, l'ADE tout d'abord représente l'évolution de la densité de probabilité d'une population de particules se déplaçant suivant un mouvement Brownien dans un champ de vitesse v uniforme. Or le mouvement Brownien peut être approché en faisant effectuer aux particules une marche aléatoire faite d'une succession de sauts instantanés X_1, \dots, X_n régulièrement répartis dans le temps et d'amplitudes distribuées par la loi normale.

Pour des marches aléatoires accumulant comme ci-dessus des sauts indépendants séparés par des intervalles de temps qui suivent une loi stable d'exposant γ , la limite hydrodynamique est obtenue en faisant tendre une longueur caractéristique de la marche et une échelle de temps simultanément vers zéro. D'après [107] [61] [86], la densité des particules vérifie alors une edp incluant

des dérivées d'ordre non-entier qui sont non-locales en temps [84] [38]. On obtient ainsi la version suivante, simplifiée, de l'équation de Fokker-Planck fractionnaire (FFPE) [8],

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x^2 D_\gamma D_{0,+}^{1-\gamma} P(x, t). \quad (2.12)$$

On peut aussi tenir compte d'une vitesse d'advection v , et on a alors

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x^2 D_\gamma D_{0,+}^{1-\gamma} P(x, t) - \partial_x \left(v D_{0,+}^{1-\gamma} P(x, t) \right). \quad (2.13)$$

En modifiant légèrement la marche au hasard, on peut aboutir à (2.11). Pour cela, il faut modifier la durée des étapes successives : on impose des étapes se décomposant chacune en une sous étape mobile de durée τ suivie d'une sous étape immobile de durée $(\Lambda\tau)^{1/\gamma}W$. Ici W représente une variable aléatoire stable complètement dissymétrique d'exposant de stabilité $\gamma < 1$. Cette notion sera précisée au chapitre 3. De plus, on impose aux sauts gaussiens d'être distribués comme $\sqrt{2D\tau}N$, N étant une variable aléatoire normale. Quand $\tau \rightarrow 0$ la densité d'une telle marche au hasard tend à vérifier (2.11) [12] [107] [92]. Les solutions de ces deux équations (2.11) et (2.13) ont le même comportement asymptotique. Elles diffèrent cependant aux temps courts ainsi qu'aux temps intermédiaires.

Tous ces différents types d'edp qui sont eux mêmes limites hydrodynamiques de marches au hasard correspondent donc à des processus stochastiques associés à des sauts gaussiens indépendants séparés par des intervalles de temps aléatoires.

Une équation telle que (2.11) est en fait une équation de conservation, à condition d'écrire les flux sous la forme de :

$$\begin{aligned} Flux &= -\nabla \left(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma} \right)^{-1} P(x, t) + v \left(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma} \right)^{-1} P(x, t) \\ &= -\nabla P_m + v P_m. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ses solutions peuvent être comparées aux données expérimentales obtenues à l'échelle macroscopique sous forme de concentration de traceur. Pour les équations comme celle ci, des outils de simulation numérique sont disponibles [39] [28] [96] et des résultats mathématiques montrent le comportement des solutions [5] [59]. Un schéma numérique basé sur une formulation conservative de (2.11) s'adapte même à des cas plus généraux [58]. Une simulation directe de la marche aléatoire par la méthode de Monte Carlo permet également d'illustrer les expériences.

2.4 Conclusion

De nombreuses observations de la dispersion de traceur montrent des comportements qualitativement différents de la diffusion normale, et les écarts peuvent être significatifs. Ces observations montrent l'insuffisance de la loi de Fick et la nécessité de rechercher de nouveaux modèles comme par exemple le MIM classique, l'équation de Fokker Planck fractionnaire ou le f-MIM. Ces modèles ont été rapidement énumérés dans ce chapitre. Ils permettent de tenter de représenter les observations du transport anormal, et les écarts à la loi gaussienne dans les milieux poreux. A part le modèle MIM classique qui n'est pas une edp fractionnaire, les autres modèles sont des edp avec des opérateurs non locaux en temps. Toutes ces edp représentent l'évolution de la densité du mouvement Brownien subordonné. Ces mouvements subordonnés sont tous obtenus à partir de processus de Lévy. D'autre part, le mouvement Brownien est un cas particulier de processus de Lévy.

Le chapitre suivant est dédié au processus de Lévy et à la subordination qui est un outil important pour la suite de notre travail.

Chapitre 3

Processus de Lévy et subordonateurs

Sommaire

3.1 Les lois infiniment divisibles	20
3.1.1 Définition	20
3.1.2 Exemples	20
3.2 La formule de Lévy-Khintchine	22
3.3 Les lois α-stables	22
3.3.1 Définition	23
3.3.2 Densité et fonction caractéristique	25
3.3.3 Condition nécessaire et suffisante de stabilité	27
3.3.4 Comportement asymptotique	29
3.3.5 Moments	29
3.4 Processus de Lévy	30
3.4.1 Définition	30
3.4.2 Processus stable	32
3.4.3 Exemples	32
3.5 Subordonateurs	33
3.5.1 Autre exemple	34

Nous présentons dans ce chapitre les notions de processus de Lévy et de subordination, toutes deux utiles pour représenter le transport anormal. Comme nous l'avons dit au chapitre précédent, les observations du transport anormal sont souvent bien représentées par des mouvements Browniens subordonnés. Or, une vaste classe de mouvements Browniens subordonnés s'obtient en inversant des processus de Lévy. Déjà au chapitre 2 nous avons évoqué la notion de loi stable de Lévy, qui est à la base de modèles plus généraux que le mouvement Brownien, pour le transport de masse. Bien qu'il y ait d'autres possibilités intéressantes, nous concentrons notre attention sur des processus stochastiques liés

à des lois stables. Cette restriction conduit à un ensemble encore très riche, qui fournit une grille de lecture pour traiter une grande variété de données expérimentales.

Nous allons voir que les lois stables sont des lois de probabilité préservées par l'addition, moyennant une renormalisation convenable. Pour cette raison, elles sont utiles aussi bien à petite échelle qu' à grande échelle, en particulier pour des grandeurs physiques qui s'ajoutent. Les premiers exemples sont les déplacements et le temps. D'autre part, ces lois de probabilité ont des propriétés importantes qu'elles partagent avec l'ensemble encore plus vaste des lois infiniment divisibles.

Pour cette raison nous allons rappeler ce que sont les lois infiniment divisible, ensuite nous nous restreindrons aux lois stables. De la même façon, nous dirons quelques mots des processus de Lévy avant de passer au cas particulier des processus stables. Nous nous restreindrons au cas unidimensionnel.

3.1 Les lois infiniment divisibles

3.1.1 Définition

Soit X une variable aléatoire (V.A.) à valeurs dans \mathbb{R} . On dit que la variable aléatoire X est infiniment divisible si, pour tout $n \in \mathbb{N}$, il existe des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, $Y_1^{(n)} + \dots + Y_n^{(n)}$ telles que :

$$X \stackrel{d}{=} Y_1^{(n)} + \dots + Y_n^{(n)}.$$

L'écriture $(\stackrel{d}{=})$ indique que les deux membres sont des V.A. ayant même distribution.

Les V.A. $Y_i^{(n)}$ ci-dessus n'ont pas forcément même loi que X . En revanche, comme nous verrons dans les exemples suivants, elles appartiennent à une même famille.

3.1.2 Exemples

Une des caractérisations des lois infiniment divisibles est que leur fonction caractéristique peut s'écrire comme puissance n -ième d'une autre fonction caractéristique :

- **la loi normale** $\mathcal{N}(m, \sigma^2)$: sa fonction caractéristique s'écrit

$$\begin{aligned}\phi_X(u) &= e^{(imu - \frac{u^2 \sigma^2}{2})} \\ &= \left[e^{(i\frac{m}{n}u - \frac{u^2 \sigma^2}{2n})} \right]^n\end{aligned}$$

comme une puissance n-ième de la fonction caractéristique d'une loi normale $\mathcal{N}(\frac{m}{n}, \frac{\sigma^2}{n})$.

- **la loi de Cauchy** $\mathcal{C}(c)$: sa fonction caractéristique s'écrit

$$\begin{aligned}\phi_X(u) &= e^{(-c|u|)} \\ &= \left[e^{(-\frac{c}{n}|u|)} \right]^n\end{aligned}$$

comme une puissance n-ième de la fonction caractéristique d'une loi de Cauchy $\mathcal{C}(\frac{c}{n})$.

- **la loi de Poisson** $\mathcal{P}(\lambda)$: sa fonction caractéristique s'écrit

$$\begin{aligned}\phi_X(u) &= e^{\lambda(e^{iu} - 1)} \\ &= \left[e^{\frac{\lambda}{n}(e^{iu} - 1)} \right]^n\end{aligned}$$

comme une puissance n-ième de la fonction caractéristique d'une loi de Poisson $\mathcal{P}(\frac{\lambda}{n})$.

Le fait que la loi de Poisson soit une loi infiniment divisible justifie de parler ici des lois infiniment divisibles, parce que nous allons utiliser cette notion plus loin, en relation avec des processus de Poisson.

- **la loi Gamma** $\Gamma(r, \lambda)$: sa fonction caractéristique s'écrit

$$\begin{aligned}\phi_X(u) &= \frac{1}{\left(1 - \frac{iu}{\lambda}\right)^r} \\ &= \left[\frac{1}{\left(1 - \frac{iu}{\lambda}\right)^{\frac{r}{n}}} \right]^n\end{aligned}$$

comme une puissance n-ième de la fonction caractéristique d'une loi Gamma $\Gamma(\frac{r}{n}, \lambda)$.

La loi exponentielle fait partie de la famille de distribution gamma. En effet, quand $r = 1$ et $\lambda = 1/\theta$, la variable aléatoire X suit une loi exponentielle de paramètre θ . Notons que la loi exponentielle est infiniment divisible mais pas stable.

– **contre exemple :**

- une loi à support borné (hormis la distribution de Dirac en un point) n'est pas infiniment divisible,

Les V.A. infiniment divisibles sont caractérisées par leur fonction caractéristique, à l'aide de la formule de Lévy-Khintchine.

3.2 La formule de Lévy-Khintchine

Théorème 1 (Formule de Lévy-Khintchine). *Soit X une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{R} . Alors X est infiniment divisible s'il existe $b \in \mathbb{R}$, un réel a positif ou nul et une mesure de Lévy ν tels que*

$$\forall u \in \mathbb{R}, \quad \phi_X(u) = \exp \left(i(b, u) - \frac{1}{2}au^2 + \int_{\mathbb{R} \setminus \{0\}} (e^{i(u, z)} - 1 - i(u, z)\mathbb{1}_{\{|z| \leq 1\}})\nu(dy) \right). \quad (3.1)$$

Réciproquement, toute application de la forme ci-dessus est la fonction caractéristique d'une VA infiniment divisible sur \mathbb{R} .

Si X est infiniment divisible, on peut donc écrire

$$\phi_X(u) = e^{\eta(u)},$$

où η est de la forme

$$\eta(u) = i(b, u) - \frac{1}{2}au^2 + \int_{\mathbb{R} \setminus \{0\}} \left(e^{i(u, z)} - 1 - i(u, z)\mathbb{1}_{\{|z| \leq 1\}} \right) \nu(dy).$$

La fonction η est appelé le symbole de Lévy de X . On parle aussi d'exposant Log-caractéristique.

Pour se rapprocher du théorème de la limite centrale et afin d'avoir une forme explicite de la fonction caractéristique, nous allons définir une famille de lois dont les propriétés sont centrales pour nous.

3.3 Les lois α -stables

Il s'agit des lois stables qui appartiennent à l'ensemble des lois infiniment divisibles. Après avoir rappelé leur définition, nous allons donner leurs principales propriétés.

3.3.1 Définition

Une variable aléatoire X a une distribution stable si et seulement si pour tout entier k et toute famille X_1, \dots, X_k de variables indépendantes et identiquement distribuées, de même loi que X , il existe $a_k > 0$ et b_k , deux réels, tels que

$$X_1 + \dots + X_k \stackrel{d}{=} a_k X + b_k.$$

Lorsque $b_k = 0$, la distribution est dite strictement stable.

Remarque : On peut alors montrer qu'il existe une constante α ($0 < \alpha < 2$), telle que $a_k = k^{1/\alpha}$ pour $k \in \mathbb{N}^*$. La démonstration est détaillée dans Feller [34] (pages 170-171).

Proposition 3.3.1. *Si X suit une loi stable, alors X est infiniment divisible.*

La réciproque est fautive (voir l'exemple ci-dessus, la loi de Poisson).

Théorème 2. *Pour une suite de variables aléatoires X_n comme ci-dessus. Une variable aléatoire X est la limite en distribution (quand $n \rightarrow \infty$) des variables aléatoires $\frac{X_1, \dots, X_n - b_n}{a_n}$, $a_n > 0$, si et seulement si X est stable.*

La démonstration de ce théorème est détaillée dans Shiryaev (page 338 - 339) [94].

En effet, la somme d'un grand nombre de copies indépendantes de X tend à se rapprocher d'une variable aléatoire stable lorsque le nombre augmente, d'après le résultat suivant [35] [60] :

Théorème 3. *Soient X_1, X_2, \dots, X_n une suite de variables aléatoires indépendantes distribuées selon la loi de la variable X . Il existe une variable aléatoire Z stable d'exposant de stabilité α et deux suites réelles (a_n) et (b_n) telles que*

$$\frac{X_1, \dots, X_n - b_n}{a_n}$$

converge en probabilité vers Z . Ceci signifie que pour chaque $\epsilon > 0$

$$P \left(\left| \frac{X_1, \dots, X_n}{a_n} + b_n - Z \right| > \epsilon \right) \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad n \rightarrow \infty$$

Une loi stable est définie par quatre paramètres :

- α : indice de stabilité (paramètre principal) $0 < \alpha \leq 2$. Il caractérise les queues de la distribution. Plus α diminue, plus les queues sont lourdes (voir figure (3.1)). C'est pourquoi on parle aussi de lois α -stables. Notons aussi que quand $\alpha < 1$ la moyenne de la distribution devient infinie. Ce paramètre ne caractérise pas que les queues des distributions. Il correspond aussi aux a_k de la définition 3.3.1, on a :

$$a_k = k^{1/\alpha}$$

- μ : paramètre de position. Il caractérise la moyenne de la loi lorsqu'elle est finie, c'est à dire lorsque $\alpha > 1$.
- σ : paramètre de dispersion (ou paramètre d'échelle). Par exemple, c'est la moitié de la variance dans le cas où $\alpha = 2$
- β : paramètre de symétrie $-1 \leq \beta \leq 1$. Si $\beta = 0$, la loi est symétrique par rapport au paramètre μ . Si de plus, $\mu = 0$, la loi est dite symétrique α -stable. Dans le cas où $\beta = -1$ sauf pour $\alpha = 2$ ou ceci n'a plus de sens, on dit que la distribution est totalement asymétrique à gauche, et si $\beta = 1$ on dit que la distribution est totalement asymétrique à droite. La figure (3.4) ci-dessous montre l'influence du paramètre β sur la densité de probabilité.

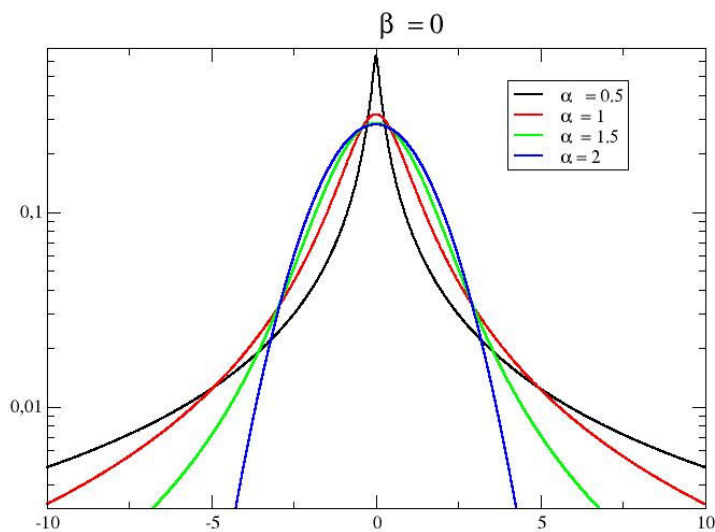


FIG. 3.1: Densité de probabilité d'une loi α -stable symétrique ($\beta = 0$), en coordonnées semi-logarithmiques qui montre la variation de la queue de la distribution en fonction de la valeur de α

Par convention, $S_\alpha(\mu, \beta, \sigma)$ représente une loi stable de paramètres $\alpha, \mu, \sigma, \beta$ et on note souvent $S\alpha S(\sigma)$ une loi symétrique α -stable de paramètre σ .

3.3.2 Densité et fonction caractéristique

Pour de nombreuses lois de probabilités, nous avons une forme explicite de la densité (normale, Cauchy, gamma,...). Cependant, on sait en général seulement expliciter la fonction caractéristique d'une loi stable.

Fonction caractéristique

Si X est une variable aléatoire α -stable, la fonction caractéristique admet la forme suivante :

$$\phi_X(u) = \begin{cases} \exp\left(i\mu u - \sigma^\alpha |u|^\alpha \left[1 + i\beta \operatorname{sign}(u) \tan \frac{\pi\alpha}{2} (|\sigma u|^{1-\alpha} - 1)\right]\right) & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \exp\left(i\mu u - \sigma |u| \left[1 + i\beta \frac{2}{\pi} \operatorname{sign}(u) (\ln(|u|) + \ln(\sigma))\right]\right) & \text{si } \alpha = 1 \end{cases} \quad (3.2)$$

Les densités des lois stables n'ont en général pas d'expression explicite. On sait par contre en donner des formulations intégrales, déduites de cette relation, et qui servent à les calculer.

Remarquons que lorsque $\beta = 0$ on a une loi symétrique. C'est faux pour $\beta \neq 0$ sauf si $\alpha = 2$ car alors $\tan \frac{\pi\alpha}{2} = 0$. Ce cas limite correspond à la loi normale.

Forme analytique de la densité de probabilité

La densité de probabilité des variables aléatoires stables existe et est en général une fonction continue, bien qu'à quelques exceptions près, aucune forme analytique ne soit connue. Toutes fois Nolan [69] a obtenu des formulations similaires à celles de Zolotarev [108], utilisant une représentation intégrale de la densité de probabilité et de la fonction de répartition des variables aléatoires stables. Cette représentation intégrale s'écrit à l'aide des fonctions auxiliaires suivantes :

$$\zeta = \zeta(\alpha, \beta) = \begin{cases} -\beta \tan \frac{\alpha\pi}{2} & \text{si } \alpha \neq 1 \\ 0 & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

$$\Theta_0 = \Theta_0(\alpha, \beta) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} \arctan\left(\beta \tan \frac{\alpha\pi}{2}\right) & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \frac{\alpha}{2} & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

$$c_1 = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \Theta_0 \right) & \text{pour } \alpha < 1 \\ 0 & \text{si } \alpha = 1 \\ 1 & \text{si } \alpha > 1 \end{cases}$$

$$V(\Theta, \alpha, \beta) = \begin{cases} (\cos \alpha \Theta_0)^{\frac{1}{\alpha-1}} \left(\frac{\cos \Theta}{\sin \alpha(\Theta_0 + \Theta)} \right)^{\frac{\alpha}{\alpha-1}} \frac{\cos(\alpha(\Theta_0 + (\alpha-1)\Theta))}{\cos \Theta} & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \left(\frac{2}{\pi} \left[\frac{\frac{\pi}{2} + \beta \Theta}{\cos \Theta} \right] \right) + \exp \left(\frac{1}{\beta} \left(\frac{\pi}{2} + \beta \Theta \right) \tan \Theta \right) & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

Avec ces notations, le théorème suivant [19] permet le calcul numérique de la densité d'une loi stable quelconque.

Théorème 4. Si X suit la loi $S_\alpha(1, \beta, 0)$ alors la densité f et la fonction de répartition F de X sont données par :

1. Si $\alpha \neq 1$ et $x > \zeta$

$$f(x; \alpha, \beta) = \frac{\alpha(x - \zeta)^{\frac{1}{\alpha-1}}}{\pi|\alpha - 1|} \int_{-\Theta_0}^{\frac{\pi}{2}} V(\Theta, \alpha, \beta) \exp \left(-(x - \zeta)^{\frac{\alpha}{\alpha-1}} V(\Theta, \alpha, \beta) \right) d\Theta,$$

et

$$F(x; \alpha, \beta) = c_1(\alpha, \beta) + \frac{\text{sign}(1 - \alpha)}{\pi} \int_{-\Theta_0}^{\frac{\pi}{2}} \exp \left(-(x - \zeta)^{\frac{\alpha}{\alpha-1}} V(\Theta, \alpha, \beta) \right) d\Theta.$$

2. Si $\alpha \neq 1$ et $x = \zeta$

$$f(x; \alpha, \beta) = \frac{\Gamma(1 + \frac{1}{\alpha}) \cos \Theta_0}{\pi (1 + \zeta^2)^{\frac{1}{2\alpha}}}$$

et

$$F(x; \alpha, \beta) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \Theta_0 \right)$$

3. Si $\alpha \neq 1$ et $x < \zeta$

$$f(x; \alpha, \beta) = f(-x; \alpha, -\beta)$$

et

$$F(x; \alpha, \beta) = 1 - F(-x; \alpha, -\beta)$$

4. Si $\alpha = 1$

$$f(x; 1, \beta) = \begin{cases} \frac{1}{2|\beta|} e^{-\frac{\pi x}{2\beta}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} V(\Theta, 1, \beta) \exp \left(-e^{-\frac{\pi x}{2\beta}} V(\Theta, 1, \beta) \right) d\Theta, & \text{pour } \beta \neq 0 \\ \frac{1}{\pi(1+x^2)} & \text{pour } \beta = 0, \end{cases}$$

et

$$F(x; \alpha, \beta) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \exp L \text{ distribution stable introduit par Levy comme un troisieme exemple} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan(x) & \text{pour } \beta = 0, \\ 1 - F(x; 1, -\beta) & \text{pour } \beta < 0. \end{cases}$$

La démonstration du théorème est donnée dans [70].

C'est seulement dans les trois cas suivants que la densité d'une loi α -stable est donnée par une formule.

1. La loi normale : $S_2(\sigma, \beta, \mu)$ de densité

$$f(x) = \frac{1}{2\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{4\sigma^2}\right) \quad -\infty \leq x \leq +\infty.$$

2. La loi de Cauchy : $S_1(1, 0, \mu)$ de densité

$$f(x) = \frac{\sigma}{\pi((x-\mu)^2 + \sigma^2)} \quad -\infty \leq x \leq +\infty.$$

3. La loi de Lévy : $S_{1/2}(\sigma, 1, \mu)$ de densité

$$f(x) = \frac{\sigma}{2\pi} \frac{1}{(x-\mu)^{3/2}} \exp\left(\frac{-\sigma^2}{2(x-\mu)}\right) \quad \mu \leq x \leq +\infty.$$

Les figures (3.2) et (3.4), déduites du théorème 4, représentent l'allure des densités des lois stables.

3.3.3 Condition nécessaire et suffisante de stabilité

Pour $\alpha \neq 1$, nous avons l'équivalence suivante, soit X une V.A. qui suit une loi $S_\alpha(1, \beta, 0)$ alors $Y = \sigma X + \mu$ suit une loi $S_\alpha(\sigma, \beta, \mu)$. Dans le cas où $\alpha = 1$, on passe à une V.A. Y de distribution $S_\alpha(\sigma, \beta, \mu)$ en utilisant la relation $Y = \sigma X + \frac{2}{\pi} \sigma \log \sigma + \mu$.

Pour la simulation (voir annexe (A), il suffit de générer des lois $S_\alpha(0, \beta, 1)$ et par changement de variable, nous pouvons obtenir une V.A. qui suit la loi $S_\alpha(\mu, \beta, \sigma)$.

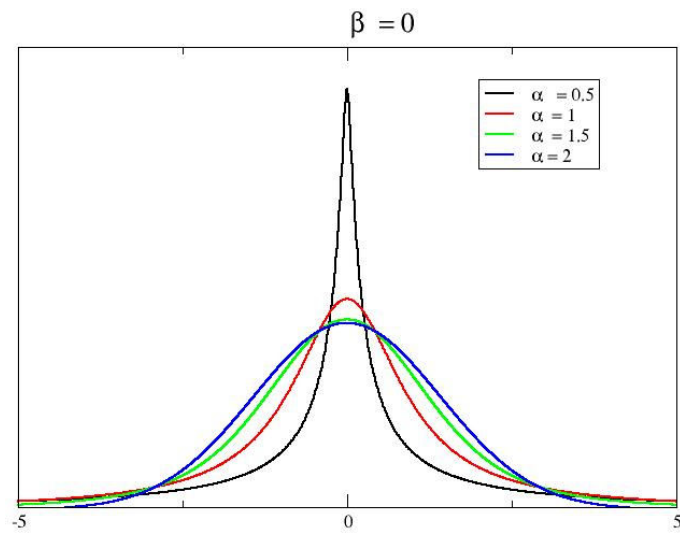


FIG. 3.2: Densité de probabilité d'une loi α -stable symétrique ($\beta = 0$).

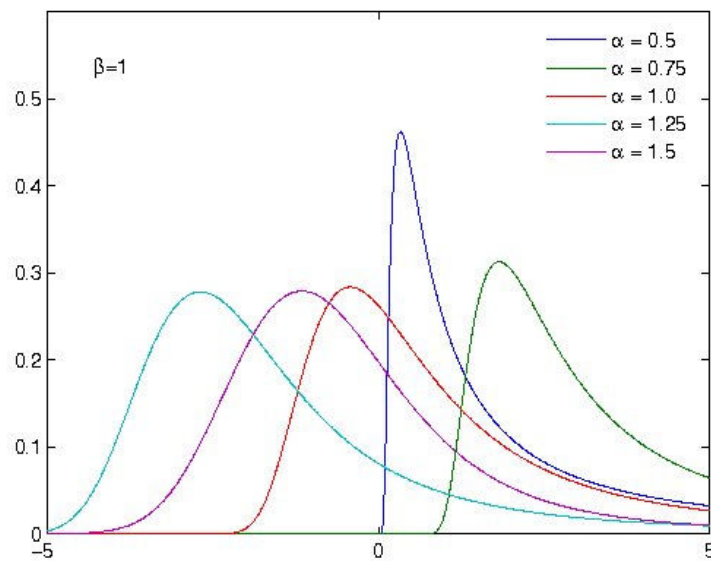


FIG. 3.3: Densité de probabilité d'une loi α -stable asymétrique ($\beta = 1$).

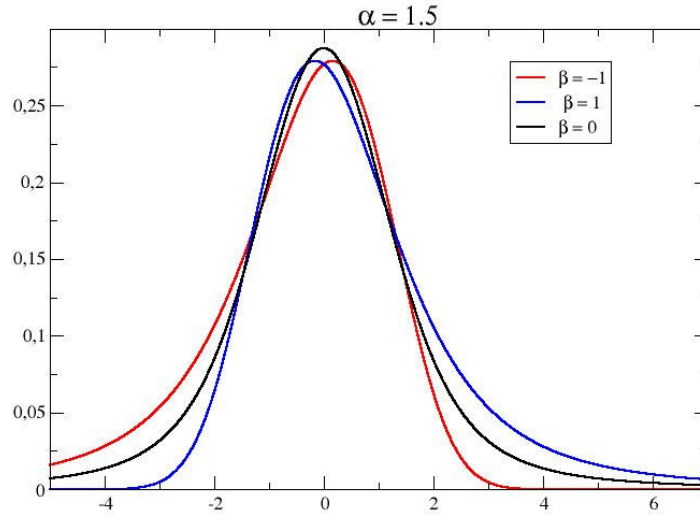


FIG. 3.4: Densité de probabilité d'une loi α -stable asymétrique avec différentes valeurs de β .

3.3.4 Comportement asymptotique

Les lois α -stables ont des densités qui se comportent asymptotiquement comme des puissances.

Soit X une VA qui suit une loi α -stable $S_\alpha(\mu, \beta, \sigma)$, on a les deux résultats suivants [97] [62]

$$\begin{cases} \lim_{u \rightarrow +\infty} u^\alpha \mathbb{P}(X > u) = \sigma C(\alpha) \frac{1 + \beta}{2} \\ \lim_{u \rightarrow +\infty} u^\alpha \mathbb{P}(X < -u) = \sigma C(\alpha) \frac{1 - \beta}{2} \end{cases}$$

où $C(\alpha) = \left(\int_0^{+\infty} x^{-\alpha} \sin x dx \right)^{-1}$.

La démonstration est détaillée dans Samorodnitsky et Taqqu [85] (page 16-18).

Sauf la loi normale, les lois stables n'ont pas de moments finis au delà de l'ordre 2.

3.3.5 Moments

Si X suit une loi $S_\alpha(\mu, \beta, \sigma)$, alors

1. Si $\alpha = 2, \forall p, \mathbb{E}|X|^p < +\infty,$
2. Si $0 < \alpha < 2, \begin{cases} \forall 0 \leq p < \alpha, \mathbb{E}|X|^p < +\infty, \\ \forall p \geq \alpha, \mathbb{E}|X|^p = +\infty, \end{cases} .$

Remarques :

1. Dès que α est strictement inférieur à 2, la variance d'une loi α -stable est infinie. Dès que α est strictement inférieur à 1, c'est la moyenne qui devient infinie.
2. Si α est plus grand que 1, la moyenne d'une loi α -stable est μ .

La démonstration de cette relation se trouve dans le rapport de Hardin en 1984 [43].

Un algorithme de simulation de la loi α -stable est décrit dans l'annexe A.

La position à un instant donné d'une particule suivant le mouvement Brownien est décrite à l'aide de la loi normale. Il en est de même pour les processus stables à condition d'utiliser les lois stables. Ils font partie de la classe plus vaste des processus de Lévy. Or les processus stables permettent de représenter les mouvements individuels dans le cadre de la dispersion anormale.

3.4 Processus de Lévy

Un processus stochastique $X = (X_t)_{t \in T}$ est une famille de variables aléatoires X_t indexée par un ensemble T . En général $T = \mathbb{R}$ ou \mathbb{R}_+ et on considère que le processus est indexé par le temps t . Si T est un ensemble fini, le processus est un vecteur aléatoire. Si $T = \mathbb{N}$ alors le processus est une suite de variables aléatoires. Plus généralement quand $T \subset \mathbb{Z}$, le processus est dit discret.

Soit $X = (X_t; t \geq 0)$ un processus stochastique défini sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. On dit que X est à accroissements indépendants, si pour tout $n \in \mathbb{N}^*$ et pour tous $0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n < \infty$, les VA $\{X_{t_{j+1}} - X_{t_j}; 1 \leq j \leq n - 1\}$ sont indépendantes. On dit que X est à accroissements stationnaires, si pour tous $t, s > 0$, la VA $X_{t+s} - X_s$ a même loi que $X_t - X_0$ [49].

3.4.1 Définition

On dit que X est un processus de Lévy (issu de 0) si :

1. $X_0 = 0$ presque sûrement,
2. X est à accroissements indépendants et stationnaires,

3. X est stochastiquement continu : pour tout $\epsilon > 0$ et $t \geq 0$:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \mathbb{P}(|X_{t+h} - X_t| > \epsilon) = 0.$$

Les processus de Lévy sont liés aux lois infiniment divisibles.

Proposition 3.4.1. *Si X est un processus de Lévy, alors pour chaque $t \geq 0$, X_t est distribué par une loi infiniment divisible.*

La fonction caractéristique $\langle e^{iuX_t} = \phi_{X_t}(u) \rangle$, d'un processus de Lévy a une forme bien particulière, qui se rattache à celle d'une loi infiniment divisible.

Théorème 5. *Si X est un processus de Lévy unidimensionnel, alors*

$$\forall u \in \mathbb{R}, \quad \phi_{X_t}(u) = e^{t\eta(u)}$$

où η est le symbole de Lévy de X_1 .

Donc la formule de Lévy-Khintchine donne aussi la fonction caractéristique d'un processus de Lévy.

Théorème 6 (Formule de Lévy-Khintchine pour les processus de Lévy). *Soit X un processus de Lévy. Alors, il existe $b \in \mathbb{R}$, a un réel positif ou nul et une mesure de Lévy ν tels que $\forall u \in \mathbb{R}, \forall t \geq 0$*

$$\mathbb{E}[e^{i(u, X_t)}] = \exp \left(t \left[i(bu) - \frac{1}{2}au^2 + \int_{\mathbb{R} \setminus \{0\}} (e^{i(u, z)} - 1 - i(u, z)\mathbb{1}_{\{|z| \leq 1\}}) \nu(dy) \right] \right). \quad (3.3)$$

L'ensemble des processus de Lévy est stable par passage à la limite.

Proposition 3.4.2. *Si $X = (X_t; t \geq 0)$ est un processus stochastique et s'il existe une suite $(X^n = (X_t^n; t \geq 0))_n$ de processus de Lévy telle que :*

1. X_t^n converge en probabilité vers x_t pour tout $t \geq 0$,
2. pour tout $\epsilon > 0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} \limsup_{t \rightarrow 0} \mathbb{P}(|X_t^n - X_t| > \epsilon) = 0$,

alors X est un processus de Lévy.

Parmi les processus de Lévy, les processus stables forment un cas particulier important

3.4.2 Processus stable

Les processus stables sont des processus de Lévy particuliers, associés à des lois stables. Nous avons vu que pour chaque processus de Lévy, la variable aléatoire X_t a une distribution infiniment divisible. Les processus stables correspondent au cas particulier où cette distribution est stable.

On en déduit que pour le processus de Lévy unidimensionnel X_t le plus général, il existe une loi stable $S_\alpha(\mu, \beta, \sigma)$ telle que pour chaque t la variable aléatoire X_t soit distribuée comme $tS_\alpha(\mu, \beta, \sigma)$. Evidemment, la fonction caractéristique de X_t est alors donnée sur la base de (3.2).

Les processus stables sont aussi appelés vols de Lévy. Nous noterons plus loin $L_{\alpha, \beta}$ le processus dont la valeur à l'instant t est distribuée comme $tS_\alpha(0, \beta, 1)$.

3.4.3 Exemples

- **Mouvement Brownien** : Tout mouvement Brownien $B = (B_t; t \geq 0)$ est un processus de Lévy à accroissement gaussiens. C'est un processus stable correspondant à $\alpha = 2$. On a :

$$\mathbb{E}[e^{i(u, B_t)}] = e^{it(b, u) - \frac{t}{2}(u, Au)}.$$

- **Processus de Poisson** : Le processus de Poisson N d'intensité λ est un processus de Lévy. Pour tout $t \geq 0$, la loi N_t est donnée par :

$$\mathbb{P}(N_t = k) = e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^k}{k!}.$$

- **Processus de Poisson composé** : Soit $(Z_n)_n$ une suite VA i.i.d. à valeurs dans \mathbb{R}^d de loi μ_z . Soit N un processus de Poisson d'intensité λ , indépendant de la suite $(Z_n)_n$. Le processus de Poisson composé Y est défini par :

$$Y_t = \sum_{k=1}^{N_t} Z_k.$$

Pour tout $t \geq 0$, on a $Y \sim PC(\lambda t, \mu_z)$. C'est un processus de Lévy. Son symbole de Lévy est donné par :

$$\eta(u) = \int_{\mathbb{R}^d / \{0\}} \left(e^{i(u, z)} - 1 \right) \lambda \mu_z(dz).$$

C'est un processus dont les trajectoires sont constantes par morceaux. Les discontinuités sont données par les instants de sauts du processus de Poisson N , tandis que la loi des sauts est μ_z .

Nous allons avoir besoin de processus capables de représenter des mouvements de particules. Nous avons aussi besoin de processus capables de représenter le temps. Or il augmente sans cesse. Il faut donc pour cela des processus croissants, donc ce qu'on appelle des subordonateurs.

3.5 Subordonateurs

Un subordonateur de Lévy est un processus de Lévy unidimensionnel qui est presque sûrement croissant. Les subordonateurs sont utilisés, entre autres, pour modéliser des évolutions aléatoires du temps [80].

Théorème 7. *Si le processus de Lévy T est un subordonateur, alors son symbole de Lévy est de la forme :*

$$\eta(u) = ibu + \int_0^{+\infty} (e^{iuz} - 1)v(dz),$$

où $b \geq 0$ et la mesure de Lévy v satisfait :

$$v(-\infty, 0] = 0, \quad \text{et} \quad \int_0^{+\infty} (1 \wedge z)v(dz) < +\infty.$$

Réciproquement, toute application de la forme ci-dessus est le symbole de Lévy d'un subordonateur. La paire (b, v) est appelée la caractéristique du subordonateur T .

Quand le support de la mesure de Lévy d'un processus de Lévy est inclus dans \mathbb{R}^+ (respectivement \mathbb{R}^-), on dit que le processus est spectralement positif (respectivement négatif). Ceci ne suffit cependant pas pour que le processus soit un subordonateur.

Remarque : pour tout $t \geq 0$, l'application $z \mapsto \mathbb{E}[e^{zT_t}]$ est analytique sur la région $\{z; \Re(z) \leq 0\}$. On obtient donc l'expression suivante pour la transformée de la Laplace d'un subordonateur :

$$\mathbb{E}[e^{-uT_t}] = e^{-t\psi(u)} \tag{3.4}$$

où

$$\psi(u) = -\eta(iu) = bu + \int_0^{+\infty} (1 - e^{-uz})v(dz). \tag{3.5}$$

Remarquons que la transformée de Laplace de la variable aléatoire T_1 est $e^{-\psi(u)}$. La fonction ψ va jouer un rôle important au chapitre 4. C'est l'exposant de Laplace du subordonateur T .

Un cas particulier est celui des subordonateurs strictement stables. Ils correspondent à des lois stables $S_\alpha(0, 1, \sigma)$ complètement dissymétriques ($\beta = 1$) avec, de plus, un exposant inférieur à 1. Les subordonateurs stables correspondent à des lois stables $S_\alpha(\mu, 1, \sigma)$ avec $\mu \geq 0$ et $\alpha < 1$. A la place de leur fonction caractéristique, il est souvent avantageux d'utiliser leur transformée de Laplace. Si X_t est un subordonateur α -stable correspondant à la loi stable $S_\alpha(0, 1, 1)$, la transformée de Laplace $\langle e^{-\lambda X_t} \rangle$ est $e^{-t \frac{\lambda^\alpha}{\cos \frac{\pi\alpha}{2}}}$. En d'autres termes, une transformée de Laplace de $e^{-t\lambda^\alpha}$ s'obtient à partir de $S_\alpha(0, 1, \cos \frac{\pi\alpha}{2})$ (pour $\alpha < 1$) [49].

Il y a bien d'autres exemples

3.5.1 Autre exemple

Un exemple important pour nous est celui des processus de Poisson composites obtenus avec des variables aléatoires Z_i ne prenant que des valeurs positives. Nous en utiliserons plus un exemple, avec des Z_i exponentiellement distribuées.

Chapitre 4

Les déplacements de certains processus stochastiques représentant le transport

Sommaire

4.1	Processus pour représenter le transport de masse avec effets de mémoire	37
4.1.1	Processus stochastique associé à l'équation de Fokker Planck fractionnaire	37
4.1.2	Processus associé au modèle f-MIM	40
4.1.3	Processus associé au modèle MIM	42
4.2	Mesure par RMN du déplacement des particules fluides	44
4.3	Les moments des incréments de Z_t	46
4.3.1	Les moments des incréments de l'inverse d'un subordonneur de Lévy : cas général	47
4.3.2	Les moments et la transformée de Laplace des incréments de l'inverse d'un subordonneur de Lévy, cas des modèles MIM, f-MIM et FFPE	48
4.3.3	Preuve numérique	54
4.4	L'espérance mathématique des incréments d'un mouvement Brownien subordonné par l'inverse d'un subordonneur de Lévy	59
4.4.1	Incréments d'un mouvement Brownien subordonné : cas général d'un subordonneur de Lévy	60
4.4.2	Cas particuliers des modèles F-MIM, FFPE et MIM	61
4.4.3	Illustrations numériques	61
4.5	Limite de la fonction caractéristique du déplacement	64

4.5.1	Cas associé à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire .	64
4.5.2	Cas associé au modèle f-MIM	67
4.5.3	Cas associé au modèle MIM	68
4.6	La fonction caractéristique des déplacements d'un vol de Lévy subordonné	69
4.7	Conclusion	73

Des processus stochastiques représentant les trajectoires des particules de fluide ou de traceur sont des modèles potentiels pour le transport de masse. Pour vérifier dans quelle mesure ils sont adaptés à un milieu donné, on doit pouvoir comparer une grandeur associée à un tel modèle, avec une grandeur mesurable. Il y a plusieurs possibilités.

La plus classiquement utilisée est la densité de probabilité $P(x, t)$ d'un processus X_t représentant la position à l'instant t d'une particule donnée. Elle décrit la concentration d'un traceur dans un fluide. Dans un milieu poreux saturé, elle correspond au produit de la concentration par la porosité. Dans un milieu poreux insaturé, il faut en plus multiplier par la saturation (proportion du milieu occupée par le solvant). Les expériences de traçage mesurent la concentration d'un traceur, et $P(x, t)$ peut être déduite d'un modèle stochastique au moyen d'une méthode de Monte Carlo et d'un histogramme. On peut aussi utiliser une edp dont $P(x, t)$ est une solution (comme 2.11 ou 2.13) que l'on calcule par discrétisation.

Certaines expériences de RMN mesurent d'autres grandeurs associées au processus X_t . C'est le cas de la vélocimétrie RMN, qui mesure la fonction caractéristique des déplacements des particules de fluide ou de traceur entre deux instants t_1 et t_2 donnés. Ces expériences mesurent donc la fonction caractéristique $\langle e^{iq(X_{t_2} - X_{t_1})} \rangle$ de l'incrément $X_{t_2} - X_{t_1}$ du processus X_t .

Pour un processus X_t qui est un processus de Lévy (comme le mouvement Brownien ou un processus stable) l'incrément $X_{t_2} - X_{t_1}$ est distribué comme $X_{t_2 - t_1}$. Mais ce n'est plus vrai pour les nombreux processus obtenus par subordination, et qui n'ont pas la propriété de Markov. Or ce sont justement de tels processus sur lesquels nous comptons pour tenir compte d'effets de mémoire.

Les effets de mémoire traités ici se caractérisent par des données suggérant qu'une partie du soluté peut être retenue anormalement longtemps. Une approche promotteuse consiste à représenter les mouvements des particules (de fluide ou de traceur) par un processus aléatoire dont la densité de probabilité satisfait le modèle f-MIM [12] ou le MIM ou l'équation de Fokker Planck fractionnaire (FFPE)[6][8][53][54][55][63][64][103][104]. Un tel processus représente la distribution des positions à chaque instant t de ces particules. Afin de pouvoir comparer avec les résultats de la vélocimétrie par RMN, il faut s'intéresser

à la distribution des déplacements effectués entre deux instants donnés. C'est ce que nous allons faire en proposant une expression pour la fonction caractéristique des déplacements des modèles stochastiques associés à chacune des trois équations ci-dessus.

Il nous faut pour cela décrire ces modèles, et dire quelques mots de la RMN. Nous allons voir que ces modèles s'obtiennent tous à partir de processus α -stables à l'aide d'un changement de temps stochastique Z_t . Nous pouvons arriver à nos fins parce que nous disposons de la fonction caractéristique $\langle e^{-\eta(Z_{t_2}-Z_{t_1})} \rangle$ des incréments du changement de temps. Nous en déduisons la fonction caractéristique des déplacements.

4.1 Processus pour représenter le transport de masse avec effets de mémoire

L'équation de Fokker Planck fractionnaire et le Modèle Immobile Mobile fractal [92] sont des équations aux dérivées partielles avec des opérateurs intégrodifférentiels par rapport au temps. Les solutions de ces équations reproduisent la longue traînée des courbes de percée décrites par [58][106][21]. Ces équations régissent également la densité de probabilité d'un mouvement Brownien subordonné. Ce mouvement Brownien subordonné peut être efficacement représenté par des marches aléatoires [12][54][106].

Nous allons préciser ces points.

4.1.1 Processus stochastique associé à l'équation de Fokker Planck fractionnaire

L'équation de Fokker Planck fractionnaire (2.13), sous la forme

$$\partial_t P = \Lambda^{-1} \mathcal{D}_{0,+}^{1-\gamma} \partial_x [\partial_x D_\gamma P - vP],$$

à trois paramètres indépendants γ , $v\Lambda^{-1}$ et $D_\gamma\Lambda^{-1}$. Cette équation régit la densité de probabilité de processus obtenus en subordonnant le mouvement Brownien à un changement de temps aléatoire Z_t [54]. Ce dernier s'obtient en inversant un subordinateur strictement stable que nous notons $U_{FFPE,z}$ qui est indexé par le paramètre z , et est distribué comme $(\Lambda z)^{1/\gamma} W_1$, pour chaque $z > 0$. Le changement de temps Z_t est l'inverse $Z_{FFPE,t}$ défini par :

$$Z_{FFPE,t} = \inf\{z/U_{FFPE,z} > t\}. \quad (4.1)$$

En appliquant ce changement de temps au mouvement Brownien, en tenant compte d'une vitesse d'advection v on obtient un processus distribué comme

$$x_t = x_0 + vZ_{FFPE,t} + \sqrt{2D}B(Z_{FFPE,t}), \quad (4.2)$$

les V.A. Z_t et B_u étant toutes indépendantes. Ce processus s'obtient en prenant la limite hydrodynamique ($\tau \rightarrow 0$) d'une marche aléatoire accumulant des déplacements aléatoires gaussiens d'amplitude $\sqrt{2D\tau}N_n$ qui nécessitent des durées aléatoires elles aussi, distribuées comme $(\Lambda\tau)^{1/\gamma}W_n$. Il faut aussi leur ajouter des déplacements égaux à $v\tau$. Les N_n sont des variables aléatoires gaussiennes indépendantes et identiquement distribuées, les W_n forment une suite de variables aléatoires indépendantes positives et suivant une loi stable de Lévy d'exposant γ (compris entre 0 et 1) et de facteur d'échelle Λ (positif aussi). Une telle marche aléatoire a des trajectoires passant par les points (x_n, t_n) définis par

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + v\tau + \sqrt{2D\tau}N_n \\ t_{n+1} = t_n + (\Lambda\tau)^{1/\gamma}W_n \end{cases} \quad (4.3)$$

Le temps aléatoire $t_{n+1} - t_n$ peut être très long, ou parfois aussi très petit. La figure (4.1) montre une étape d'une Marche au hasard correspondant à ce modèle. La figure (4.2) montre les trajectoires de ce type de marche aléatoire avec avec différents valeurs de γ .

La marche au hasard permet de se faire une idée de ce que représente $Z_{FFPE,t}$. En effet, au bout de n étapes une particule donnée a une position distribuée comme $x_0 + v\tau + \sqrt{2D\tau}N_1$, $\theta = n\tau$, à cause de la stabilité des V.A. gaussiennes $N_1 \cdots N_n$. Ceci se produit au temps $(\Lambda\tau)^{1/\gamma}(W_1 + \cdots + W_n)$ lui même distribué comme $(\Lambda\theta)^{1/\gamma}n^{1/\gamma}W_1$ (à cause de la définition des lois stables et à cause des propriétés de α au paragraphe 3.3), c'est à dire comme $(\Lambda\theta)^{1/\gamma}W_1$. Le chemin parcouru par le mouvement Brownien à l'instant θ est par conséquent parcouru par la marche au hasard au bout d'une durée aléatoire distribuée comme $(\Lambda\theta)^{1/\gamma}W_1$. Le temps opérationnel θ représente le temps de la particule lorsque le temps physique (celui d'un observateur) est $(\Lambda\theta)^{1/\gamma}W_1$. Au temps t , le chemin parcouru correspond à celui qui serait effectué par le mouvement Brownien, pendant une durée θ juste assez grande pour que $(\Lambda\theta)^{1/\gamma}W_1$ dépasse t (dans le cas où θ n'est pas exactement un multiple de τ).

A la limite hydrodynamique ($\tau \rightarrow 0$) ceci donne pour le temps opérationnel

$$Z_{FFPE,t} = \inf\{z/(\Lambda\theta)^{1/\gamma}W_1 > t\}$$

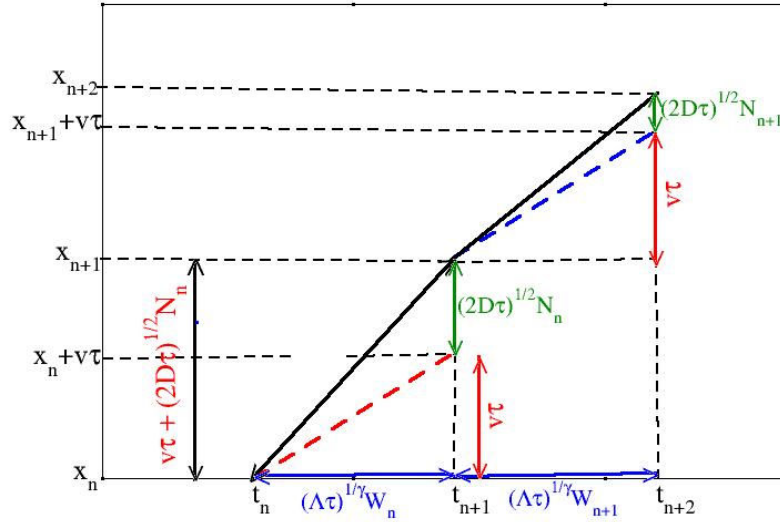


FIG. 4.1: Une étape de déplacement d'un marcheur aléatoire correspondant à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire

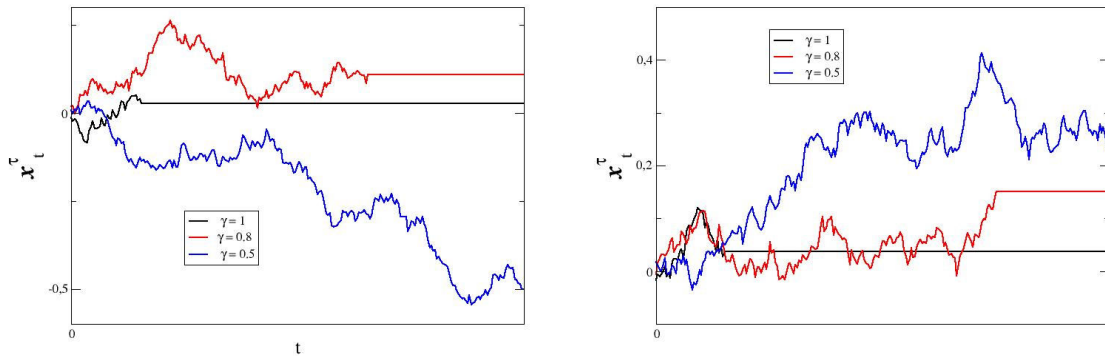


FIG. 4.2: Différentes trajectoires de x_t^γ définie par (4.3) pour différentes valeurs de γ ($\gamma = 0.5$, $\gamma = 0.8$, $\gamma = 1$, avec $D = 1$, $\Lambda = 1$ et $v = 1$). La figure de droite représente différentes trajectoires obtenues à partir d'un échantillon donné N_1, \dots, N_n et correspond à différentes valeurs de γ . Le côté gauche correspond à d'autres échantillons N_1, \dots, N_n .

4.1.2 Processus associé au modèle f-MIM

De même l'équation (2.11) régit la densité de probabilité de processus s'écrivant [12]

$$x_t = x_0 + vZ_{f-MIM,t} + \sqrt{2D}B(Z_{f-MIM,t}). \quad (4.4)$$

Le seul changement, par rapport au paragraphe 4.1.1 concerne le changement de temps aléatoire Z_t . Il inverse ici encore un processus de Lévy, cependant ce dernier, noté $U_{f-MIM,z}$ est maintenant distribué comme $z + (\Lambda z)^{1/\gamma}W_1$. On a remplacé un subordonateur strictement stable par un subordonateur stable. En d'autres termes le chemin parcouru à l'instant t se calcule à l'aide du mouvement Brownien, mais il faut calculer ce dernier au temps opérationnel, lui-même donné par

$$Z_{f-MIM,t} = \inf\{z/z + (\Lambda z)^{1/\gamma}W_1 > t\}. \quad (4.5)$$

Le processus x_t ainsi obtenu représente la limite d'une marche aléatoire de la forme

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + v\tau + \sqrt{2D\tau}N_n \\ t_{n+1} = t_n + \tau + (\Lambda\tau)^{1/\gamma}W_n. \end{cases} \quad (4.6)$$

Cette marche aléatoire part de la position x_0 au temps $t = 0$. Les trajectoires individuelles de chaque particule sont linéaires par morceaux, et joignent les points (x_n, t_n) , $(x_n + v\tau, t_n + \tau)$ et (x_{n+1}, t_{n+1}) . Le temps opérationnel a ici une signification très concrète, puisque c'est le temps que la particule a passé en mouvement à l'instant t [40]. Si on compare avec la marche au hasard du paragraphe 4.1.1, on voit en effet qu'ici elle accumule des étapes successives qui se scindent en deux parties. Une partie est consacrée à la convection puisqu'elle fait passer de la position x_n à la position $x_n + v\tau$, et immédiatement après à x_{n+1} . Ensuite il y a une sous-étape immobile de durée $(\Lambda\tau)^{1/\gamma}W_n$. La marche au hasard du paragraphe 4.1.1 avait des étapes de durée $(\Lambda\tau)^{1/\gamma}W_n$, qui ne faisaient pas de différence entre deux états mobile et immobile. La figure (4.4) montre les trajectoires des marcheurs avec différentes valeurs de γ .

Dans le cas limite où $\gamma = 1$, $Z_t = \frac{t}{(1+\Lambda)}$, le processus x_t devient un mouvement Brownien retardé défini par :

$$x_t = x_0 + \frac{vt}{1+\Lambda} + \sqrt{2D}B\left(\frac{t}{1+\Lambda}\right)$$

Notons que $B(Z_t)$ est distribué comme $\sqrt{2DZ_t}N$, N étant une V.A. normale (centrée réduite) et indépendante de Z_t [55] : l'amplitude de N_n dans (4.6) est indépendante du temps d'attente, par contre l'amplitude du déplacement qui en résulte fait intervenir sa durée. Une approximation de Z_t est représentée par la figure (4.5).

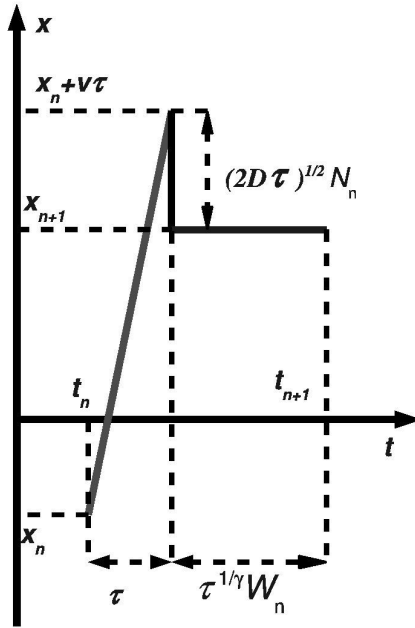


FIG. 4.3: Une étape de déplacement d'un marcheur aléatoire effectuant (4.6) : l'advection durant τ et le saut dispersif $\sqrt{2D\tau}N_n$ sont suivis d'un temps d'immobilité tiré aléatoirement

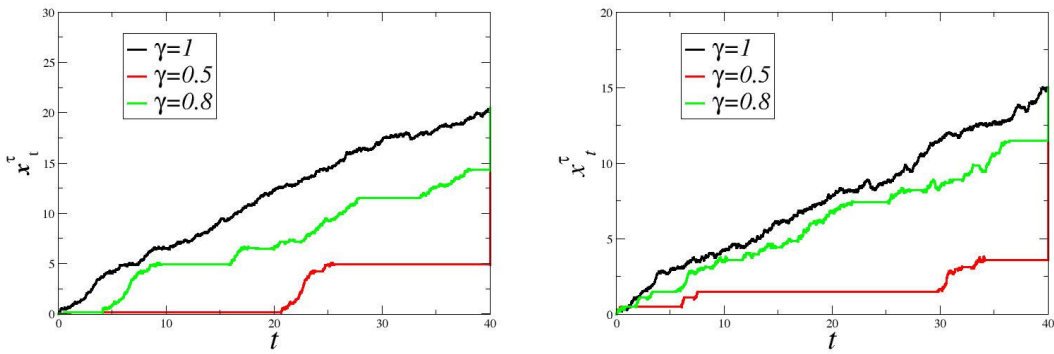


FIG. 4.4: Différentes trajectoires de x_t^τ pour $\gamma = 0.5$, $\gamma = 0.8$ et $\gamma = 1$. La figure de droite représente des trajectoires obtenues à partir d'un échantillon donné N_1, \dots, N_n mais correspondant à différentes valeurs de γ . Le côté gauche correspond à d'autres échantillons N_1, \dots, N_n toutes les trajectoires correspondent à $D = 0.1$, $\Lambda = 1$ et $v = 1$. Quand $\gamma < 1$ les marcheurs restent parfois immobiles pendant très longtemps et ces périodes d'immobilité diminuent quand γ augmente. A la limite $\gamma = 1$, la durée de piègeage a une moyenne finie et la diffusion devient normale.

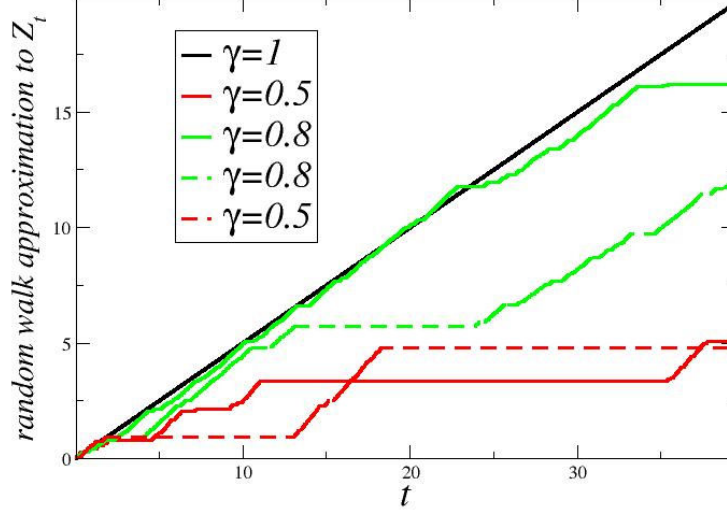


FIG. 4.5: Trajectoires de Z_t , pour trois valeurs de γ avec une même valeur de Λ ($\Lambda = 1$). Les lignes et les tirets de même couleur représentent deux trajectoires (c'est à dire deux réalisations) du même processus Z_t

A la limite hydrodynamique [12][62][68], la marche aléatoire x_t^τ converge vers une limite dont la densité de probabilité $P(x, t)$ vérifie l'équation (4.7)

$$\partial_t P = \partial_x [\partial_x D (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} P - v (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} P], \quad (4.7)$$

ici $I_{0,+}^{1-\gamma}$ est un opérateur intégral fractionnaire d'ordre $1 - \gamma$ (voir annexe B), Id est l'opérateur identité et $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$ l'opérateur temporel non local qui inverse l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$. Notons ici que $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} P(x, t)$ représente la densité de la phase mobile du soluté à la position x à l'instant t [58][68]. Au chapitre 5 nous démontrons une équation analogue, en supposant que γ dépend de la position. Dans le cas où $\gamma = 1$, l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$ devient tout simplement une multiplication et l'équation (4.7) devient l'équation d'advection dispersion [99] avec un facteur de retard Λ .

4.1.3 Processus associé au modèle MIM

Le modèle (2.6 - 2.7) est utilisé depuis une quarantaine d'années, cependant c'est depuis peu de temps qu'un modèle stochastique en a été proposé [12]. Ce modèle est encore un mouvement Brownien avec un changement de temps.

Cette fois ci, le changement de temps Z_t est un processus de Poisson composite (voir paragraphe 3.4.3).

Avant de préciser ce processus de Poisson composite, on peut donner une description concrète des trajectoires des processus stochastiques dont le modèle MIM (équation 2.3) régit l'évolution de la densité .

Les mouvements des particules se décomposent en déplacements de durée M_n , chacun d'entre eux étant suivi d'une période d'immobilité de durée aléatoire W_n . Pendant chaque période mobile M_n , chaque particule fait un déplacement égal à $vM_n + \sqrt{2DM_n}N_n$, v représentant la vitesse moyenne des particules (quand elles bougent), et D la diffusivité. De plus, N_n est une variable gaussienne standard, les variables aléatoires M_n , W_n et N_n sont indépendantes avec des distributions exponentielles. Cependant les W_n ont pour espérance $\frac{1}{\omega}$ alors que celle des M_n est $\frac{1}{K\omega}$ [12], le paramètre ω de l'équation (2.3) est l'inverse du temps caractéristique des périodes immobiles, et le paramètre K représente le rapport du temps immobile moyen au temps mobile moyen. Le paramètre K dans l'edp (2.3) est souvent interprété comme le rapport entre la fraction volumique (ou porosité) immobile θ_i et la fraction mobile θ_m .

On n'a pas besoin de passer à la limite hydrodynamique (d'ailleurs il n'y a pas ici de paramètre à faire tendre vers zéro). La figure (4.6) montre une étape de cette marche aléatoire.

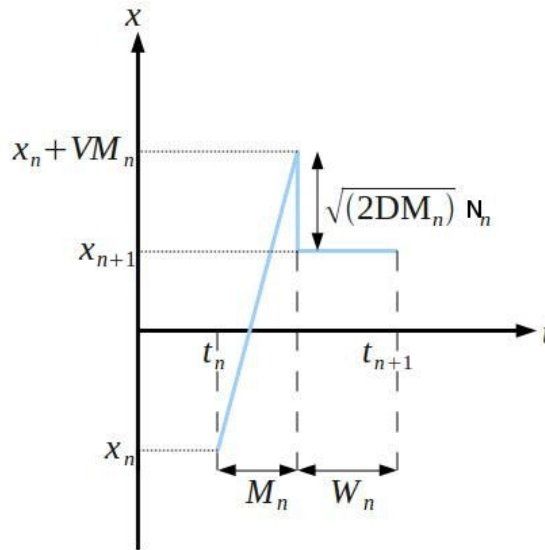


FIG. 4.6: Représentation d'une étape de déplacement d'un marcheur aléatoire correspondant au modèle MIM

La position à l'instant t d'une particule donnée est distribuée comme

$$x_t = x_0 + vZ_{MIM,t} + \sqrt{2DZ_{MIM,t}}N_n \quad (4.8)$$

Le changement de temps aléatoire $Z_{MIM,t}$ représente le temps opérationnel à l'instant t . Ici encore c'est le temps passé à bouger. Il s'obtient en inversant le processus $U_{MIM,z}$ qui représente le temps physique lorsque le total du temps passé à bouger est z [12]. Plus précisément, pour chaque $z > 0$, le nombre entier $\mathcal{N}(z)$ tel que $M_1 + \dots + M_{\mathcal{N}(z)} < z < M_1 + \dots + M_{\mathcal{N}(z)+1}$ est une V.A., et le processus qui la détermine pour chaque valeur donnée de z est un processus de Poisson de paramètre $K\omega$ [49] comme au paragraphe 3.4.3.

Le temps physique $U_{MIM,z}$ qui correspond au temps opérationnel z est donc $z + W_1 + \dots + W_{\mathcal{N}(z)}$ qui représente la somme des $M_1 \dots + M_{\mathcal{N}(z)}$, et des W_i , sans oublier $z - M_1 \dots + M_{\mathcal{N}(z)}$ qui correspond à une éventuelle étape mobile en cours à l'instant t . Comme les M_i et les W_j sont des V.A. indépendantes, on obtient ainsi $U_{MIM,z}$ qui est la somme de z et du processus de Poisson composite $W_1 + \dots + W_{\mathcal{N}(z)}$ (cas particulier des processus de Lévy).

Les modèles stochastiques associés au f-MIM et à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire s'obtiennent en appliquant au mouvement Brownien des changements de temps qui inversent des subordonateurs stables. Ceux du f-MIM ont un biais, ceux de l'équation de Fokker-Planck fractionnaire n'en ont pas. Dans les deux cas le temps physique nécessaire pour effectuer un parcours donné le long des trajectoires du mouvement Brownien n'a pas de moyenne finie : ce temps est très irrégulièrement distribué.

Le modèle stochastique associé au MIM est aussi un mouvement Brownien subordonné. Cependant, son subordonateur est un processus de Poisson composite, pour lequel la notion de temps caractéristique s'applique (contrairement aux deux autres modèles). C'est encore un processus non Markovien, avec des effets de mémoire, mais cette mémoire finit par décroître plus vite.

4.2 Mesure par RMN du déplacement des particules fluides

Sous sa forme la plus simple, la méthode d'observation par RMN repose sur l'absorption d'un rayonnement électromagnétique par des noyaux atomiques exposés à un champ magnétique intense constant et uniforme B_0 . L'énergie absorbée peut alors être réémise par chaque noyau sous la forme d'un rayonnement électromagnétique. L'exploitation des caractéristiques (fréquence de précession et temps de relaxation) de cette réémission constitue le principe de base

de la méthode d'observation. Pratiquement, l'échantillon à étudier est placé dans un champ magnétique intense B_0 qui lui fait acquérir une aimantation nucléaire. Cependant, à l'équilibre cette aimantation nucléaire est colinéaire au champ magnétique B_0 et on ne la détecte pas. Une impulsion de fréquence radio avec un champ magnétique perpendiculaire à B_0 permet d'écarter l'aimantation nucléaire de sa position d'équilibre. Le retour à l'équilibre de l'aimantation se décompose alors en deux mouvements élémentaires, l'un est une précession à la pulsation $\gamma^* B_0$ (γ^* est le facteur gyromagnétique) et l'autre est un mouvement de relaxation correspondant au retour naturel de l'aimantation vers direction de B_0 . Tant que le retour à l'équilibre n'est pas achevé, chaque noyau émet une onde électromagnétique dont la phase est proportionnelle à celle de la projection de sa magnétisation dans le plan perpendiculaire B_0 .

Pour cette raison, la RMN renseigne sur les fluctuations de vitesse des particules d'eau dans le milieu poreux par la méthode de vélocimétrie par contraste de phase. Pour illustrer très simplement la méthode, considérons une collection de spins $1/2$ se déplaçant dans un gradient de champ magnétique dont la composante le long de B_0 dépend de la position le long de la direction x et est $g(t)x$. Le champ magnétique en tout point x est $B_0 + g(t)x$. Ceci implique que la vitesse angulaire de précession de l'aimantation magnétique (ou fréquence de Larmor) du porteur de spin situé en un point d'abscisse x (dans la direction x) est donnée par :

$$\omega(x) = \gamma^* (B_0 + g(t)x) \quad (4.9)$$

Il en résulte que le déphasage $\phi(t)$ acquis au cours de la précession par ce porteur de spin, s'écrit :

$$\phi(t) = \phi_0 + \gamma^* \int_0^t (B_0 + g(t)x(t)) dt \quad (4.10)$$

Lorsque g est représenté par deux étroits créneaux d'aire q/γ^* en t_1 et t_2 , d'amplitudes opposées, comme indiqué sur la figure (4.7), on obtient en première approximation :

$$\phi(t) = -q[x(t_2) - x(t_1)] + C^{te},$$

dans cette relation q dépend de l'intensité du gradient.

En réalité, on mesure la moyenne d'ensemble $\langle e^{iq\phi} \rangle$ qui concerne toutes les particules à la fois. On obtient ainsi la moyenne des exponentielles des déplacements des particules de fluide entre deux instants t_1 et t_2 , c'est à dire :

$$\langle e^{iq\phi} \rangle = \langle e^{-iq[x_{t_2} - x_{t_1}]} \rangle \quad (4.11)$$

Cette expression n'est autre que la transformée de Fourier du déplacement des particules fluides entre les instants t_1 et t_2 . Son développement en série donne la l'ensemble de tous les moments du déplacement des particules. Dans le cadre

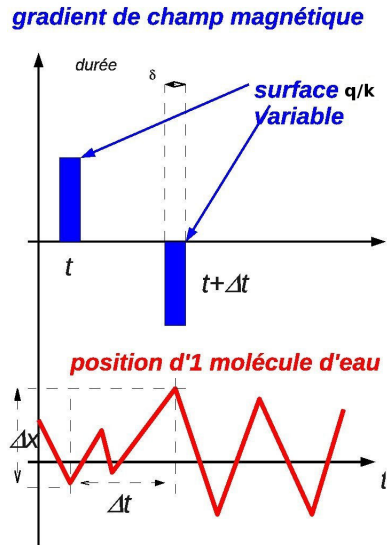


FIG. 4.7: Particules se déplaçant dans un gradient du champ magnétique

de l'équation (4.4), $x(t)$ est le processus stochastique donnant projection de la position des particules au temps t dans la direction du gradient.

Lorsque $x(t)$ est un processus de Lévy, l'incrément entre les instants t_1 et t_2 est distribué comme le processus lui-même considéré à l'instant $t_2 - t_1$ [49]. Donc l'expression de sa fonction caractéristique est une affaire réglée. C'est différent pour un processus de Lévy soumis à un changement de temps aléatoire qui en fait un processus non Markovien. En d'autres termes pour les processus destinés à représenter les effets de mémoire, la distribution de leurs incréments est une question non triviale. Elle passe par la détermination de celle des incréments du changement de temps lui-même.

4.3 Les moments des incréments de Z_t

Les moments des incréments de l'inverse de n'importe quel subordonateur de Lévy se calculent à l'aide d'une expression générale due à Lageras [50]. Après avoir rappelé cette expression générale, nous l'appliquons aux subordonateurs associés au f-MIM et au MIM et au modèle appliqué à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire.

4.3.1 Les moments des incréments de l'inverse d'un subordonateur de Lévy : cas général

Soit \mathcal{T}_z un subordonateur de Lévy, soit \mathcal{Z}_t son inverse, avec

$$\mathcal{Z}_t = \inf\{z \in \mathbb{R}^+ / \mathcal{T}_z > t\}.$$

Nous allons utiliser l'exposant $\psi(\lambda)$ de la transformé de Laplace de \mathcal{T}_z , à savoir $\langle e^{-\lambda \mathcal{T}_z} \rangle = e^{-z\psi(\lambda)}$, car cet exposant est intimement lié à la fonction de renouvellement de \mathcal{Z}_t , qui intervient dans l'énoncé d'un théorème de Lageras, que nous allons utiliser. Après avoir rappelé ce que sont la fonction et la mesure de renouvellement d'un processus inversant un subordonateur de Lévy, nous serons en mesure d'énoncer ce théorème, puis de l'appliquer.

La fonction de renouvellement de \mathcal{Z}_t est définie comme l'espérance $\mathbb{E}(\mathcal{Z}_t)$. Il lui correspond la mesure de renouvellement \mathcal{R} de \mathcal{Z}_t , selon $\mathcal{R}\{dt\} = \mathbb{E}(\mathcal{Z}_{t+dt} - \mathcal{Z}_t)$ aussi désignée par $R(t)dt$ en utilisant sa densité $R(t)$, et bien entendu $\mathcal{R}[0, t]$ est la fonction de renouvellement, notée $\mathcal{R}(t)$. Lageras montre tout d'abord que la transformée de Laplace de la mesure \mathcal{R} , à savoir $\int_0^\infty e^{-\lambda t} \mathcal{R}\{dt\}$ n'est autre que $\frac{1}{\psi(\lambda)}$, $\psi(\lambda)$ étant l'exposant de Laplace du subordonateur \mathcal{T}_z .

Le théorème 1 de [50] établit que pour $0 < t_1 < t_2$, on a

$$\begin{aligned} \langle (\mathcal{Z}_{t_2} - \mathcal{Z}_{t_1})^n \rangle &= n! \int \dots \int_{t_1 < \theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_n < t_2} \mathcal{R}(d\theta_n - \theta_{n-1}) \\ &\quad \mathcal{R}(d\theta_{n-1} - \theta_{n-2}) \dots \mathcal{R}(d\theta_2 - \theta_1) \mathcal{R}(d\theta_1) \end{aligned} \quad (4.12)$$

où pour tout intervalle I , $\mathcal{R}(I)$ représente $\int_I R(x)dx$. De plus, l'intervalle $I - \theta$ est obtenu à partir de l'intervalle I , en appliquant la translation d'amplitude θ . Ainsi, le second membre de l'équation (4.12) est égal à :

$$\begin{aligned} n! \int \dots \int_{t_1 < \theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_n < t_2} R(\theta_n - \theta_{n-1}) R(\theta_{n-1} - \theta_{n-2}) \dots R(\theta_2 - \theta_1) R(\theta_1) d\theta_n d\theta_{n-1} \dots d\theta_2 d\theta_1 = \\ n! \int_{y_1=0}^{t_2-t_1} R(y_1) dy_1 \int_{y_2=y_1}^{t_2-t_1} R(y_2 - y_1) dy_2 \dots \int_{y_{n-1}=y_{n-2}}^{t_2-t_1} R(y_{n-1} - y_{n-2}) dy_{n-1} \\ \int_{y_n=y_{n-1}}^{t_2-t_1} R(y_n - y_{n-1}) dy_n. \end{aligned}$$

ceci implique

$$\langle (\mathcal{Z}_{t_2} - \mathcal{Z}_{t_1})^n \rangle = n! [R(t + t_1) * R(t) * \dots * R(t) * \mathcal{R}(t)](t_2 - t_1), \quad (4.13)$$

où toutes les convolutions correspondent à la variable muette t .
Comme $\mathcal{R}(t) = [R * 1](t)$ cette dernière équation est équivalente à

$$\langle (\mathcal{Z}_{t_2} - \mathcal{Z}_{t_1})^n \rangle = n! \left[R(t + t_1) * [R^{(n-1)*} * 1](t) \right] (t_2 - t_1), \quad (4.14)$$

où R^{n*} représente la n -ième convolution de R avec lui-même.

Remarquons que (4.14) implique :

$$\langle e^{-\eta(\mathcal{Z}_{t_2} - \mathcal{Z}_{t_1})} \rangle = 1 + \left[R(t + t_1) * \left(\sum_{n \geq 1} (-\eta)^n R^{(n-1)*} \right) * 1 \right] (t_2 - t_1) \quad (4.15)$$

et que $\sum_{n \geq 1} (-\eta)^n R^{(n-1)*}$ a pour transformée de Laplace $\sum_{n \geq 0} \left(\frac{-\eta}{\psi(\lambda)} \right)^n$ soit $\left(\frac{-\eta}{1 + \frac{\eta}{\psi(\lambda)}} \right)$,

autrement dit $-\eta \frac{\psi(\lambda)}{\eta + \psi(\lambda)}$.

Nous en déduisons la propriété suivante

Proposition 4.3.1. *Soit U_z un subordonateur de Lévy d'exposant caractéristique $\psi(s)$. Soit Z_t son inverse $Z_t = \inf\{z/U_z > t\}$. La fonction caractéristique des incréments de Z_t vérifie*

$$\langle e^{-\eta(\mathcal{Z}_{t_2} - \mathcal{Z}_{t_1})} \rangle = 1 - \eta (R(t + t_1)) * \mathcal{F}(t)(t_2 - t_1), \quad (4.16)$$

dès que la série dans (4.15) converge, où la fonction $\mathcal{F}(t)$ a pour transformée de Laplace $\int_0^\infty e^{-\lambda t} \mathcal{F}(t) dt = \frac{\psi(\lambda)}{\lambda(\eta + \psi(\lambda))}$, alors que $R(t)$ a pour transformée de Laplace $\frac{1}{\psi(\lambda)}$

Il reste à appliquer ceci aux différents cas du MIM, du f-MIM et de l'équation de Fokker-Planck fractionnaire.

4.3.2 Les moments et la transformée de Laplace des incréments de l'inverse d'un subordonateur de Lévy, cas des modèles MIM, f-MIM et FFPE

Moments et transformée de Laplace pour le modèle MIM

La propriété tirée du théorème de [50] donne explicitement la transformée de Laplace de $\langle e^{-\eta(\mathcal{Z}_{MIM,t_2} - \mathcal{Z}_{MIM,t_1})} \rangle$ au moins lorsque la série dans (4.15) converge. Mais on a besoin de connaître $\psi(\lambda)$. Dans le cas du MIM, $U_{MIM,z}$ est de la forme $z + W_1 + \dots + W_{\mathcal{N}(z)}$ où \mathcal{N} est un processus de Poisson de paramètre $K\omega$, alors que les V.A. W_i sont indépendantes, de distribution exponentielle de

moyenne $\frac{1}{\omega}$. Leur fonction caractéristique commune $\tilde{\psi}_\omega(\lambda)$ est donc $\frac{\omega}{\omega + \lambda}$.

Celle de $\sum_{i=1}^{\omega(z)} W_i$ est $K\omega(1 - \tilde{\psi}_\omega(\lambda))$ [12][49]. En effet $\mathcal{N}(z)$ prend la valeur n

avec une probabilité de $e^{-zK\omega} \frac{(zK\omega)^n}{n!}$, et dans ce cas la densité de probabilité

de $W_1 + \dots + W_n$ a pour transformée de Laplace $(\tilde{\psi}_\omega(\lambda))^n$. Donc la fonction caractéristique (transformée de Laplace) de $W_1 + \dots + W_{\mathcal{N}(z)}$ est $e^{-zK\omega(1 - \tilde{\psi}_\omega(\lambda))}$,

en ajoutant z à cette somme on obtient $e^{-\lambda z - zK\omega(1 - \tilde{\psi}_\omega(\lambda))}$. Pour $U_{MIM,z}$ on obtient ainsi $\psi(\lambda) = \lambda \left(1 + \frac{K\omega}{\lambda + \omega}\right)$.

Par conséquent, la transformée de Laplace de la fonction de renouvellement $R(t)$ est $\tilde{R}(\lambda) = 1/\psi(\lambda)$. En inversant la transformation de Laplace on en déduit

$$R(t) = \frac{1 + Ke^{-\omega(K+1)t}}{K+1}.$$

Il nous reste à évaluer les convolutions au second membre de (4.15)

Puisque la transformée de Laplace de $\sum_{n \geq 0} (-\eta)^n R^{n*}$ de l'équation (4.15) est égale à $\frac{\psi(\lambda)}{\eta + \psi(\lambda)}$, la fonction $[\sum_{n \geq 0} (-\eta)^n R^{n*}](t)$ est de la forme

$$[\sum_{n \geq 0} (-\eta)^n R^{n*}](t) = A_+ e^{r_+ t} - A_- e^{r_- t}, \quad (4.17)$$

avec

$$r_{\pm} = [-(\eta + \omega(K+1)) \pm \sqrt{\delta}]/2, \quad (4.18)$$

et

$$A_{\pm} = \pm \frac{1}{2} + \frac{\omega(K+1) - \eta}{2\sqrt{\delta}}, \quad (4.19)$$

où, $\sqrt{\delta}$ représente la racine carrée de $\delta = \eta^2 + 2\eta\omega(K-1) + \omega^2(K+1)^2$.

On a la proposition suivante qui donne la fonction caractéristique de $Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}$

Proposition 4.3.2. *Pour $0 < t_1 < t_2$, pour tout nombre η réel ou complexe (n'appartenant pas à \mathbb{R}^-), la fonction caractéristique de $Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}$ vérifie*

$$\langle e^{-\eta[Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}]} \rangle = f(\eta, K, \omega, t_1, t_2) \quad (4.20)$$

avec

$$f(\eta, K, \omega, t_1, t_2) = \frac{\eta}{K+1} [Q_- e^{r_-(t_2-t_1)} - Q_+ e^{r_+(t_2-t_1)}] \quad (4.21)$$

et

$$Q_{\pm} = \frac{A_{\pm}}{r_{\pm}} + \frac{K}{\sqrt{\delta}} e^{-\omega(K+1)t_1}. \quad (4.22)$$

On dispose aussi d'une expression exacte pour la fonction caractéristique $\langle e^{-\eta(Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1})} \rangle$. Elle se prolonge analytiquement partout où η a une partie réelle positive.

Moments et transformée de Laplace pour le modèle associé à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire

Dans le cas de ce modèle associé à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire, la transformée de Laplace $\langle e^{-\lambda U_{FFPE,z}} \rangle$ du processus de Lévy $U_{FFPE,z}$ est $e^{-z\psi_{FFPE}(\lambda)} = e^{-\Lambda\lambda^{\gamma}}$, donc l'exposant est $\psi_{FFPE}(\lambda) = \Lambda\lambda^{\gamma}$. La transformée de Laplace de la dérivée de la fonction de renouvellement $R_{FFPE}(t)$ est alors $\tilde{R}_{FFPE}(\lambda) = 1/\psi(\lambda)$. En appliquant la table de la transformation de Laplace on en déduit :

$$R_{FFPE}(t) = \Lambda^{-1} \frac{t^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)}.$$

Dans ce cas l'équation (4.14) s'écrit de la façon suivante :

$$\langle (Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1})^n \rangle = n! \left[R_{FFPE}(t+t_1) * [R_{FFPE}^{(n-1)*} * 1](t) \right] (t_2 - t_1), \quad (4.23)$$

et nous savons que

$$[R_{FFPE}(t+t_1) * [R_{FFPE}^{(n-1)*} * 1](t)](t_2 - t_1) = \Lambda^{-n} \left[\frac{(t+t_1)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} * \frac{t^{(n-1)\gamma}}{\Gamma((n-1)\gamma+1)} \right] (t_2 - t_1),$$

et on voit que les convolutions multiples se réduisent à une seule, ce qui donne

$$\begin{aligned} \langle (Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1})^n \rangle &= n! \Lambda^{-n} \left[I_{0,+}^{(n-1)\gamma+1} \frac{(t+t_1)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} \right] (t_2 - t_1) \\ &= n! \Lambda^{-n} \left[\frac{t^{(n-1)\gamma}}{\Gamma((n-1)\gamma+1)} * \frac{(t+t_1)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} \right] (t_2 - t_1), \end{aligned} \quad (4.24)$$

Pour $\Lambda = 1$ nous obtenons $\langle (Z_{FFPE,t})^n \rangle = n! \frac{t^{n\gamma}}{\Gamma(n\gamma+1)}$ en accord avec [9].

Ainsi, nous avons :

$$\begin{aligned}\langle [Z_{FFPE,t_2} Z_{FFPE,t_1}] \rangle &= \frac{1}{2} \left[\langle Z_{FFPE,t_1}^2 \rangle + \langle Z_{FFPE,t_2}^2 \rangle - \langle (Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1})^2 \rangle \right] \\ &= \frac{t_1^{2\gamma} + t_2^{2\gamma}}{\Gamma(2\gamma + 1)} - \frac{[t^\gamma * (t + t_1)^{\gamma-1}](t_2 - t_1)}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma + 1)}\end{aligned}$$

avec

$$\frac{[t^\gamma * (t + t_1)^{\gamma-1}](t_2 - t_1)}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma + 1)} = \int_0^{t_2} \frac{\theta^{\gamma-1}(t_2 - \theta)^\gamma}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma + 1)} d\theta - \int_0^{t_1} \frac{\theta^{\gamma-1}(t_2 - \theta)^\gamma}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma + 1)} d\theta$$

ou

$$\int_0^{t_2} \frac{\theta^{\gamma-1}(t_2 - \theta)^\gamma}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma + 1)} d\theta = t_2^{2\gamma} \int_0^1 \frac{\Theta^{\gamma-1}(1 - \Theta)^\gamma}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma + 1)} d\Theta$$

nous reconnaissons la fonction beta de Bernouilli

$$\int_0^1 \Theta^{\gamma-1}(1 - \Theta)^\gamma d\Theta = \frac{\Gamma(\gamma + 1)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(2\gamma + 1)}$$

On en déduit

$$\langle Z_{FFPE,t_2} Z_{FFPE,t_1} \rangle = \frac{t_1^{2\gamma}}{\Gamma(2\gamma + 1)} + \frac{1}{\Gamma(\gamma + 1)\Gamma(\gamma)} \int_0^{t_1} \theta^{\gamma-1}(t_2 - \theta)^\gamma d\theta,$$

c'est l'équation (B2) de [9].

Comme ci-dessus, le calcul des moments est utilisé pour obtenir l'espérance mathématique de $Z_{FFPE,t}$, elle est donnée par l'expression

$$\begin{aligned}\langle e^{\eta(Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1})} \rangle &= 1 + \eta \left[R(t + t_1) * \sum_{n \geq 0} \left(\frac{\eta}{\Lambda} \right)^n \frac{t^{n\gamma}}{\Gamma(n\gamma + 1)} \right] (t_2 - t_1) \\ &= 1 + \eta \left[\frac{(t + t_1)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} * E_\gamma \left(\frac{t^\gamma \eta}{\Lambda} \right) \right] (t_2 - t_1).\end{aligned}\quad (4.25)$$

En posant $t_1 = 0$, $\Lambda = 1$, $\eta = -q^2 D$ et $v = 0$, nous retrouvons la fonction caractéristique du mouvement Brownien subordonnée $\sqrt{2DB}(Z_{FFPE,t})$ [63],

$$\begin{aligned}\langle e^{iq\sqrt{2DB}(Z_{FFPE,t})} \rangle &= \langle e^{-q^2 D Z_{FFPE,t}} \rangle \\ &= 1 - q^2 D I_{0,+}^\gamma E_\gamma(-t^\gamma q^2 D),\end{aligned}\quad (4.26)$$

et sa transformé de Laplace est donnée par

$$\left(\frac{1}{\lambda} \right) - \left(\frac{q^2 D \lambda^{-\gamma}}{(\lambda + q^2 D \lambda^{1-\gamma})} \right) = \frac{1}{(\lambda + q^2 D \lambda^{1-\gamma})'}$$

autrement dit,

$$\langle e^{iq\sqrt{2DB}(Z_{FFPE,t})} \rangle = E_\gamma(-t^\gamma q^2 D). \quad (4.27)$$

Alors que les moments des incréments de $Z_{FFPE,t}$ ont une expression relativement simple, l'équation (4.14) utilise des produits de convolution inhabituels. Par conséquent, il sera vraiment utile de pouvoir calculer numériquement la convolution itérée R^{n*} .

Ces relations ont été déduites d'un théorème de Lageras. On les retrouve numériquement, ce qui constitue une preuve alternative, restreinte aux cas particuliers (au f-MIM, au FFPE et au MIM) qui concentrent notre attention dans ce document.

Moments et transformée de Laplace pour le modèle f-MIM

Dans le cas du f-MIM, la fonction caractéristique de $U_{f-MIM,z}$ est $e^{-z(\lambda + \Lambda\lambda^\gamma)}$, puisque $U_{f-MIM,z}$ est distribué comme $z + (\Lambda z)^{1/\gamma} W_1$, W_1 étant une V.A. stable d'exposant γ et de paramètre de stabilité $\beta = 1$. Donc la fonction Log-caractéristique (de Laplace) de $U_{f-MIM,z}$ est cette fois-ci égale à $\psi(\lambda) = \Lambda\lambda^\gamma + \lambda$.

La proposition 4.3.1 s'applique donc avec pour $R(t)$ la fonction dont la transformée de Laplace est $\frac{1}{\lambda + \Lambda\lambda^\gamma} = \frac{\lambda^{-\gamma}}{\Lambda + \lambda^{1-\gamma}}$. On connaît donc $R(t) = E_{1-\gamma}(-\Lambda t^{1-\gamma})$, où $E_{1-\gamma}$ désigne la fonction de Mittag-Leffler d'ordre $1 - \gamma$ [56][77], la définition et les propriétés des fonctions de Mittag-Leffler sont données dans l'annexe (B). On en déduit que la fonction de renouvellement est dans ce cas

$$\mathcal{R}(t) = \int_0^t E_{1-\gamma}(-\Lambda t'^{1-\gamma}) dt'.$$

Remarquons que dans $\psi(\lambda) = \lambda(1 + \Lambda\lambda^{\gamma-1})$ apparaît le symbole de Laplace $1 + \Lambda\lambda^{\gamma-1}$ de l'opérateur $Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma}$ (voir annexe B). Ainsi, dans $\tilde{R}(\lambda) = 1/\psi(\lambda)$ figure le symbole de Laplace de $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$, multiplié par celui de la fonction constante 1. On en déduit

$$n! \left[R^{(n-1)*} * 1 \right] (t) = n \left(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} \right)^{-(n-1)} (t^{n-1})$$

et en appliquant l'équation (4.14) la proposition suivante est prouvée.

Proposition 4.3.3. *Pour tout $n > 0$, les moments des incréments du processus $Z_{f-MIM,t}$ défini par l'équation (4.5) vérifie*

$$\langle [Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1}]^n \rangle = n! \left[R(t + t_1) * \left(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} \right)^{-(n-1)} \left(\frac{t^{n-1}}{(n-1)!} \right) \right] (t_2 - t_1). \quad (4.28)$$

avec $R(t) = E_{1-\gamma}(-\Lambda t^{1-\gamma})$.

Au second membre de l'équation (4.28), nous avons le produit de convolution de deux fonctions. La première $R(t + t_1)$ est une fonction de Mittag-Leffler, cette fonction se calcule généralement en inversant la transformée de Laplace, qui doit être intégrée sur un intervalle infini. La seconde est définie par une itération de l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$.

Le calcul du moment n'est qu'une étape pour aboutir à l'espérance mathématique. Nous savons que l'équation (4.28) calcule les moments de tous ordre présents dans l'expression $\langle e^{\eta[Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1}]} \rangle$. La somme de la série de terme général $\langle (Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1})^n \rangle \frac{\eta^n}{n!}$ nous donne ainsi l'expression de $\langle e^{\eta[Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1}]} \rangle$.

Nous obtenons

$$\langle e^{\eta[Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1}]} \rangle = 1 + \eta \left[R(t + t_1) * [\Sigma_{n \geq 0} \eta^n (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-n} I_{0,+}^n(1)](t) \right] (t_2 - t_1). \quad (4.29)$$

L'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$ est l'inverse de $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$, pas seulement l'inverse à gauche comme $\Lambda^{-1} D_{0,+}^{1-\gamma}$ pour $\Lambda I_{0,+}^{1-\gamma}$ [58], à condition de travailler dans un espace de fonction convenable. Pour cela, on peut choisir les espaces \mathbb{X}_χ définis par $\mathbb{X}_\chi = \{f / \|f\|_\chi < \infty\}$ avec $\|f\|_\chi = \|e^{-\chi t} f(t)\|_{L^2[0,T]}$ pour tout χ positif. En ce qui concerne l'opérateur $I_{0,+}^{1-\gamma}$, le lemme 3 de [38] montre que $\|I_{0,+}^\alpha g\|_\chi \leq \chi^{-1} \|g\|_\chi$ pour tout g dans \mathbb{X}_χ . Donc les opérateurs comme $I_{0,+}^\alpha$ sont des contractions de \mathbb{X}_χ , à condition de prendre $\chi > 1$. Une première conséquence est que la série de Neumann $\Sigma_{n \geq 0} (-\Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^n$ converge. Ensuite, $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$ commute avec l'intégrale puisque les $I_{0,+}^1$ intégrales fractionnaires commutent.

Ainsi, au second membre de l'équation (4.29) nous avons la série

$$\Sigma_{n \geq 0} \eta^n \left[(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1 \right]^n (1), \text{ dont la somme est } \left(Id - \eta (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1 \right)^{-1} (1),$$

à condition que cette somme existe.

Ce point est vérifié facilement, notons que $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1$ est une convolution, dont le noyau R est positif. Par conséquent, l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1$ préserve la positivité : pour chaque fonction positive g , $f = (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1 g$ est également positive. Pour une telle fonction g dans \mathbb{X}_χ avec $\chi > 1$, ceci implique $\|f\|_\chi \leq \|g\|_\chi$. Ainsi, la série $\Sigma_{n \geq 0} \eta^n ((Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1)^n (1)$ est dans \mathbb{X}_χ et la proposition suivante est prouvée.

Proposition 4.3.4. *Pour les Z définis par l'équation (4.5) nous avons*

$$\langle e^{\eta(Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1})} \rangle = 1 + \eta \left[R(t + t_1) * (Id - \eta(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1)^{-1}(1) \right] (t_2 - t_1). \quad (4.30)$$

Au second membre l'opérateur $(Id - \eta(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1)$ est inversible (dans \mathbb{X}_χ) et son inverse est $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} - \eta I_{0,+}^1)$. Nous avons donc une autre expression de l'équation (4.30) :

$$\langle e^{\eta(Z_{t_2} - Z_{t_1})} \rangle = 1 + \eta \left[R(t + t_1) * (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} - \eta I_{0,+}^1)^{-1}(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})(1) \right] (t_2 - t_1). \quad (4.31)$$

Dans le cas limite où $\gamma = 1$, l'expression de $\langle e^{\eta(Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1})} \rangle$ ne dépend plus de t_1 (voir la ligne pointillée de la figure (4.11)) et son expression est donnée par :

$$\langle e^{\eta(Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1})} \rangle = e^{\frac{t_2 - t_1}{\Lambda + 1}} \quad (4.32)$$

La fonction caractéristique $\langle e^{-\eta(Z_{t_2} - Z_{t_1})} \rangle$ s'obtient en effet par la méthode de Monte Carlo. Le second membre de (4.30) ou (4.25) est ensuite calculé explicitement, ou par discrétisation selon le cas.

4.3.3 Preuve numérique

La simulation par la méthode de Monte Carlo est basée sur des tirages effectués numériquement, de nombres pseudo-aléatoires représentant les N_n et les W_n . La méthode qui nous a permis de simuler le modèle stochastique du MIM est un peu différente et nous n'en parlerons pas. L'algorithme pour simuler ces deux V.A. est décrit à l'annexe A. Dans le cas du f-MIM, on suit l'ensemble des particules à chaque instant. A l'instant $n\tau$ on inspecte les particules une à une. Celles qui ont préalablement tiré une durée d'immobilisation allant au delà de $n\tau$ ne doivent pas bouger. Pour chacune des autres, il convient de savoir quand exactement elle a terminé l'étape précédente (prenons par exemple à l'instant θ). Ensuite on la déplace de la longueur $v\tau + lN_n$ qui est sa nouvelle position à l'instant $\theta + \tau$, et elle tire une durée d'immobilité, et ainsi de suite. Pour cela on a besoin d'un tableau pour la position courante de chaque particule, et d'un tableau pour le temps qu'il lui reste à passer en étant immobile. Ces tableaux sont réactualisés à chaque instant $n\tau$. La mise en oeuvre de ceci repose donc sur une comptabilité précise du mouvement de chaque particule. Elle repose aussi sur le tirage de variables aléatoires ayant les propriétés des N_n et des W_n . Des réalisations de telles variables aléatoires se déduisent de celles de variables

uniformément réparties, elles mêmes obtenues par un générateur de nombre aléatoires.

La figure (4.8) illustre numériquement la comparaison de l'équation (4.20) avec le résultat de la méthode de Monte Carlo (ici $\eta = q \in \mathbb{R}$). Nous avons vérifié que cette démarche donne le même résultat pour η le long de n'importe quel chemin complexe dans le demi-plan des parties réelles positives. Les figures (4.9) et (4.10) montrent la partie réelle et la partie imaginaire de $\langle e^{-iq[Z_{t_2} - Z_{t_1}]} \rangle$, les lignes correspondent à la fonction f de l'équation (4.20) et les symboles sont obtenus par la méthode de Monte Carlo.

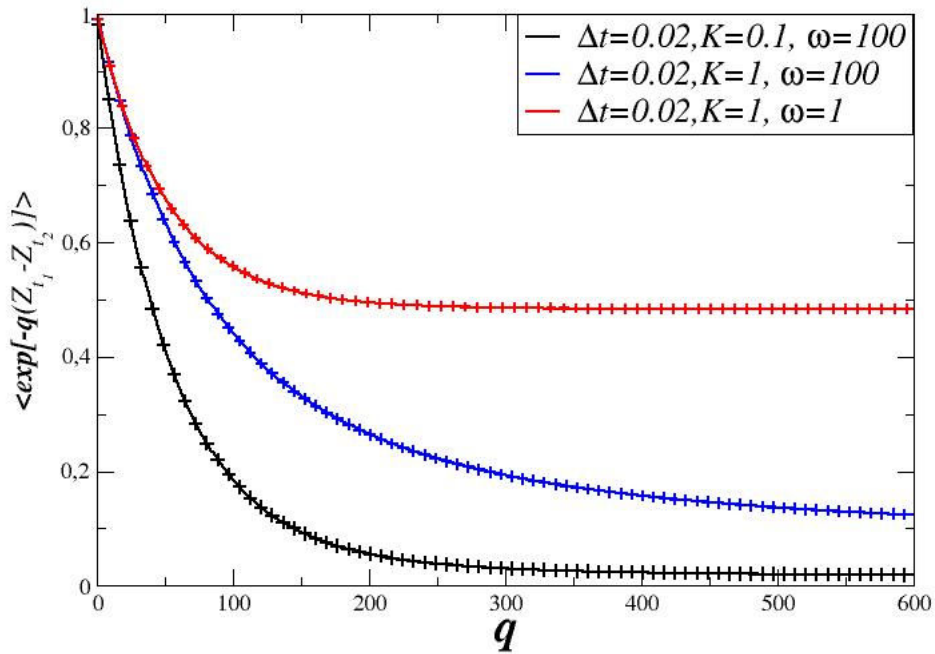


FIG. 4.8: Illustration numérique de l'équation (4.20), avec $\eta \in \mathbb{R}$ et $t_1 = 0.5$. Les symboles représentent la simulation de $\langle e^{-q[Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}]} \rangle$ par la méthode de Monte Carlo, les lignes représentent la fonction f

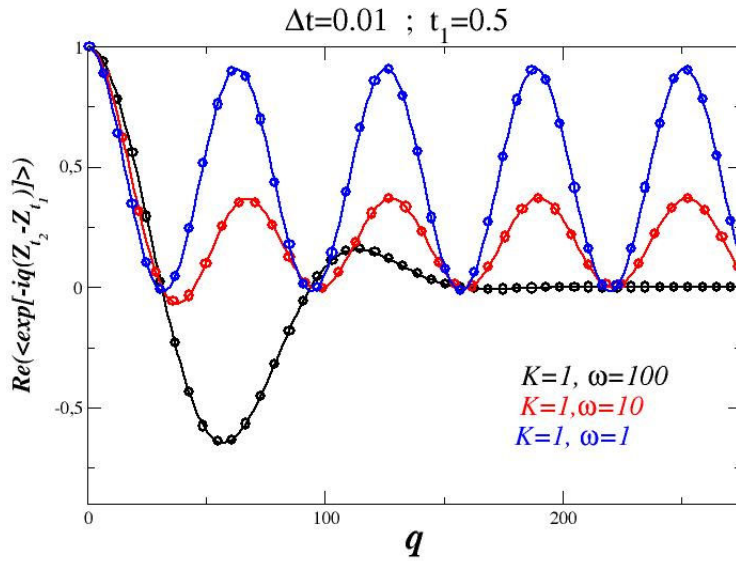


FIG. 4.9: Illustration numérique de la partie réelle de l'équation (4.20) avec η imaginaire pur. Les symboles représentent la simulation de Monte Carlo de $\langle e^{-iq[Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}]} \rangle$, les lignes représentent la fonction f

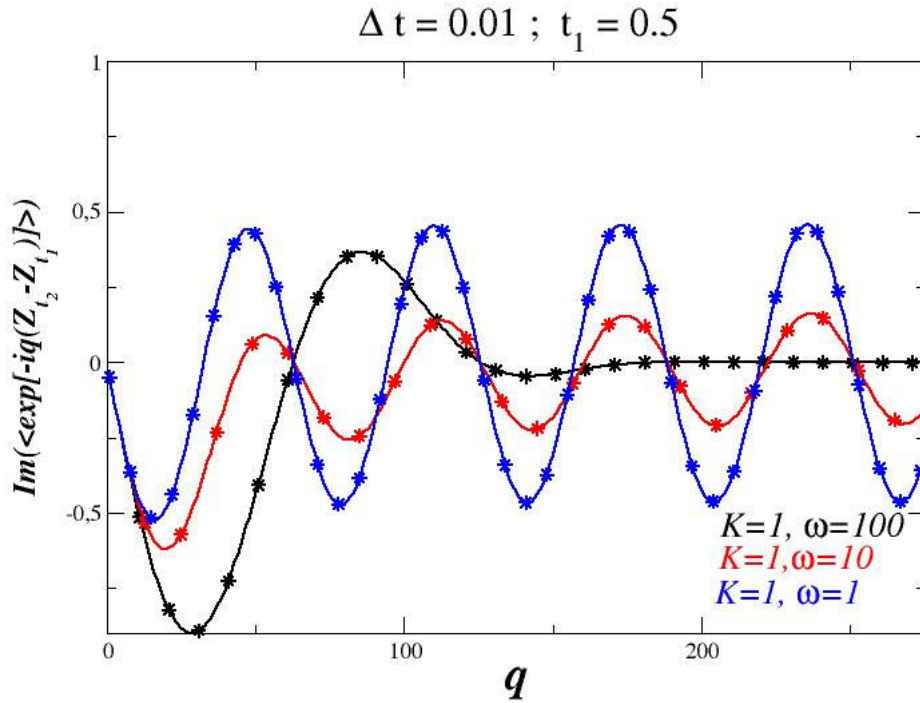


FIG. 4.10: La partie imaginaire de l'équation (4.20) comparée avec la marche au hasard avec les mêmes paramètres que pour la figure (4.9).

Au second membre de l'équation (4.30) qui donne la fonction caractéristique $\langle e^{\eta(Z_{f-MIM,t_2} - Z_{f-MIM,t_1})} \rangle$ du modèle f-MIM, nous avons la convolution de deux fonctions. La première $R(t + t_1)$ est une fonction de Mittag-Leffler, cette fonction se calcule généralement en inversant la transformée de Laplace, par une intégration sur un intervalle infini. La seconde s'obtient en appliquant à la fonction constante 1 l'opérateur $(Id - \eta(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1} I_{0,+}^1)^{-1} (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$. Ces deux fonctions se calculent à l'aide d'une méthode numérique décrite dans [58], dont nous rappelons le principe ici.

L'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$ est discrétisé selon la méthode des trapèzes [28], dont nous déduisons une approximation pour $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$ après avoir inversé la matrice triangulaire qui représente $Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma}$ [58]. Le développement de cette méthode est donné dans l'annexe (D), il permet de calculer rapidement la fonction de Mittag-Leffler $R = (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}(1)$.

L'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} - \eta I_{0,+}^1)^{-1} (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$, est discrétisé en utilisant la même méthode que pour $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$. Le second membre de l'équation (4.31) ainsi obtenu a été comparé avec succès avec la simulation par la méthode de Monte Carlo, la figure (4.11) illustre l'excellent accord entre ces deux méthodes.

Dans le cas de l'équation de Fokker-Planck fractionnaire, nous avons illustré numériquement la comparaison de l'équation (4.27) avec la marche au hasard. les figures (4.12) et (4.13) représentent respectivement la partie réelle et la partie imaginaire de l'équation (4.27), comparée avec la simulation par la méthode de Monte Carlo.

Ceci va nous permettre de déterminer $\langle e^{iq[X_{Z_{t_2}} - X_{Z_{t_1}}]} \rangle$

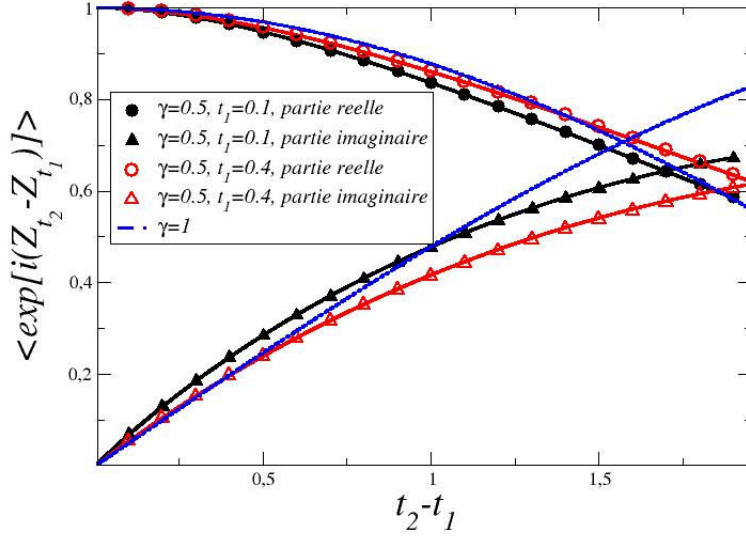


FIG. 4.11: La fonction caractéristique de $\langle e^{iq[Z_f - MIM, t_2] - Z_f - MIM, t_1]} \rangle$ pour $\gamma = 0.5$, $\Lambda = 1$ avec deux valeurs de t_1 ($t_1 = 0.1$; $t_1 = 0.4$). Les lignes continues représentent l'équation (4.31), les symboles sont obtenus par la méthode de Monte Carlo.

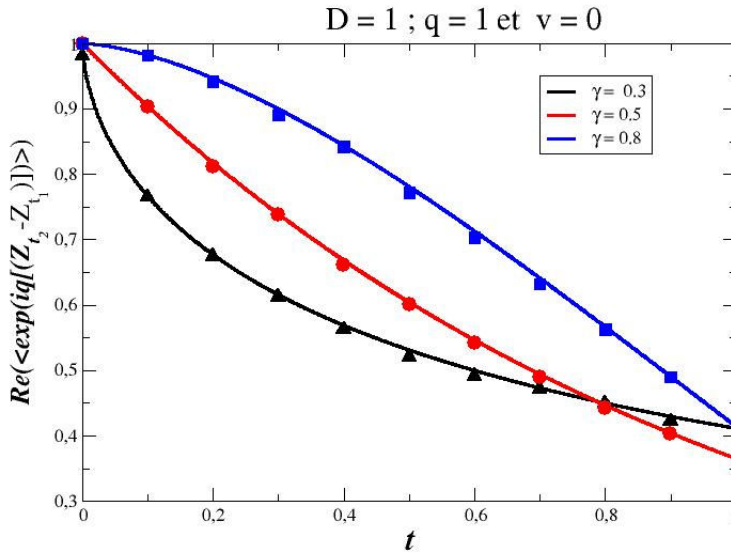


FIG. 4.12: Comparaison de la partie réelle de l'expression $\langle e^{iq[Z_{FFPE, t_2} - Z_{FFPE, t_1}]} \rangle$ avec la méthode de Monte Carlo, pour différentes valeurs de γ ($\gamma = 0.3$, $\gamma = 0.5$, $\gamma = 0.8$) et $\Lambda = 1$ avec $D = 1$, $q = 1$ et $t_1 = 0$. Les lignes continues représentent l'équation (4.27), les symboles sont calculés par la méthode de Monte Carlo.

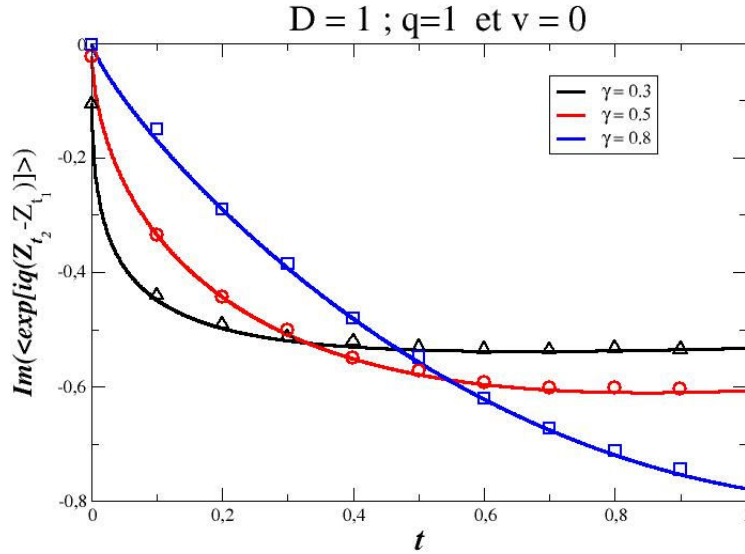


FIG. 4.13: La partie imaginaire de l'expression $\langle e^{iq[Z_{FFPE,t_2} - Z_{FFPE,t_1}]} \rangle$ comparée avec la marche au hasard avec le même paramètres que pour la figure (4.12).

4.4 L'espérance mathématique des incréments d'un mouvement Brownien subordonné par l'inverse d'un subordonateur de Lévy

Les incréments du mouvement Brownien standard sont indépendants de tout ce qui s'est passé avant (c'est un processus de Lévy) et d'autre part leur distribution ne dépend que de leur durée. Nous allons en déduire, en utilisant le résultat du paragraphe (4.3.1), une expression pour la fonction caractéristique d'un mouvement Brownien subordonné par l'inverse d'un subordonateur de Lévy. Un tel résultat peut être obtenu pour des subordonateurs aussi généraux que ceux considérés aux paragraphe (4.3.1). Nous précisons ensuite ce qu'il implique lorsqu'on considère les subordonateurs correspondant aux trois modèles plus particulièrement étudiés dans ce mémoire. Nous illustrerons ensuite notre résultat par des comparaisons numériques entre l'expression obtenue pour la fonction caractéristique, et des simulations de Monte Carlo.

4.4.1 Incréments d'un mouvement Brownien subordonné : cas général d'un subordonneur de Lévy

Comme au paragraphe (4.3.1) Z_t représente l'inverse d'un subordonneur de Lévy, pour lequel on a

$$\langle e^{-\eta(Z_{t_2} - Z_{t_1})} \rangle = F(\eta, t_1, t_2).$$

Nous étudions les increments de

$$x_t = vZ_t + \sqrt{2D}B_{Z_t},$$

où B_t représente un mouvement Brownien standard. Pour $t_2 > t_1$, la fonction caractéristique de $x_{t_2} - x_{t_1}$ est donnée par $\langle e^{iqv(x_{t_2} - x_{t_1})} \rangle$, avec

$$x_{t_2} - x_{t_1} = v(Z_{t_2} - Z_{t_1}) + \sqrt{2D}(B_{Z_{t_2}} - B_{Z_{t_1}}).$$

L'incrément $Z_{t_2} - Z_{t_1}$ peut prendre n'importe quelle valeur Θ , et nous appelons $\mathcal{P}(Z_{t_2} - Z_{t_1} \in \{d\Theta\})$ la probabilité pour qu'il appartienne à l'intervalle $(\Theta, \Theta + d\Theta)$.

Pour chaque valeur de Θ , la V.A. $B_{Z_{t_2}} - B_{Z_{t_1}}$ est distribuée comme $\sqrt{2D\Theta}B_1$, où B_1 ne dépend pas de Θ . Par conséquent l'espérance $\langle e^{iqv(x_{t_2} - x_{t_1})} \rangle$ est donnée par

$$\begin{aligned} \langle e^{iqv(x_{t_2} - x_{t_1})} \rangle &= \int_{\Theta \in \mathbb{R}^+} e^{iqv\Theta} e^{-q^2 D \Theta} \mathcal{P}(Z_{t_2} - Z_{t_1} \in \{d\Theta\}) \quad 0 \leq \Theta \leq t_2 - t_1 \\ &= \int_{\Theta \in \mathbb{R}^+} e^{-(iqv + q^2 D)\Theta} \mathcal{P}(Z_{t_2} - Z_{t_1} \in \{d\Theta\}). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Cette dernière intégrale n'est autre que $F(\eta, t_1, t_2)$ avec $\eta = -iqv + q^2 D$. Par conséquent la propriété suivante est démontrée.

Proposition 4.4.1. *Soit x_t le processus défini par*

$$x_t = x_0 + vZ_t + \sqrt{2D}B(Z_t),$$

Z_t étant l'inverse d'un subordonneur de Lévy U_z , les U_z et B_t étant indépendants avec

$$\langle e^{-\eta(Z_{t_2} - Z_{t_1})} \rangle = F(\eta, t_1, t_2).$$

Alors la fonction caractéristique des incréments de x_t est

$$\langle e^{iqv(x_{t_2} - x_{t_1})} \rangle = F(-iqv + Dq^2, t_1, t_2), \quad (4.34)$$

4.4.2 Cas particuliers des modèles F-MIM,FFPE et MIM

Dans le modèle MIM le déplacement d'une particule donnée entre les instants t_1 et t_2 est distribué comme :

$$x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1} = v(Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1}) + \sqrt{2D(Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1})} N_1 \quad (4.35)$$

A cause de (4.35), on en déduit que la fonction caractéristique $\langle e^{-iq(x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1})} \rangle$ est

$$\begin{aligned} \langle e^{-iq(x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1})} \rangle &= \langle e^{(-iq + Dq^2)(Z_{MIM,t_2} - Z_{MIM,t_1})} \rangle \\ &= f(-iqv + Dq^2, K, \omega, t_1, t_2). \end{aligned} \quad (4.36)$$

f étant défini par (4.21)

Une expression assez simple de $\langle e^{iq(x_{t_2} - x_{t_1})} \rangle$ correspond au modèle FFPE. Dans ce cas, on a :

$$\langle e^{iq(x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1})} \rangle = 1 + (iqv - q^2D) \left[\frac{(t + t_1)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} * E_\gamma \left((iqv - q^2D) \frac{t^\gamma}{\Lambda} \right) \right] (t_2 - t_1) \quad (4.37)$$

Rappelons que l'expression (4.37) est seulement valable dans le cas où $\gamma \in]0, 1]$. Dans le cas limite où $\gamma = 1$, le FFPE correspond au mouvement Brownien (avec biais pour $v \neq 0$), et quand la donnée initiale $x_0 = 0$, on a :

$$\langle e^{iq(x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1})} \rangle = \langle e^{iq(x_{FFPE,(t_2-t_1)})} \rangle,$$

dans ce cas :

$$\langle e^{iq(x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1})} \rangle = e^{-Dq^2|t_2-t_1|} e^{iqv(t_2-t_1)}. \quad (4.38)$$

Dans le cas du modèle f-MIM, la fonction caractéristique du déplacement s'écrit sous la forme suivante :

$$\langle e^{iq(x_{f-MIM,t_2} - x_{f-MIM,t_1})} \rangle = 1 + \eta [E_{1-\gamma}(-\Lambda(t + t_1)^{1-\gamma}) * (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} - \eta I_{0,+}^1)^{-1} (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})(1)] (t_2 - t_1), \quad (4.39)$$

avec $\eta = iqv - q^2D$.

4.4.3 Illustrations numériques

Comme au paragraphe précédent l'illustration numérique est obtenue en comparant la formule analytique et la simulation par la méthode de Monte Carlo.

Les figures (4.14) et (4.15) montrent la comparaison des solutions de l'équation (4.36) qui représente la fonction caractéristique des incréments $x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1}$ dans le cas du modèle MIM avec la marche au hasard, avec $\Delta t = 0.04$ et $t_1 = 3.95$.

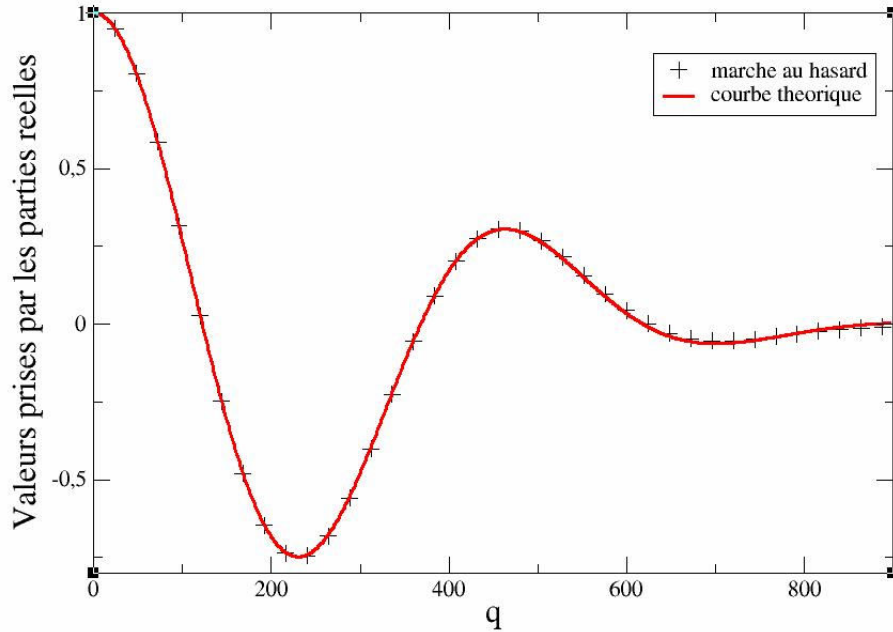


FIG. 4.14: La partie réelle de l'équation (4.36) comparée avec la marche au hasard, avec $D = 0.0001$, $v = 0.45$, $K = 0.4$ et $\omega = 500$. Le symbole représente la simulation de Monte Carlo de $\langle e^{-iq(x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1})} \rangle$, les lignes représentent l'équation (4.36) calculée numériquement

Dans le cas du f-MIM, la comparaison de l'équation (4.39) avec la simulation par la méthode de Monte Carlo est illustrée par la figure (4.16). Pour les deux valeurs de t_1 représentées ici, on voit une légère différence entre les deux méthodes, par contre le module (en trait sur la figure) est moins influencé que la phase.

Dans le cas de l'équation de Fokker-Planck fractionnaire, nous avons illustré numériquement la comparaison de l'équation (4.38) avec la marche au hasard, avec une vitesse nulle et $D = 1$.

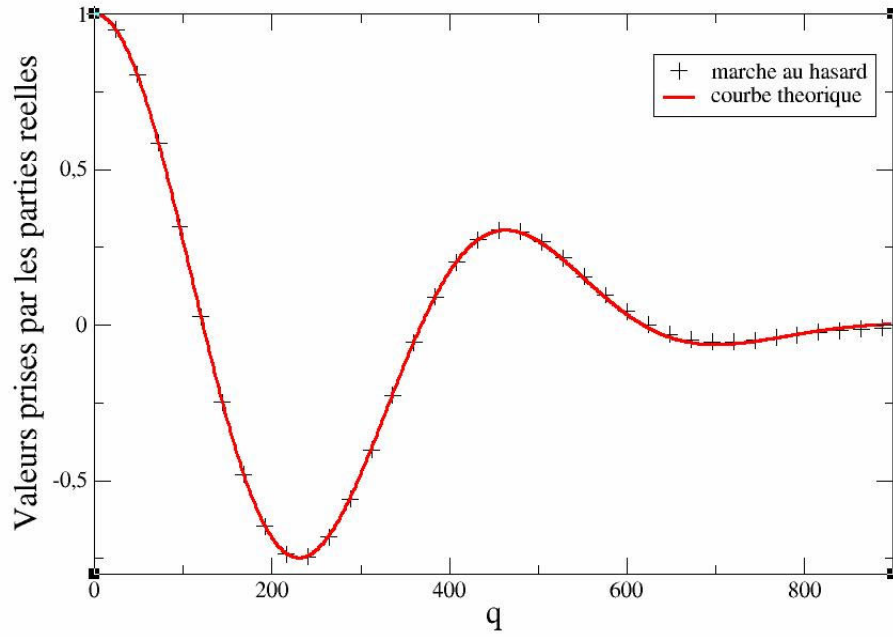


FIG. 4.15: La partie imaginaire de l'équation (4.36) comparée avec la marche au hasard, avec les mêmes paramètres que pour la figure 4.14

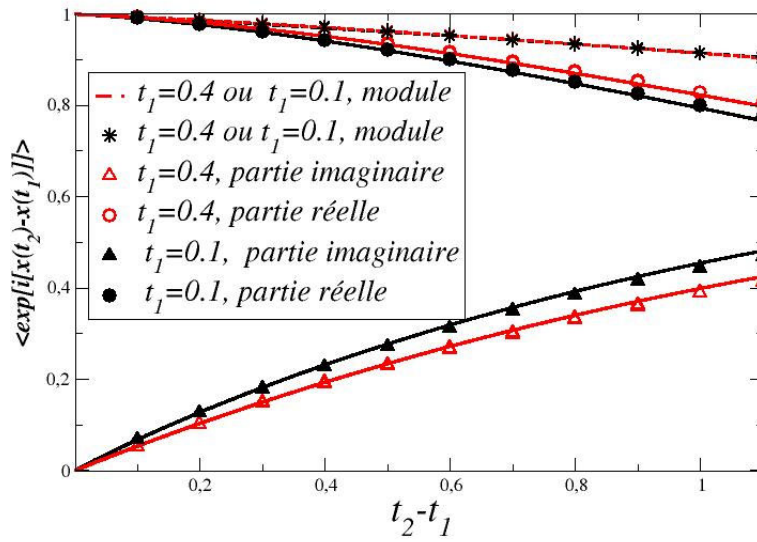


FIG. 4.16: Expression mathématique de $\langle e^{i[x_{f-MIM,t_2} - x_{f-MIM,t_1}]} \rangle$ pour $\gamma = 0.5$, $\Lambda = 1$, avec deux valeurs de t_1 ($t_1 = 0.1$; $t_1 = 0.4$). Les lignes continues représentent l'équation (4.39), les symboles représentent la méthode de Monte Carlo.

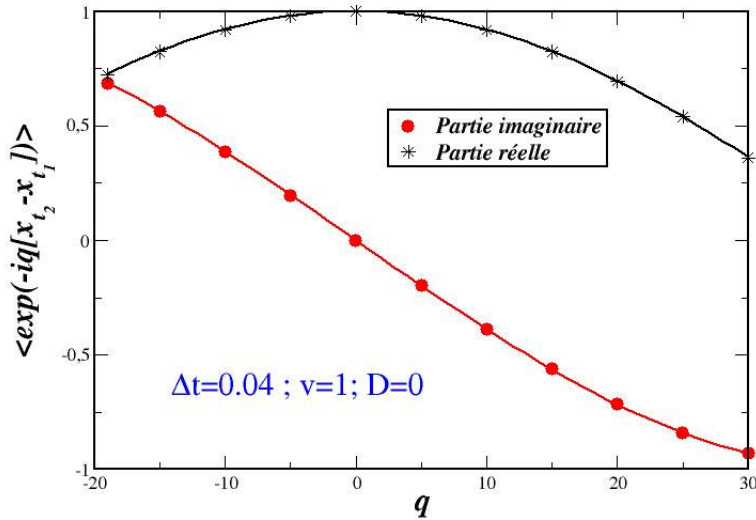


FIG. 4.17: Illustration de la partie réelle et de la partie imaginaire de $\langle e^{i[x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1}]} \rangle$ comparées avec la simulation par la méthode de Monte Carlo. Les lignes continues représentent l'équation (4.38), les symboles sont calculés par la méthode de Monte Carlo.

Les fonctions caractéristiques obtenues au paragraphe précédent pour les incréments des mouvements Browniens subordonnés ont un comportement aux grandes valeurs de q qui nous a semblé intéressant. En effet, ce comportement asymptotique met en évidence les paramètres du subordonateur. Il ne dépend pas des paramètres D et ν du mouvement Brownien.

4.5 Limite de la fonction caractéristique du déplacement

Mettons en évidence ce comportement asymptotique pour chacune des catégories des processus étudiées.

4.5.1 Cas associé à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire

L'expression (4.37) peut être écrite de la façon suivante

$$\langle e^{iq(x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1})} \rangle = F_{FFPE}(-iq\nu + q^2D, \gamma, t_1, t_2 - t_1) \quad (4.40)$$

avec

$$F_{FFPE}(\eta, \gamma, t_1, t_2 - t_1) = 1 - \frac{\eta}{\Lambda} \left[\frac{(t + t_1)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} * E_\gamma\left(\frac{t^\gamma \eta}{\Lambda}\right) \right] (t_2 - t_1), \quad (4.41)$$

Aux grandes valeur de q , la limite de l'équation (4.41) peut être déterminée analytiquement grâce à la remarque suivante et au comportement asymptotique de la fonction de Mittag-Leffler. Nous allons voir que cette limite est différente de zéro quand γ est différent de 1. La remarque suivante permet de gérer la convolution quand q , donc $-iqv + q^2 D$ tend vers l'infini.

Remarque 4.5.1. Soient K une fonction intégrable et φ une fonction continue sur \mathbb{R}^+ avec $\int_0^{+\infty} K(t)dt = 1$. Alors la convolution $\int_0^t \frac{1}{l} K\left(\frac{t'}{l}\right) \varphi(t - t') dt'$ tend vers $\varphi(t)$ quand $l \rightarrow 0$.

Proposition 4.5.1. (i) Pour $\gamma < 1$, $D > 0$ et $t_1 > 0$ la limite de $F_{FFPE}(-iqv + Dq^2, \gamma, t_1, t_2 - t_1)$ tend vers $1 - \left(I_{0,+}^{1-\gamma} \frac{(t_1 + t)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} \right) (t_2 - t_1) \neq 0$ quand $q \rightarrow \infty$.

(ii) Par ailleurs, quand $\frac{t_2 - t_1}{t_1}$ est petit, une approximation de cette limite est $1 - \frac{\sin \pi \gamma}{\pi(1 - \gamma)} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_1} \right)^{1-\gamma}$.

Preuve. La preuve s'appuie sur le comportement asymptotique de la fonction de Mittag-Leffler. En effet, d'après Podlubny [77], pour tout entier $p \geq 1$, la fonction de Mittag-Leffler $E_\alpha(z)$ vérifie

$$E_\alpha(z) = \sum_{k=1}^{-p} \frac{z^{-k}}{\Gamma(1 - k\alpha)} + O(|z|^{-p-1}),$$

quand z tend vers l'infini avec un argument compris entre $\frac{\pi\alpha}{2}$ et π , pour $\alpha > 1$.

Pour p entier vérifiant $\frac{1}{p+1} < \gamma < \frac{1}{p}$, on a aussi :

$$E_\gamma(iqv - Dq^2 t^\gamma) = \frac{(iqv - Dq^2 t^\gamma)^{-1}}{\Gamma(1 - k\gamma)} + \sum_{k>1}^p (-1)^{k+1} \frac{(iqv - Dq^2 t^\gamma)^{-k}}{\Gamma(1 - k\gamma)} + h\left((iqv - Dq^2 t^\gamma)\right)$$

avec $h(x) = O(x^{-p-1})$.

En appliquant la remarque avec $p = 1$ si $\gamma > 1/2$ ou avec $p > 1$ si $\frac{1}{p+1} < \gamma \leq \frac{1}{p}$ et pour $D > 0$, la relation (i) de la proposition est vérifiée, avec

$$F_{FFPE}(iqv - Dq^2, \gamma, t_1, t_2 - t_1) \mapsto 1 - \left(I_{0,+}^{1-\gamma} \frac{(t_1 + t)^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} \right) (t_2 - t_1).$$

Pour $t_1 = 0$, cette limite s'obtient différemment et est égale à zéro, mais pour $t_1 > 0$ elle est approximativement donnée par $1 - \frac{\sin \pi \gamma}{1 - \gamma} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_1} \right)^{\pi(1-\gamma)}$ ce qui démontre (ii) avec $t_2 - t_1$ petit (voir figure (4.18)). \square

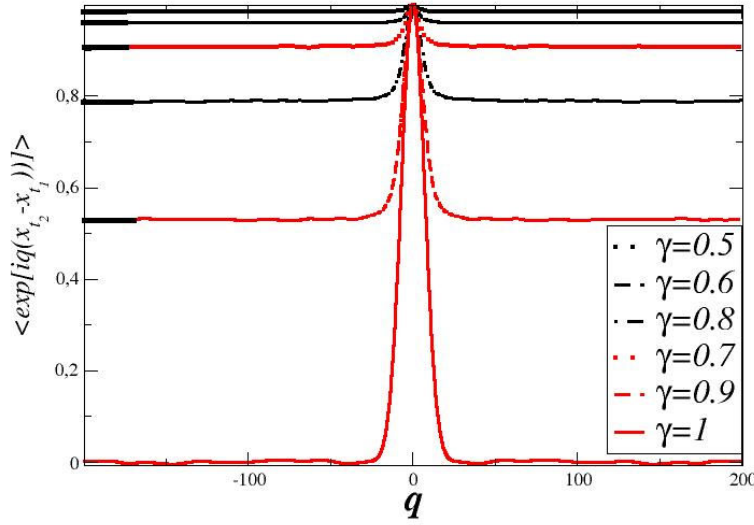


FIG. 4.18: Expression mathématique de $\langle e^{i[x_{FFPE,t_2} - x_{FFPE,t_1}]} \rangle$ pour différentes valeurs de γ , les traits gras de couleur noire représentent $\left[1 - \frac{\sin \pi \gamma}{\pi(1 - \gamma)} \left(\frac{t_2 - t_1}{t_1} \right)^{1-\gamma} \right]$. Avec $D=1$, $t_1 = 16$ et $t_2 - t_1 = 0.01$

Pour les processus associés au f-MIM, nous n'avons pas d'expression analytique pour la limite de la fonction caractéristique des déplacements. Cependant la méthode de Monte Carlo permet de simuler cette fonction lorsque q est grand, ce qui met en évidence un comportement similaire.

4.5.2 Cas associé au modèle f-MIM

Aux grandes valeurs de Dq^2 et de t_1 , la partie réelle de $\langle e^{iq[x_f-MIM,t_2-x_f-MIM,t_1]} \rangle$ converge vers une constante comme on voit sur la figure (4.19). Par ailleurs, on voit que la limite est différente de zéro quand $\gamma < 1$ et $t_1 > 0$.

La figure (4.20) montre que le comportement asymptotique de $\langle e^{iq(x_f-MIM,t_2-x_f-MIM,t_1)} \rangle$ est vraiment en puissance du temps. Ce comportement est observé par la méthode de Monté Carlo. Nous avons de plus observé que $1 - \lim_{q \rightarrow \infty} \text{Re} \left(\langle e^{iq(x_{t_2}-x_{t_1})} \rangle \right)$ est proportionnel à $\left(\frac{t_2 - t_1}{t_1} \right)^{1-\gamma}$ lorsque $\frac{t_2 - t_1}{t_1}$ est petit, comme au paragraphe précédent.

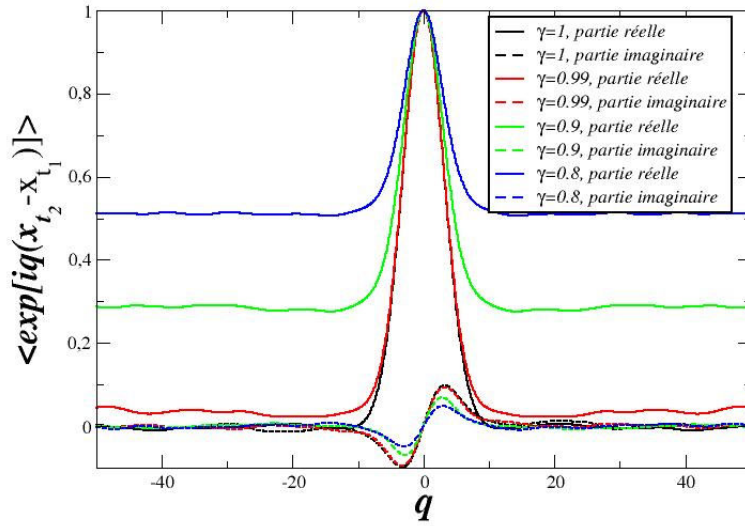


FIG. 4.19: Représentation de la partie réelle et de la partie imaginaire de $\langle e^{iq(x_f-MIM,t_2-x_f-MIM,t_1)} \rangle$ en fonction de q pour différentes valeurs de γ . On a pris $D = 1$, $v = 1$ $\Lambda = 1$.

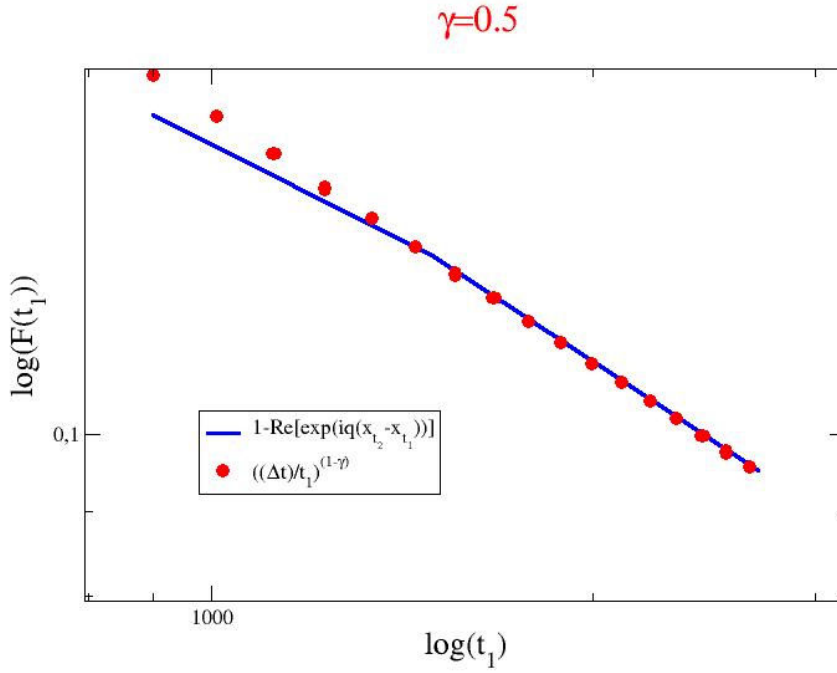


FIG. 4.20: Comparaison de $\left[1 - \lim_{q \rightarrow \infty} \text{Re} \left(\langle e^{iq(x_{f-MIM,t_2} - x_{f-MIM,t_1})} \rangle \right)\right]$, avec $\left(\frac{t_2 - t_1}{t_1}\right)^{1-\gamma}$ en coordonnées logarithmiques. Avec $\gamma = 0.5$ et $D = 0.1$

4.5.3 Cas associé au modèle MIM

Quand $q \rightarrow \infty$ la fonction caractéristique $\langle e^{iq(x_{MIM,t_2} - x_{MIM,t_1})} \rangle$ tend vers

$$\frac{K}{Kt_1} e^{-\omega(t_2 - t_1)} \left[1 - e^{-\omega(K+1)t_1}\right].$$

Ici aussi le comportement de cette limite en fonction de $t_2 - t_1$ indique les valeurs des paramètres ω et K , si t_1 est grand devant $t_2 - t_1$.

Ces résultats s'étendent facilement au cas des processus stables (ou vols de Lévy) subordonnés.

4.6 La fonction caractéristique des déplacements d'un vol de Lévy subordonné

Les propriétés essentielles qui ont été utilisées pour avoir la fonction caractéristique du déplacement du mouvement Brownien subordonnée peuvent être utilisés avec des processus plus généraux à condition que ces processus aient des incréments indépendants et que leur fonction caractéristique soit donnée par $e^{-\varphi(q)(t_2-t_1)}$.

Le vol de Lévy $L_{\alpha,\beta}$ (voir paragraphe 3.4.2) d'exposant de stabilité $\alpha \in]0,2[$ et de paramètre de symétrie $\beta \in [-1,1]$ satisfait bien ces deux conditions, car en plus de l'indépendance de ses incréments, sa fonction caractéristique est donnée par $e^{-t\varphi_{\alpha,\beta}(q)}$, où la fonction $\varphi_{\alpha,\beta}(q)$ est définie par :

$$\varphi_{\alpha,\beta}(q) = |q|^\alpha \left(1 - i\beta \frac{q}{|q|} \omega(q, \alpha) \right)$$

avec

$$\begin{aligned} \omega(q, \alpha) &= \tan \frac{\pi\alpha}{2} \quad \text{pour} \quad \alpha \neq 1, \\ \omega(q, \alpha) &= -\frac{2}{\pi} \text{Ln}|q| \quad \text{pour} \quad \alpha = 1 \end{aligned}$$

En utilisant un tel vol de Lévy à la place du mouvement Brownien, on obtient le processus

$$x_t = x_0 + vZ_t + D^{\frac{1}{\alpha}} L_{\alpha,\beta}(Z_t).$$

A cause de l'indépendance de des incréments de $L_{\alpha,\beta}$, la proposition 4.4.1 s'étend pour donner le resultat suivant

Proposition 4.6.1. *Soit x_t le processus*

$$x_t = x_0 + vZ_t + D^{\frac{1}{\alpha}} L_{\alpha,\beta}(Z_t),$$

Z_t étant l'inverse d'un subordonateur de Lévy U_z , les processus U_z et $L_{\alpha,\beta}(t)$ étant indépendants, avec $\langle e^{-\eta(Z_{t_2}-Z_{t_1})} \rangle = F(\eta, t_1, t_2)$. Alors la fonction caractéristique de x_t vérifie

$$\langle e^{iq(x_{t_2}-x_{t_1})} \rangle = F(-ivq + D\varphi_{\alpha,\beta}(q), t_1, t_2) \quad (4.42)$$

La proposition est illustrée par les figures (4.21)-(4.25). Ces figures comparent les deux membres de l'équation(4.42) dans le cas d'un vol de Lévy $L_{\alpha,\beta}$ subordonné par l'inverse d'un subordonateur strictement stable (c'est à dire

$U_{FFPE,z}$). Toutes ces figures montrent le premier membre de l'équation (4.42) déterminé par la méthode de Monte Carlo, ainsi que le second membre calculé en discrétisant la fonction de Mittag-Leffler et la convolution. Pour toutes ces figures, le premier membre est représenté par des symboles alors que le second est représenté par des lignes.

Lorsque $q \rightarrow \infty$ on obtient par conséquent la même limite que dans le cas du mouvement Brownien, quelles que soient les valeurs des paramètres α, β, D et v . Le comportement de $\langle e^{iq(x_{t_2} - x_{t_1})} \rangle$ aux grandes valeurs de q ne dépend que des propriétés de F , c'est à dire du subordonneur.

En d'autres termes, ce comportement asymptotique est entièrement déterminé par les effets de mémoire, eux mêmes représentés par le subordonneur. Aux grandes valeurs de q la fonction caractéristique des déplacements caractérise la mémoire et n'est pas influencée par la distribution des sauts.

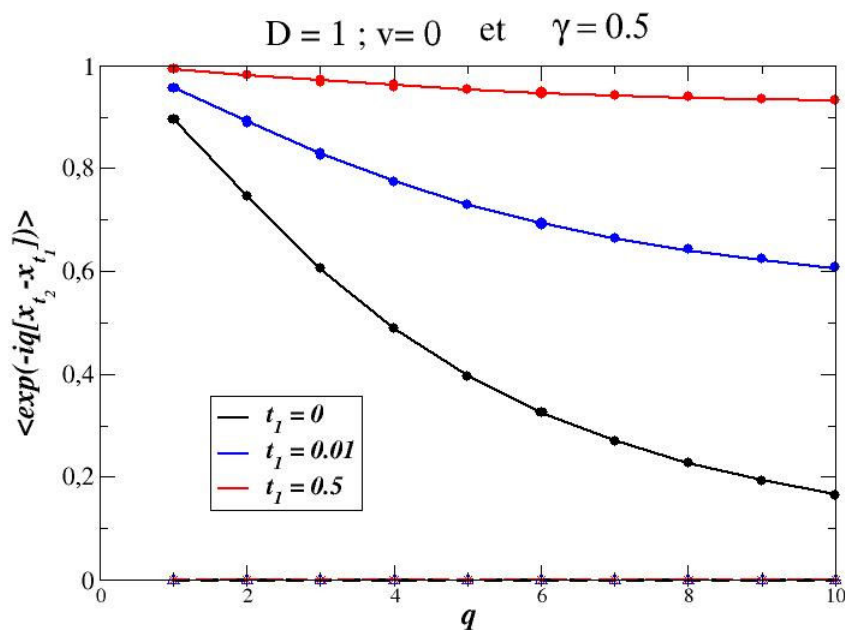


FIG. 4.21: Illustration numérique de la proposition, dans le cas d'un vol de Lévy $DL_{\alpha,\beta}$ subordonné par l'inverse du subordonneur strictement stable $\cos \frac{\pi\gamma}{2} L_{\gamma,1}$. La partie imaginaire est évidemment nulle. Les paramètres sont $\alpha = 1.5, \beta = 0, \gamma = 0.5, D = 1$ et $v = 0$. Plusieurs valeurs de t_1 sont représentées et $t_2 = t_1 + dt$ où $dt = 0.01$

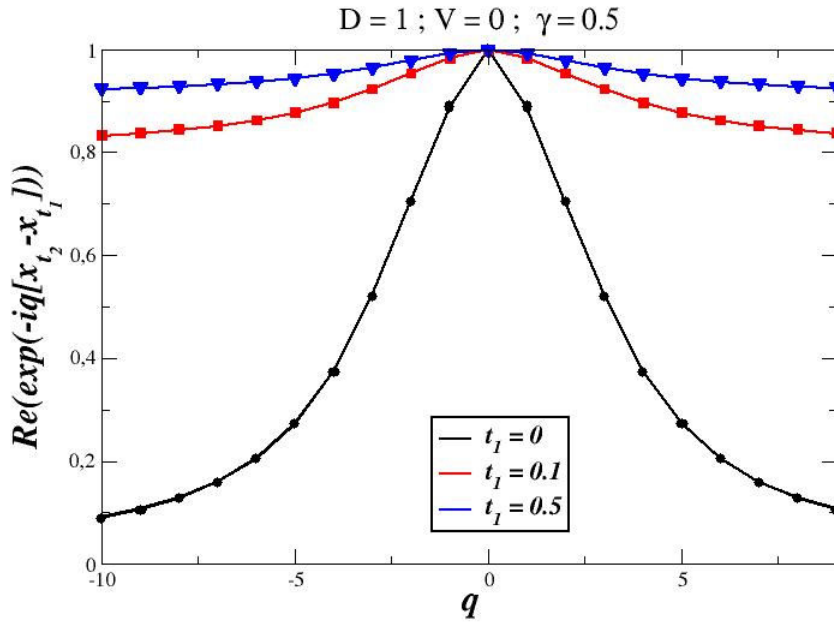


FIG. 4.22: Partie réelles des deux membres de (4.42) pour un vol de Lévy assymétrique $L_{\alpha,1}$ subordonné par l'inverse du subordonateur stable $\cos \frac{\pi\gamma}{2} L_{\gamma,1}$. Les paramètres sont $\alpha = 1.5, \gamma = 0.5$. Plusieurs valeurs de t_1 ont été représentées et $t_2 = t_1 + dt$ où $dt = 0.01$

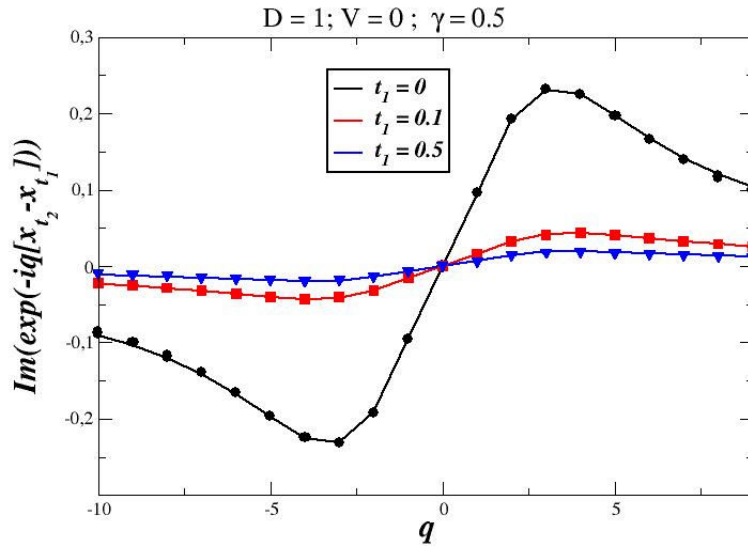


FIG. 4.23: Partie imaginaire des deux membres de (4.42) dans les mêmes conditions que pour la figure 4.22

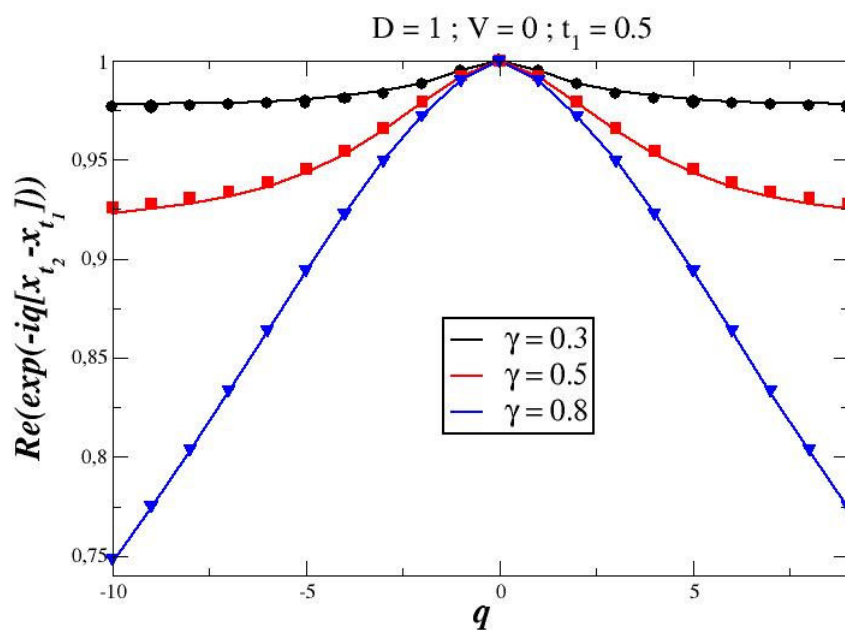


FIG. 4.24: Partie réelle des deux membres de (4.42) comme pour la figure (4.22) mais avec plusieurs paramètres γ , t_1 étant fixé et $t_2 = t_1 + dt$.

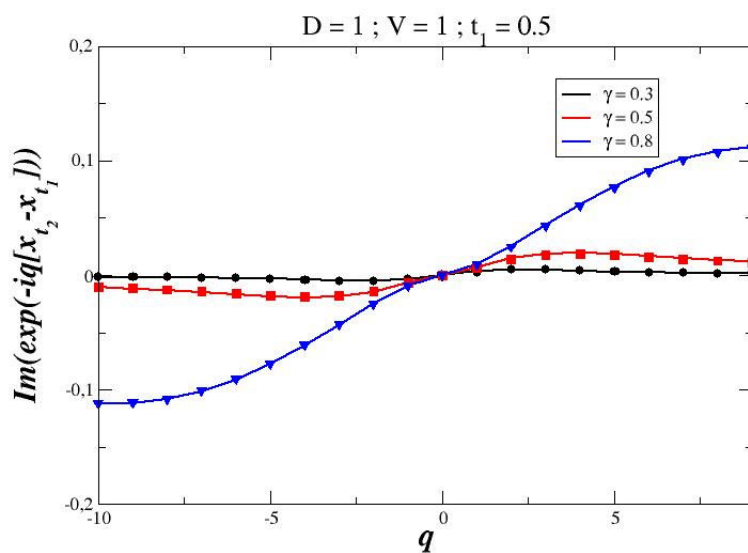


FIG. 4.25: Partie imaginaire des deux membres de (4.42) dans les mêmes conditions que pour la figure 4.24.

4.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons obtenu une expression mathématique pour la fonction caractéristique des incréments de mouvements Browniens subordonnés en inversant divers processus de Lévy. Nous avons considéré des subordinateurs stables avec ou sans biais, représentant des effets de mémoire déclinant lentement. Nous avons aussi utilisé un subordinateur de Lévy n'appartenant pas à la classe des processus stables, à savoir un processus de Poisson composite représentant cette fois-ci une mémoire décroissant rapidement.

Ce résultat a été illustré numériquement, en déterminant la fonction caractéristique par la méthode de Monte Carlo, l'expression mathématique étant, selon le cas, explicite (dans le dernier cas) ou impliquant des convolutions. Avec les subordinateurs stables, les convolutions doivent être calculées numériquement, c'est plus compliqué avec un biais.

Ce résultat s'étend facilement à des vols de Lévy subordonnés. Il a aussi été illustré numériquement dans ce cas, par contre ces illustrations sont très parcellaires compte tenu du grand nombre de paramètres impliqués.

Ce résultat a permis de voir que la fonction caractéristique des incréments de vols de Lévy subordonnés présente une limite. Cette limite s'obtient en donnant de grandes valeurs à la variable conjuguée des incréments.

Dans les trois cas abordés, cette limite ne dépend que des paramètres du subordinateur, et pas de ceux du processus parent. Nous l'avons vérifié analytiquement dans le cas d'un subordinateur stable sans biais. Avec un biais, on l'observe numériquement grâce à la simulation de Monte Carlo. C'est assez facile à voir dans le cas où le subordinateur est un processus de Poisson composite, pour lequel la fonction caractéristique a une expression explicite.

Nous pensons que la mise en évidence de cette limite est un résultat utilisable dans des expériences de RMN, puisqu'il permet d'extraire les paramètres décrivant la mémoire, dans des conditions telles qu'ils apparaissent dépouillés des paramètres décrivant l'aspect spatial d'un processus de transport. Observer directement cette limite avec des impulsions courtes pose des problèmes, car on ne peut pas travailler avec de grands gradients. Cependant, les expérimentateurs compensent en utilisant des impulsions plus longues. Interpréter les résultats devient plus délicat lorsqu'on augmente la durée des impulsions de gradient. Cependant, notre équipe a effectué des simulations de la fonction caractéristique alors obtenue, et retrouvé la même limite que ci-dessus.

Chapitre 5

Equation fractionnelle d'ordre variable pour la sous-diffusion

Sommaire

5.1	Modèle stochastique et particules mobiles ou immobiles	76
5.1.1	Modèle stochastique	77
5.1.2	Hypothèses et notations	78
5.1.3	Densité de particules mobiles à petite échelle	79
5.1.4	Densité de particules immobiles à petite échelle	82
5.1.5	Relation entre les densités de particules mobiles et immobiles	82
5.2	L'équation maitresse régissant la distribution de la densité de particule	84
5.2.1	Le flux de particules	84
5.2.2	Equation de conservation	88
5.3	Simulations numériques et comparaisons	88
5.3.1	Méthodes numériques	89
5.3.2	Simulations	90
5.4	Conclusion	97

Le MIM fractal et l'équation de Fokker-Planck fractionnaire représentent deux possibilités pour décrire la dispersion anormale dans des milieux où on a des raisons physiques de penser que les particules de fluide et de solutés subissent des retards irrégulièrement répartis. Le MIM fractal (f-MIM) présente un certain intérêt pour les milieux poreux dans lesquels d'une part un écoulement d'ensemble entraîne les particules dès qu'elles sont mobiles alors que d'autre part la matrice solide rend plausible un mécanisme de piégeage-relargage. Le MIM fractal s'adresse aux milieux où ce mécanisme semble actif alors que des

observations suggèrent des durées de piégeage particulièrement hétérogènes. Un but ultime de ce travail est la dispersion dans les milieux poreux insaturés [21]. Or, les modèles fractionnaires semblent présenter pour ces milieux d'autant plus d'intérêt que la saturation est faible. On a donc des raisons de penser que l'ordre de l'intégrale fractionnaire qui apparaît dans le modèle f-MIM risque fort d'être lié à ce paramètre, ainsi qu'à la vitesse de Darcy.

Dans une expérience de dispersion au sein d'une colonne, ce dernier paramètre ne dépend en général pas de la position. Par contre la saturation en dépend souvent [51] (pas toujours [37]). Ce paramètre peut être difficile à contrôler lorsque le fluide non mouillant est l'air, le fluide mouillant étant l'eau, ce qui correspond aux références ci-dessus. On obtient plus facilement des configurations uniformes lorsque le rapport de viscosité se rapproche de 1 comme lorsqu'on remplace l'air par de l'huile.

Afin de pouvoir traiter des saturations présentant plusieurs régimes de sous dispersion, nous traitons de la possibilité d'avoir dans le modèle f-MIM, une intégrale fractionnaire dont l'ordre γ dépend de la position. Pour simplifier, disons que $\gamma = \gamma_1$ dans une partie du milieu alors que $\gamma = \gamma_2$ dans l'autre. Pour fixer les idées, le cas où on a $\gamma < 1$ pour $0 < x < x_0$ et $\gamma_2 = 1$ pour $x > x_0$ semble pouvoir correspondre à certaines expériences. Le cas où $\gamma_2 = 0$ a déjà été traité [58].

Nous allons d'abord montrer qu'on obtient effectivement une edp analogue au modèle f-MIM avec deux valeurs différentes de γ , à partir d'un modèle stochastique. Ce dernier revient à supposer que les particules sont immobilisées pour des durées distribuées par une loi stable d'exposant γ_1 aux positions vérifiant $x < x_0$, alors que pour $x > x_0$ on a une distribution différente, associée à γ_2 . Après un raisonnement fondé sur des arguments probabilistes et l'évaluation des flux, nous proposerons une preuve plus numérique. Cette preuve numérique repose sur l'adaptation d'outils existants. Ces outils sont de deux sortes : il s'agit de la discrétisation d'edp et de la méthode de Monte Carlo.

5.1 Modèle stochastique et particules mobiles ou immobiles

Nous allons préciser un modèle stochastique permettant de tenir compte de la possibilité d'immobiliser les marcheurs pendant des durées aléatoires, dont la distribution dépend de la position. Nous établirons ensuite le lien entre les densités de particules mobiles et immobiles, à petite échelle.

Nous souhaitons représenter un milieu dans lequel les particules peuvent

être retenues. Nous supposons de plus qu'elles sont retenues pendant des durées aléatoires, avec des distributions différentes selon qu' on est dans la première partie E_1 de la colonne ou dans la seconde notée E_2 . Pour représenter le temps de séjour dans les pièges nous allons utiliser des variables aléatoires suivant des lois stables de Lévy. Comme il y a deux hétérogénéités différentes, on a besoin de deux sortes de variables aléatoires. Nous supposons d'un côté des temps de séjour indépendants distribués comme $(\Lambda_1\tau)^{1/\gamma_1}W_{\gamma_1}$ où W_{γ_1} représente une V.A. stable d'exposant γ_1 , dont la densité ψ_1 a pour transformée de Laplace $e^{-s\gamma_1}$. Bien entendu, γ_1 et γ_2 sont inférieurs ou égaux à 1. De l'autre côté nous avons $(\Lambda_2\tau)^{1/\gamma_2}W_{\gamma_2}$, W_{γ_2} ayant pour transformée de Laplace $e^{-s\gamma_2}$ et pour densité ψ_2 . Dans ces conditions, la probabilité de survie $\Psi(x, t)$ dans l'état immobile, qui est la probabilité pour qu'une étape immobile dure plus longtemps que t , dépend de la position x et est donnée par :

$$\Psi(x, t) = \Lambda_1 1_{E_1}(x) \int_{t/(\Lambda_1\tau)^{1/\gamma_1}}^{+\infty} \psi_1(z) dz + \Lambda_2 1_{E_2}(x) \int_{t/(\Lambda_2\tau)^{1/\gamma_2}}^{+\infty} \psi_2(z) dz. \quad (5.1)$$

Compte tenu du comportement asymptotique de la densité d'une loi stable (voir paragraphe 3.3.4) nous avons

$$\int_T^{+\infty} \psi_j(z) dz = \frac{t^{-\gamma_j}}{\Gamma(1-\gamma_j)} + K_j(t) \quad j = 1, 2$$

et par conséquent :

$$\tau^{-1}\Psi(x, t) = \sum_{j=1}^2 \left(\frac{\Lambda_j t^{-\gamma_j}}{\Gamma(1-\gamma_j)} + \tau^{-1}K_j \left(t/(\Lambda_j\tau)^{1/\gamma_j} \right) \right) 1_{E_j}(x). \quad (5.2)$$

Dans cette relation les K_j sont des fonctions intégrables dans \mathbb{R}_+ et $\gamma_j < 1$. Les paramètres γ_j et Λ_j représentent respectivement l'hétérogénéité et l'intensité des durées de stagnation.

Le comptage des étapes qui commencent dans un intervalle de temps donné, nous permet de relier les densités mobiles et immobiles.

5.1.1 Modèle stochastique

On suppose que les mouvements de chaque particule de fluide comme de soluté peuvent être représentés par des marches aux hasard composées de succession d'étapes ϵ_n (ϵ_n représente le n-ième étape) comme celle décrite par (4.6) au paragraphe 4.1.2. Chacune de ces étapes se décompose donc elle même en deux sous étapes. Il y a d'abord une sous étape de durée τ pendant laquelle le

marcheur est en mouvement, et fait un déplacement de longueur $v\tau + \sqrt{2D\tau}N_n$. Il y a ensuite une sous étape de durée aléatoire pendant laquelle la particule est immobile. Ce schéma correspond à la figure 4.1, simplement ici la distribution des temps d'arrêt dépend de la position.

Notons x_n la position du marcheur au début de l'étape ϵ_n . A la fin de la sous étape mobile, le particule partie de la position x_n se trouve à la position $x_n + v\tau + \sqrt{2D\tau}N_n$. La sous étape immobile a pour durée $(\lambda_1\tau)^{\frac{1}{\gamma_1}}W_{\gamma_1,n}$ si $x_n + v\tau + \sqrt{2D\tau}N_n$ appartient à E_1 , et $(\lambda_2\tau)^{\frac{1}{\gamma_2}}W_{\gamma_2,n}$ et si $x_n + v\tau + \sqrt{2D\tau}N_n$ appartient à E_2 . Les variables aléatoires $W_{\gamma_1,n}$ et $W_{\gamma_2,n}$ sont de plus indépendantes de tout ce qui s'est passé avant et elles sont distribuées comme W_{γ_1} et W_{γ_2} , définies ci-dessus. Nous noterons x_i^τ la trajectoire d'un tel marcheur.

Nous supposons de plus, en un sens qui sera précisé au paragraphe 5.1.2, que cette marche au hasard a une limite quand $\tau \rightarrow 0$. Ceci revient à admettre que toutes les expériences que nous pourrions représenter ont lieu à une échelle bien supérieure à celle des mouvements des particules, et qu'on appelle échelle hydrodynamique. Notre objectif n'est pas de montrer que cette limite existe, mais de la décrire, en supposant qu'elle existe. Afin de montrer qu'à cette échelle la densité de particules $P(x, t)$ vérifie une edp fractionnaire, nous allons établir le lien entre les densités de particules mobiles et immobiles, d'abord au niveau de la marche au hasard, ensuite nous examinerons la limite. Nous déterminerons aussi les flux de particules. Mais auparavant, nous devons préciser le cadre dans lequel nous travaillons.

5.1.2 Hypothèses et notations

Pour alléger certaines formules trop longues, nous notons $e = (x, t)$ et $de = dxdt$. Nous limitons notre étude à des temps finis inférieurs à T , de façon que e appartienne à $E = \mathbb{R} \times [0, T]$. Pour la donnée initiale, nous supposons que toutes les particules sont injectées dans le milieu au temps $t = 0$.

Notons $P_m^\tau(x, t)$ et $P_{im}^\tau(x, t)$ les densités de particules mobiles et immobiles. C'est à dire que la probabilité de trouver une particule donnée dans $[x, x + dx]$ entre les instants t et $t + dt$, cette particule étant, de plus mobile, est $P_m^\tau(x, t)dxdt$. Il en est de même pour P_{im}^τ .

Hypothèse H_1 : Nous supposons que quand $\tau \rightarrow 0$, P_m^τ tend vers une quantité $\overline{P_m}$ et c'est à partir de cette quantité que nous allons définir la limite de P_{im}^τ . Plus précisément nous supposons que P_m^τ converge faiblement vers $\overline{P_m}$, au sens des fonctions test appartenant à l'ensemble $\mathcal{C}_b(E)$ des fonctions continues et bornées dans $\mathbb{R} \times [0, T]$.

Nous supposons de plus l'existence des densités B_m^τ et B_{im}^τ pour des mesures dites de renouvellement. Ces mesures comptent les nombres moyens de com-

mencements de sous étapes mobiles et respectivement immobiles dans chaque intervalle de temps : c'est à dire que nous supposons que le nombre moyen de débuts d'étapes mobiles entre x et $x + dx$, entre les instants t et $t + dt$, est $B_m^\tau(x, t)dxdt$. De même le nombre moyen de débuts d'étapes immobiles dans ces conditions est $B_{im}^\tau(x, t)dxdt$. Un point important est que le nombre d'étapes pendant un intervalle de temps de durée dt inférieure à τ ne dépasse pas 1. C'est vrai pour la marche au hasard qui est à la base du modèle f-MIM, puisque chaque étape ne peut pas avoir une durée inférieure à τ . Les quantités $B_m^\tau(e)de$ (respectivement $B_{im}^\tau(e)de$) représentent pour cette raison la probabilité qu'un marcheur commence sa phase mobile (respectivement immobile) entre les positions x et $x + dx$ entre les instants t et $t + dt$. Dans ces conditions, B_m^τ vérifie la propriété suivante, que nous utiliserons en parlant de « propriété P » :

$$\int_{\mathbb{R} \times J^\tau} B_m^\tau(e)de \leq 1 \text{ pour tout intervalle temporel } J^\tau \text{ de longueur } \tau.$$

Ceci permet d'utiliser un concept formulé par Scher et Lax [87], celui de densité de probabilité de « juste arriver » en un point donné à un instant donné. Ces auteurs ont utilisé ce concept pour obtenir une équation maitresse justifiant l'équation de Fokker Planck fractionnaire.

Nous allons passer de l'échelle des particules à l'échelle hydrodynamique en faisant tendre τ vers 0. Plus précisément nous allons obtenir des limites au sens faible. Ce n'est pas très différent de la démarche de nombreux auteurs (Scher et Al. [87], Scalas et Al.[86]) qui ont utilisé des transformées de Laplace et de Fourier. Notre démarche est cependant adaptée aux situations où on envisage de laisser les paramètres dépendre de x , par exemple.

Plus précisément, le symbole \rightharpoonup sans plus de précision désigne dans la suite la convergence faible, le produit de dualité faisant intervenir des fonctions test continues et bornées, c'est à dire éléments de $C_b(E)$. L'hypothèse de base de ce chapitre est que P_m^τ converge faiblement vers P_m lorsque $\tau \rightarrow 0$. Cette hypothèse est notée ($P_m^\tau \rightharpoonup P_m$).

L'obtention d'une relation entre P_m^τ et B_m^τ est une étape importante.

5.1.3 Densité de particules mobiles à petite échelle

Les particules mobiles à la position x au temps t sont en mouvement depuis une durée au plus égale à τ . Cette sous étape de l'étape ϵ_n se terminera par un saut aléatoire instantané, qui sera lui même suivi par une sous étape immobile. La fin de cette dernière est aussi la fin de ϵ_n .

On en déduit une relation entre les densités P_m^τ et B_m^τ [26]

$$P_m^\tau(x, t) = \int_0^\tau B_m^\tau(x - vt', t - t')dt', \quad (5.3)$$

puisque la période mobile en cours a commencé à l'instant $t - t'$ à la position $x - vt'$, avec $0 < t' < \tau$.

Nous allons déduire de (5.3) que $P_m^\tau - \tau B_m^\tau \rightarrow 0$ quand $\tau \rightarrow 0$. Ceci équivaut à vérifier que pour chaque fonction test $g \in C_b(E)$,

$$I = \int_E g(e) \left[P_m^\tau(e) - \tau B_m^\tau(e) \right] de \rightarrow 0.$$

Pour cela nous allons utiliser l'équation (5.3) qui implique

$$\begin{aligned} I &= \int_E \left[\int_0^\tau B_m^\tau(x - vt', t - t') dt' - \tau B_m^\tau(x, t) \right] g(x, t) dx dt \\ &= \int_E \left[\int_0^\tau B_m^\tau(x - vt', t - t') dt' \right] g(x, t) dx dt \\ &\quad - \tau \int_E B_m^\tau(x, t) g(x, t) dx dt \end{aligned} \tag{5.4}$$

En utilisant le changement de variable $\chi = x - vt'$ et $\zeta = t - t'$, la première partie du second membre de I devient

$$\int_0^\tau \left[\int_E B_m^\tau(\chi, \zeta) g(\chi + vt', \zeta + t') d\epsilon \right] dt' = \int_0^\tau \left[\int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-t'} B_m^\tau(\chi, \zeta) g(\chi + vt', \zeta + t') d\epsilon \right] dt'$$

B_m^τ étant nul avant l'instant zéro, parce qu'il ne se passe rien avant le départ.

Afin d'utiliser les propriétés de la fonction test g , faisons apparaitre la différence $g(x + vt', t + t') - g(x, t)$, au moins lorsque $T + t' < T$. Comme t' est toujours inférieur à τ , il nous restera des intégrales faciles à majorer compte tenu de la « propriété P ».

L'expression (5.4) se décompose en :

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\tau \left(\int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-t'} B_m^\tau(x, t) \left[g(x + vt', t + t') - g(x, t) \right] de \right) dt' \\ &\quad + \int_0^\tau \left(\int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^{T-t'} B_m^\tau(x, t) g(x + vt', t + t') de \right) dt' \\ &\quad - \tau \int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^T B_m^\tau(x, t) g(x, t) de \end{aligned} \tag{5.5}$$

Les deux derniers termes sont petits à cause de la « propriété P » de B_m^τ . En effet pour le troisième nous avons

$$\left| \int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^T B_m^\tau(x, t) g(x, t) dx dt \right| \leq \sup_E |g|$$

Dans le second terme nous n'avons pas τ en facteur, par contre il y a non pas une, mais deux intégrations sur des intervalles de longueur inférieure ou égale à τ , donc :

$$\begin{aligned}
& \left| \int_0^\tau \left(\int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^{T-t'} B_m^\tau(x, t) g(x + vt', t + t') de \right) dt' \right| \\
& \leq \int_0^\tau dB_m^\tau(\mathbb{R} \times (T - \tau, T - t')) \sup_E |g| dt' \\
& \leq \int_0^\tau dB_m^\tau(\mathbb{R} \times J^\tau) \sup_E |g| dt' \\
& \leq \sup_E |g| \tau \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad \tau \rightarrow 0.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Le premier terme quand à lui est égal à :

$$\begin{aligned}
& \int_0^\tau \left(\int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} B_m^\tau(x, t) [g(x + vt', t + t') - g(x, t)] dx dt \right) dt' \\
& = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(x, t) \left(\frac{1}{\tau} \int_0^\tau g(x + vt', t + t') dt' - g(x, t) \right) dx dt,
\end{aligned} \tag{5.7}$$

La moyenne d'une fonction continue, effectuée sur un intervalle de durée τ tend vers cette fonction lorsque $\tau \rightarrow 0$ en tout point. Donc $\frac{1}{\tau} \int_0^\tau g(x + vt', t + t') dt' - g(x, t)$ tend vers zéro pour tout (x, t) appartenant à E . Or ce terme est uniformément borné par $2 \sup_E |g|$.

D'autre part, la « propriété P » implique que

$$\int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(x, t) \left(\frac{1}{\tau} \int_0^\tau g(x + vt', t + t') dt' - g(x, t) \right) dx dt \leq 2 \sup_E |g|.$$

Le théorème de la convergence dominée implique que le premier terme aussi tend vers zéro.

Par conséquent,

$$P_m^\tau - \tau B_m^\tau \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad \tau \rightarrow 0 \tag{5.8}$$

Il nous faut maintenant considérer les particules immobiles.

5.1.4 Densité de particules immobiles à petite échelle

Dans cette partie, nous allons décrire les particules immobiles en utilisant B_{im}^τ qui représente la probabilité qu'un marcheur donné commence une sous-étape immobile à la position x à l'instant t . L'utilisation de B_{im}^τ est une première étape pour relier la densité immobile à la densité mobile.

Les particules immobiles qui sont à l'instant t à la position x ont sauté auparavant à l'instant $t - t'$ ($t' > 0$), ont été prises au piège et y sont restées jusqu'au temps t . Par conséquent, P_{im}^τ et B_{im}^τ vérifient :

$$P_{im}^\tau = \sum_{j=1}^2 \int_0^t \Psi_{\gamma_j}(t') B_{im}^\tau(x, t - t') dt' \quad (5.9)$$

$$= \sum_{j=1}^2 \left(\Psi_{\gamma_j} * B_{im}^\tau \right) (x, t). \quad (5.10)$$

Dans cette expression $*$ désigne la convolution des fonctions causales. Pour alléger les formules dans les convolutions, notons $\mathcal{T}_{h,\theta}$ la translation d'amplitude h dans la direction de x , et d'amplitude θ dans la direction de t . La période mobile qui se termine en x à l'instant t a inclus un saut dont l'amplitude sera notée y . Cette période a ainsi débuté à l'instant $t - \tau$, en $x - y - v\tau$. Par conséquent, pour $t > \tau$, B_{im}^τ vérifie la relation suivante :

$$B_{im}^\tau(x, t) = \mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} B_m^\tau(x, t), \quad (5.11)$$

où \mathbb{K}_τ représente la convolution spatiale de noyau $\frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi\left(\frac{x}{\sqrt{2D\tau}}\right)$. Dans cette expression nous désignons par φ la densité d'une V.A. gaussienne centrée réduite.

En introduisant (5.11) dans (5.9) on obtient :

$$P_{im}^\tau(x, t) = \sum_{j=1}^2 \Psi_{\gamma_j} * B_m^\tau(x, t) + \tau^{-1} \sum_{j=1}^2 \left[\Psi_{\gamma_j} * (\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau(x, t) \right] \quad (5.12)$$

A la limite hydrodynamique, cette expression se simplifie, comme nous allons voir.

5.1.5 Relation entre les densités de particules mobiles et immobiles

Nous allons éliminer les fonctions auxiliaires $B_{m_j}^\tau$ en passant à la limite hydrodynamique.

Le second terme de l'équation (5.2) vérifie

$$\begin{aligned}\|\tau^{-1}K_j \left(t/(\Lambda_j\tau)^{1/\gamma_j} \right) \|_{L^1(\mathbb{R}_+)} &= \tau^{-1}\|K_j \left(t/(\Lambda_j\tau)^{1/\gamma_j} \right) \|_{L^1(\mathbb{R}_+)} \\ &= \tau^{-1-1/\gamma_j}\|K_j\|_{L^1(\mathbb{R}_+)}.\end{aligned}$$

D'autre part, le lemme 1 de [68] par exemple implique que $\tau^{-1}K \left(./\tau^{1/\gamma_j} \right)$ est un opérateur de $L^1([0, T], X)$ qui tend vers zéro quand $\tau \rightarrow 0$, pour $0 < \gamma_j < 1$. En utilisant la définition de l'intégrale fractionnaire et l'expression de Ψ_{γ_j} on a :

$$\begin{aligned}P_{im}^\tau(x, t) &= \sum_{j=1}^2 \Lambda_j 1_{E_j}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_j} P_m^\tau(x, t) + \sum_{j=1}^2 \Lambda_j 1_{E_j}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_{kj}} \\ &\quad [\tau B_m^\tau(x, t) - P_m^\tau(x, t) + (\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau], \quad (5.13)\end{aligned}$$

La décroissance rapide de φ à l'infini montre que $\left[(\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau \right] \rightarrow 0$, ceci est démontré plus en détail dans l'annexe (E).

Donc l'expression

$$h(x, t) = [\tau B_m^\tau(x, t) - P_m^\tau(x, t) + (\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau]$$

converge faiblement vers zéro. Il reste à vérifier que $I_{0,+}^{1-\gamma} h$ fait de même pour $\gamma < 1$.

Soit g une fonction test, avec $|g(x, t)| \leq b$.

Pour tout x réel nous avons

$$\begin{aligned}I &= \int_0^T g(x, t) \left(I_{0,+}^{1-\gamma} h \right) (x, t) dt \\ &= \int_0^T h(x, t) \left(I_{T,-}^{1-\gamma} g \right) (x, t) dt,\end{aligned}$$

car le conjugué de $I_{0,+}^{1-\gamma}$ dans $[0, T]$ est $I_{T,-}^{1-\gamma}$ [84]. La fonction $\left(I_{T,-}^{1-\gamma} g \right) (x, t)$ est continue sur $[0, T]$ et majorée par $\frac{T^\gamma}{\Gamma(\gamma)} \sup |g|$. Donc c'est encore une fonction test. Donc l'intégrale I tend vers zéro, donc $I_{0,+}^{1-\gamma} h \rightarrow 0$.

L'hypothèse H_1 suppose qu' à la limite hydrodynamique P_m^τ tend vers une quantité P_m . Cette hypothèse nous permet d'avoir la relation entre P_{im} et P_m , elle est donnée par :

$$P_{im} = \sum_{j=1}^2 \Lambda_j 1_{E_j}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_j} P_m(x, t). \quad (5.14)$$

De cette équation, on peut déduire la densité totale de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
P(x, t) &= P_m(x, t) + \sum_{j=1}^2 \Lambda_j 1_{E_j}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_j} P_m(x, t) \\
&= \left(Id + \sum_{j=1}^2 \Lambda_j 1_{E_j}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_j} \right) P_m(x, t),
\end{aligned} \tag{5.15}$$

qui s'écrit aussi,

$$P(x, t) = \left(Id + \Lambda_1 1_{E_1}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_1} + \Lambda_2 1_{E_2}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_2} \right) P_m(x, t). \tag{5.16}$$

En utilisant l'équation (5.16) on en déduit

$$P_m(x, t) = \left(Id + \Lambda_1 1_{E_1}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_1} + \Lambda_2 1_{E_2}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_2} \right)^{-1} P(x, t). \tag{5.17}$$

5.2 L'équation maitresse régissant la distribution de la densité de particule

Nous allons maintenant proposer une edp qui régit l'évolution de la densité $P(x, t)$. Pour cela nous allons proposer une expression pour le flux de marcheurs. Ensuite, l'application du principe de conservation de la masse conduit à une edp régissant l'évolution des densités P_m et P_{im} en relation avec (5.14).

5.2.1 Le flux de particules

Le flux de particules en un point quelconque x est la moyenne de la différence entre le nombre de particules qui traversent x vers la droite et vers la gauche par unité de temps. Il nous faut donc compter les particules qui traversent x vers la droite.

Les particules traversant x vers la droite durant un intervalle de temps $[t, t + dt]$ doivent être mobiles et avoir passé un temps de durée $t' \in [0, \tau]$ dans la phase mobile. Il y a de plus deux façon de traverser x : ce peut être à cause d'un saut diffusif, ou à cause de la vitesse v et de la convection. Dans le premier cas le particule traverse x juste à la fin d'une période mobile. Dans le second cas, elle traverse pendant une période mobile. Nous allons d'abord compter la contribution de cette dernière possibilité, ensuite nous nous occupons des sauts diffusifs.

Contribution convective

Les particules traversent x avant la fin de la période mobile en cours (c'est à dire avant le saut aléatoire) seulement si la phase mobile a commencé dans l'intervalle $[x - vt', x - vt' + dt]$. Le déplacement convectif qui correspond a une amplitude vt' et se produit entre les instants t et $t + dt$ avec une probabilité de $dt \int_0^\tau B_m^\tau(x, t - t')v dt'$ si $v \geq 0$. Si $v < 0$ la probabilité de traverser x avant la fin de l'étape mobile est nulle. L'expression qui en résulte peut être reliée à P_m^τ .

En effet, nous avons

$$\begin{aligned}
 \int_0^\tau B_m^\tau(x, t - t')v dt' &= \int_0^\tau \left[B_m^\tau + \left(\mathcal{T}_{vt',0} - Id \right) B_{m_j}^\tau \right] (x, t - t')v dt' \\
 &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \left[P_m^\tau + (\tau B_m^\tau - P_m^\tau) + \left(\mathcal{T}_{vt',0} - Id \right) B_m^\tau \right] (x, t - t')v dt' \\
 &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau P_m^\tau(x, t - t')v dt' + \int_0^\tau \left[(\tau B_m^\tau - P_m^\tau) + \left(\mathcal{T}_{vt',0} - Id \right) \right] \\
 &\quad (x, t - t')v dt' \\
 &= P_m^\tau(x, t)v dt.
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

A la limite hydrodynamique ($\tau \rightarrow 0$), nous obtenons la partie convective vP_m du flux, qui est proportionnelle à la vitesse moyenne et à la densité des particules mobiles.

Contribution des sauts diffusifs

Il y a d'abord les sauts dirigés vers la droite. Ceux dirigés vers la gauche se comporte de manière analogue, ensuite nous ferons le bilan.

Sauts dirigés vers la droite

Comptons maintenant les particules qui traversent x vers la droite, mais cette fois par un saut diffusif. Les sauts diffusifs aléatoires permettant au marcheur de traverser x de la gauche vers la droite sont partis de $x - y$ et ont une amplitude supérieure à y . Par conséquent, un tel saut fait traverser x vers la droite entre les instants t et $t + dt$ avec une probabilité de [26]

$$\int_0^\infty \mathcal{T}_{\tau, v\tau} B_m^\tau(x - y, t) \Phi_\tau(y) dy dt \tag{5.19}$$

Dans cette expression, nous avons posé $\Phi_\tau(y) = \Phi\left(y/\sqrt{2D\tau}\right)$ où

$\Phi(z) = \int_z^{+\infty} \varphi(z') dz'$ est la probabilité pour la V.A. N_1 de prendre une valeur plus grande que z .

Il nous reste à faire apparaître P_m^τ dans l'équation (5.19). Pour cela, nous allons la développer :

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \mathcal{T}_{\tau, v\tau} B_m^\tau(x-y, t) \Phi_\tau(y) dy dt &= \int_0^\infty \left[B_m^\tau + (\mathcal{T}_{\tau, v\tau} - Id) B_m^\tau \right] (x-y, t) \Phi_\tau(y) dy dt \\
&= \int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} \left[P_m^\tau + \tau B_m^\tau - P_m^\tau + (\mathcal{T}_{\tau, v\tau}^{x, t} - Id) \tau B_m^\tau \right] (x-y, t) dy dt \\
&= \int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} P_m^\tau(x-y, t) dy dt + \int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} [\tau B_m^\tau - P_m^\tau](x-y, t) dy dt \\
&+ \int_0^\infty \Phi_\tau(y) [\mathcal{T}_{\tau, v\tau} - Id] B_m^\tau(x-y, t) dy dt. \tag{5.20}
\end{aligned}$$

Une démonstration est détaillée dans l'annexe (F) pour montrer que :

$\int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} [\tau B_m^\tau - P_m^\tau](x \pm y, t) dy$ converge faiblement vers zéro, mais au sens des distributions cette fois-ci.

Il en est de même pour $\int_0^\infty \Phi_\tau(y) [\mathcal{T}_{\tau, v\tau} - Id] B_m^\tau(x \pm y, t) dy dt$.

Finalement, l'expression de (5.19) est la somme de

$$\int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} P_m^\tau(x-y, t) dy dt, \tag{5.21}$$

qui s'écrit avec P_m^τ , et d'une autre expression dont nous venons de voir qu'elle tend vers zéro.

L'expression (5.21) est à son tour la somme de deux termes, qui sont $dt \int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} P_m(x-y, t) dy$ et $dt \int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} (P_m^\tau(x-y, t) - P_m(x-y, t) dy)$.

Par conséquent la probabilité de traverser x vers la droite par un saut diffusif entre t et $t + dt$ s'écrit

$$dt \left(\int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} P_m(x-y, t) dy + \mathcal{E}_+(x, t) \right)$$

où $\mathcal{E}_+(x, t)$ est de la forme

$$\mathcal{E}_+(x, t) = \int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} V^\tau(x+y, t) dy,$$

V^τ représentant une fonction qui converge faiblement vers zéro quand $\tau \rightarrow 0$.

Sauts dirigés vers la gauche

De même la probabilité de traverser x vers la gauche s'écrit

$$dt \left(\int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} P_m(x+y, t) dy + \mathcal{E}_-(x, t) \right)$$

avec

$$\mathcal{E}_-(x, t) = \int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} V^\tau(x - y, t) dy.$$

Nous sommes maintenant en mesure de faire le bilan des sauts diffusifs. Le nombre moyen de sauts diffusifs vers la droite moins le nombre moyen de sauts diffusifs vers la gauche à termes de x pendant dt est

$$\int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} (P_m^\tau(x - y, t) - P_m(x + y, t)) dy + \mathcal{E}_+(x, t) - \mathcal{E}_-(x, t).$$

L'annexe (F) montre que $\mathcal{E}_+(x, t) - \mathcal{E}_-(x, t) \rightarrow 0$ au sens des distributions. Il nous reste par conséquent à nous occuper de la limite de

$$\mathcal{F}^\tau(x, t) = \int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} (P_m^\tau(x - y, t) - P_m(x + y, t)) dy$$

quand $\tau \rightarrow 0$ pour avoir le flux diffusif.

Pour cela remarquons que $D = l^2/2\tau$. Par conséquent

$$\mathcal{F}^\tau(x, t) = \int_0^{+\infty} \frac{P_m(x - y, t) - P_m(x + y, t)}{\tau} \Phi(y/l) dy.$$

Posons $Y = y/l$ on a :

$$\mathcal{F}^\tau(x, t) = 4D \int_0^{+\infty} \frac{P_m(x - Yl, t) - P_m(x + Yl, t)}{2Yl} Y \Phi(Y) dy.$$

Nous aurons prouvé que $\mathcal{F}^\tau(x, t)$ converge vers $-\partial_x D P_m(x, t)$ au sens des distributions quand $\tau \rightarrow 0$ dès que nous aurons vérifié que

$$\int_0^{+\infty} \left(\frac{P_m(x - lY, t) - P_m(x + lY, t)}{2Yl} - \partial_x P_m(x) \right) Y \Phi(Y) dy$$

tend vers zéro au sens des distributions, puisque nous avons

$$\int_0^{+\infty} Y \Phi(Y) dy = \frac{1}{4}, \quad (5.22)$$

qui est démontré à l'annexe G.

Il reste à vérifier que pour toute fonction généralisée f , pour chaque g dans l'espace des fonctions test $\mathcal{D}(\mathbb{R})$ des distributions (ensemble des fonctions infiniment dérivables à support compact dans \mathbb{R}),

$$\int_{\mathbb{R}} g(x) \int_0^{+\infty} \left(\frac{f(x - lY, t) - f(x + lY, t)}{2Yl} - \partial_x f(x) \right) Y \Phi(Y) dY dx \rightarrow 0 \quad \text{quand } l \rightarrow 0.$$

Il suffit pour cela de remarquer que la parenthèse est majorée par le sup de $2Yl|\partial_{x^2}^2 f|$, et que $\int_0^{+\infty} Y^2 \Phi(Y) dY$ est fini (voir annexe G).

Dans le cas limite de $\mathcal{F}^\tau(x, t)$ quand $\tau \rightarrow 0$ est $-D\partial_x P_m(x, t)$. Par conséquent compte tenu du flux convectif $vP_m(x, t)$, à la limite hydrodynamique le flux à travers x est

$$\mathcal{F}(x, t) = -D\partial_x P_m(x, t) + vP_m(x, t) \quad (5.23)$$

5.2.2 Equation de conservation

Appliquons le principe de conservation de la masse à la variation entre t et $t + dt$ du nombre moyen de particules entre $x - \frac{dx}{2}$ et $x + \frac{dx}{2}$. Cette variation est le bilan $\mathcal{F}_{x-\frac{dx}{2}} - \mathcal{F}_{x+\frac{dx}{2}}$, aussi égal à $(D\partial_x^2 - v\partial_x) P_m(x, t).dx$, au premier ordre en dx . Mais c'est aussi $dt\partial_t P(x, t)$.

Nous en déduisons

$$\partial_t P(x, t) = [D\partial_x^2 - v\partial_x] P_m(x, t) + r(x, t), \quad (5.24)$$

En introduisant l'équation (5.17) dans (5.24) on a :

$$\begin{aligned} \partial_t P(x, t) &= [D\partial_x^2 - v\partial_x] \left(Id + \Lambda_1 1_{E_1}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_1} + \Lambda_2 1_{E_2}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_2} \right)^{-1} P_m(x, t) \\ &+ r(x, t). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Dans le cas où v est constante et D uniforme, en supposant que $r(x, t) = \delta(x)\delta(t)$, l'équation (5.25) est équivalent à :

$$\partial_t \left(1 + \Lambda_1 1_{E_1}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_1} + \Lambda_2 1_{E_2}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_2} \right) P(x, t) = \partial_x [D\partial_x - v] P(x, t). \quad (5.26)$$

Ce résultat a été obtenu à partir de (5.8) qui avait aussi servi pour relier les densités des marcheurs mobiles et immobiles. Nous avons déduit le flux, puis l'équation de conservation. Une démonstration numérique est possible aussi, à condition de pouvoir résoudre numériquement l'équation (5.25). On peut alors comparer ses solutions avec des histogrammes issus de la marche au hasard définie par (4.6).

5.3 Simulations numériques et comparaisons

Antérieurement, plusieurs auteurs ont discuté de l'utilisation de schémas numériques discrétisant l'équation (5.25) dans le cas où la durée de stagnation

et l'hétérogénéité dans le milieu sont uniformes avec une vitesse d'advection constante [58]. Dans ce cas particulier, l'équation (5.25) est équivalente à l'équation (5.26), où la dérivée au sens de Caputo peut être discrétisée avec différents schémas numériques [28][39]. Une méthode alternative a été proposé dans [58].

Dans cette partie, nous allons donner une solution numérique de l'équation (5.26) puis la comparer à la simulation par méthode de Monte Carlo de la marche au hasard décrite dans l'équation (4.6). Avant de montrer des résultats, présentons la méthode utilisée pour discrétiser l'équation (5.25).

5.3.1 Méthodes numériques

Pour la simulation numérique, nous avons utilisé la relation

$$P_m(x, t) = \left(Id + \Lambda_1 1_{E_1}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_1} + \Lambda_2 1_{E_2}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_2} \right)^{-1} P(x, t),$$

et la formulation de l'équation (5.26) en termes de P_m qui s'écrit,

$$\partial_t \left(Id + \Lambda_1 1_{E_1}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_1} + \Lambda_2 1_{E_2}(x) I_{0,+}^{1-\gamma_2} \right) P_m(x, t) = \left[D \partial_x^2 - v \partial_x \right] P_m(x, t) + r(x, t).$$

Comme $\partial_t I^{1-\gamma} = D^{1-\gamma}$, cela nous permet d'écrire l'équation (5.26) de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t P_m(x, t) + \Lambda_1 1_{E_1}(x) D_{0,+}^{1-\gamma_1} P_m(x, t) + \Lambda_2 1_{E_2}(x) D_{0,+}^{1-\gamma_2} P_m(x, t) \\ = \left[D \partial_x^2 - v \partial_x \right] P_m(x, t) + r(x, t). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Pour discrétiser l'équation (5.27), la méthode des différences finies centrées a été utilisée pour les dérivées d'ordre entier (temporelles et spatiales)

$$\begin{aligned} \partial_t P_m &= \frac{P_{m_i}^{n+1} - P_{m_i}^n}{\Delta t}, \\ \partial_x P_m &= \frac{P_{m_{i+1}}^{n+1} - P_{m_{i-1}}^{n+1}}{\Delta x}, \\ \partial_x^2 &= \frac{P_{m_{i+1}}^{n+1} - 2P_{m_i}^{n+1} + P_{m_{i-1}}^{n+1}}{\Delta x^2}. \end{aligned}$$

Pour la dérivée fractionnaire temporelle d'ordre $1 - \gamma_j$ ($j = 1, 2$) au premier membre de l'équation (5.27), le schéma de Grünwald–Letnikov a été appliqué. Il repose sur

$$D^{1-\gamma} P_m = \frac{1}{\Delta t^{1-\gamma}} \sum_{k=0}^{\infty} A_k^{1-\gamma} P_{m_i}^{n+1-k},$$

avec

$$A_{k+1}^\gamma = \frac{k-\gamma}{k+1} A_k^\gamma \quad \text{où} \quad A_0^\gamma = 1.$$

En utilisant ces relations, l'équation (5.27) s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \frac{P_{m_i}^{n+1} - P_{m_i}^n}{\Delta t} + \Lambda_1 1_{E_1(x)} \left(\frac{1}{\Delta t^{1-\gamma_1}} \right) \sum_{k=0}^{\infty} A_k^{1-\gamma_1} P_{m_i}^{n+1-k} + \Lambda_2 1_{E_2(x)} \left(\frac{1}{\Delta t^{1-\gamma_2}} \right) \\ \sum_{k=0}^{\infty} A_k^{1-\gamma_2} P_{m_i}^{n+1-k} = \frac{D}{\Delta x^2} \left(P_{m_{i+1}}^{n+1} - 2P_{m_i}^{n+1} + P_{m_{i-1}}^{n+1} \right) - \frac{v}{2\Delta x} \left(P_{m_{i+1}}^{n+1} - P_{m_{i-1}}^{n+1} \right) \end{aligned}$$

ce qui équivaut à

$$\begin{aligned} P_{m_i}^{n+1} - P_{m_i}^n = -\Lambda_1 1_{E_1(x)} \left(\frac{\Delta t}{\Delta t^{1-\gamma_1}} \right) \sum_{k=0}^{\infty} A_k^{1-\gamma_1} P_{m_i}^{n+1-k} - \Lambda_2 1_{E_2(x)} \left(\frac{\Delta t}{\Delta t^{1-\gamma_2}} \right) \\ \sum_{k=0}^{\infty} A_k^{1-\gamma_2} P_{m_i}^{n+1-k} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(P_{m_{i+1}}^{n+1} - 2P_{m_i}^{n+1} + P_{m_{i-1}}^{n+1} \right) - \frac{v\Delta t}{2\Delta x} \left(P_{m_{i+1}}^{n+1} - P_{m_{i-1}}^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Cette méthode permet d'avoir la densité des particules mobiles. Pour en déduire la densité des particules immobiles P_{im} on applique la relation (5.14), pour cela il faut discrétiser l'intégrale fractionnaire $I_{0,+}^{1-\gamma}$ en appliquant la formule (D.1) de l'annexe (D). La densité totale est obtenue en additionnant la densité mobile avec la densité immobile.

La méthode de simulation par la marche au hasard (4.6) consiste à calculer les trajectoires d'un certain nombre N suffisamment grand de particules indépendantes.

5.3.2 Simulations

A l'aide de ces méthodes, nous avons effectué une preuve numérique de l'équation de conservation (5.24). Nous avons aussi vérifié numériquement la relation (5.23) donnant le flux.

Nous présentons une preuve numérique du fait que à la limite hydrodynamique ($\tau \rightarrow 0$), la densité $P(x, t)$ des particules effectuant une marche au hasard comme (4.6) vérifie l'équation (5.26). Elle consiste à vérifier, sur plusieurs cas particuliers que les solutions de l'équation (5.26) discretisée selon la méthode décrite au paragraphe (5.3.1) coïncident avec les histogrammes de (4.6).

Dans un domaine à une dimension de longueur $L = 1$ où la partie gauche $E_1 = [0; x_d]$ et la partie droite $E_2 = [x_d; L]$ correspondent à des valeurs de γ_1 et γ_2 en général différentes, nous avons pris des conditions au limites absorbantes aux bords. Le point source est localisé en x_0 à l'instant $t = 0$.

La figure (5.1) représente cette comparaison dans le cas trivial où $\gamma_1 = \gamma_2$. On retrouve les solutions de l'équation fMIM (une seule valeur de γ). On a pris $x_d = x_0 = L/2$

La figure (5.7) représente une comparaison analogue avec les mêmes conditions sauf que $\gamma_1 \neq \gamma_2$. C'est à dire que les particules ont été injectées précisément à la frontière entre E_1 et E_2 . En d'autres termes $x_d = x_0$. On vérifie que les solutions de l'équation (5.26) coïncident avec des histogrammes issus de la marche au hasard.

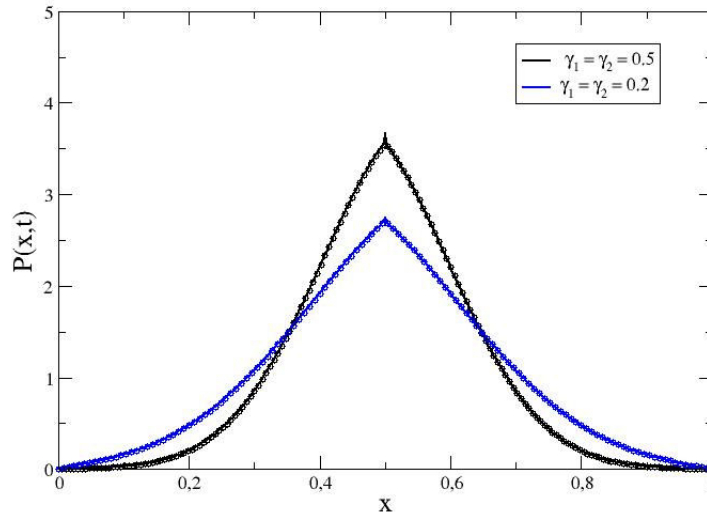


FIG. 5.1: Le profil de concentration total $P(x, t)$ dans un domaine de longueur $L=1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.1$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$, $V = 0$ et $dt = 0.0005$. En noir $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$, en bleu $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.2$. Les symboles représentent la méthode de Monte Carlo réalisée avec 100000 particules. Les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.26).

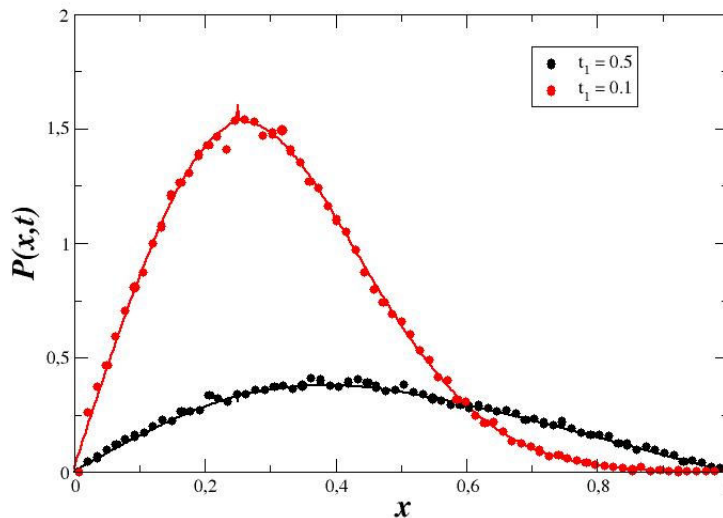


FIG. 5.2: Le profil de concentration totale $P(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à différents instants fixé. Les paramètres sont $D = 0.2$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$, $V = 0$. et $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 0.2$, $x_0 = L/4$ et $x_d = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.26).

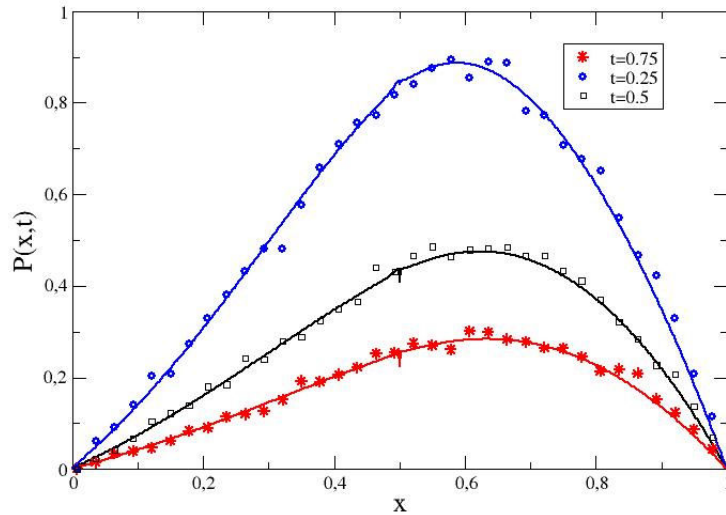


FIG. 5.3: Le profil de concentration des particules mobiles $P_m(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.2$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$, $V = 0.5$ et $\gamma_1 = 0.2$, $\gamma_2 = 0.5$, $x_d = x_0 = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.17).

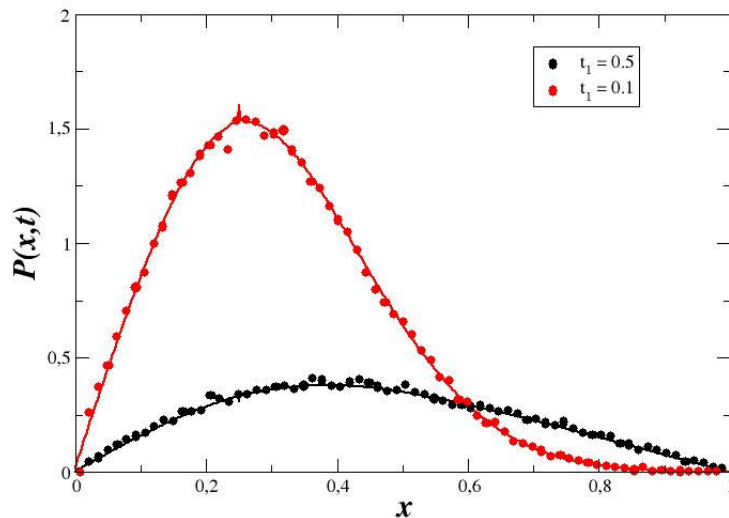


FIG. 5.4: Le profil de concentration des particules mobiles $P_m(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.2$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$, $V = 0$ et $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 0.1$, $x_0 = L/4$ et $x_d = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.17).

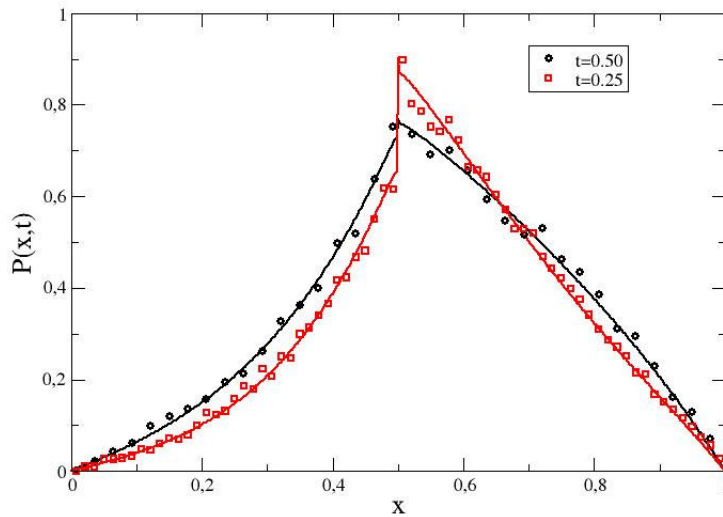


FIG. 5.5: Le profil de concentration des particules immobiles $P_{im}(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Les paramètres ont les mêmes valeurs que pour les figures (5.2 et 5.4). Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.14).

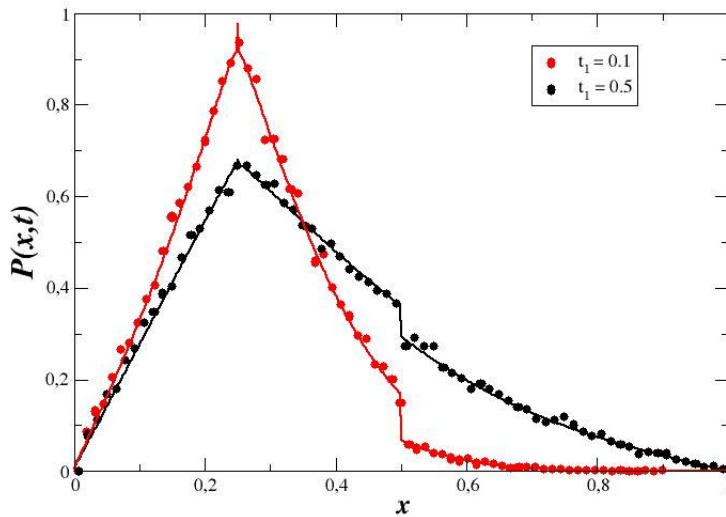


FIG. 5.6: Le profil de concentration des particules immobiles $P_{im}(x, t)$ dans un domaine de longueur $L = 1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.2$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$, $V = 0$. et $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = 0.2$, $x_0 = L/4$ et $x_d = L/2$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.14).

Les figures (5.3) et (5.4) illustrent la bonne comparaison entre la densité des particules mobile obtenue par l'équation (5.26) et celle de la marche au hasard. La figure (5.3) montre le cas où $\gamma_1 < \gamma_2$ et $x_d = x_0 = L/2$, tandis que la figure (5.4) montre une autre condition initiale $x_0 = L/4$ avec $\gamma_1 > \gamma_2$ et $x_d = L/2$. En particulier, les irrégularités correspondant soit à l'interface entre E_1 et E_2 , soit au souvenir de la donnée initiale, sont retrouvées de façon similaire par les deux méthodes.

La même comparaison a été faite avec la densité des particules immobiles (figures (5.5) et (5.6)). On voit aussi un bon accord entre les deux méthodes.

Le profil de concentration totale est la somme de la densité des particules mobiles et des particules immobiles. La figure (5.2) représente un profil de concentration totale à différents instants. On remarque parfois la présence de discontinuités dans le profil de concentration totale, à la frontière entre les deux parties du domaine (ici $x_d = L/4$). Notons que le profil de concentration affiché dans [58] est continu. Un comportement similaire a été signalé dans le contexte de CTRW (voir par exemple la discussion dans [14][44]). Cette discontinuité est dû à la discontinuité du profil de concentration immobiles (figures 5.5 et 5.6) parce qu'on voit bien sur la figure (5.3, 5.4) que le profil de concentration mobile est continue. Sur toutes les figures, il est continu.

Nous avons aussi vérifié numériquement la relation (5.23). La figure (5.8) montre le flux à la sortie du colonne en fonction du temps.

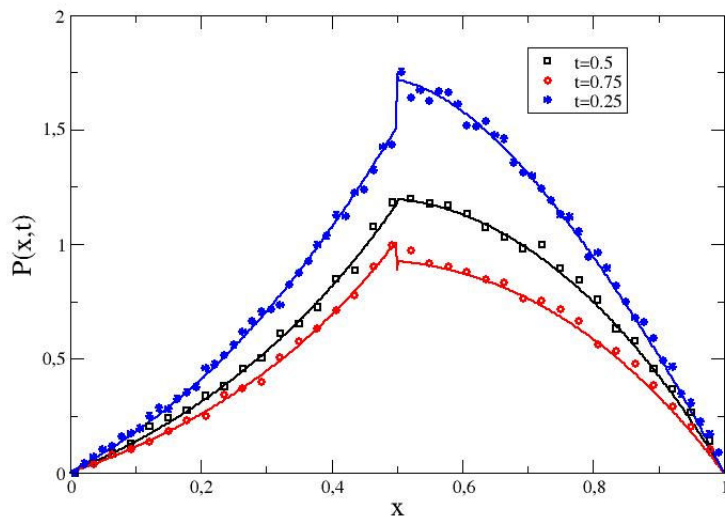


FIG. 5.7: Le profil de concentration totale $P(x,t)$ dans un domaine de longueur $L=1$ à un temps fixé. Avec $D = 0.1$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$, $V = 0.5$ et $\gamma_1 = 0.2$, $\gamma_2 = 0.5$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues représentent l'intégration numérique de l'équation (5.26).

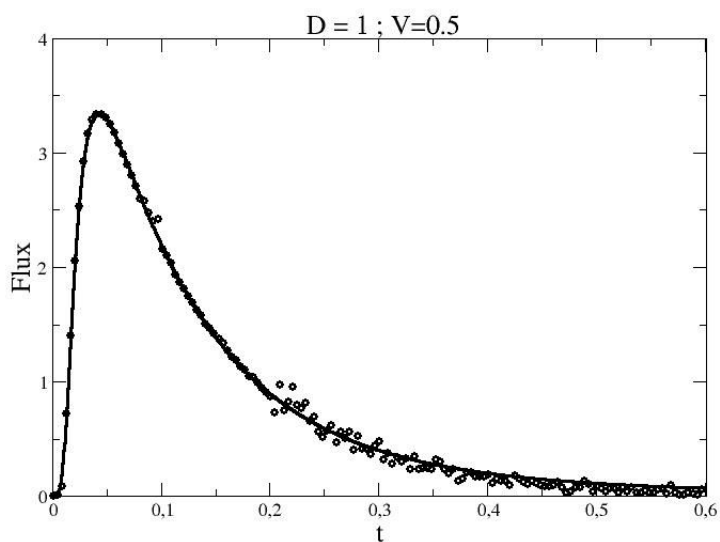


FIG. 5.8: Le flux $F(x,t)$ à la sortie du domaine de longueur $L=1$. Avec $D = 1$, $h_1 = h_2 = 1$, $\Lambda_1 = \Lambda_2 = 1$ et $V = 0.5$. $\gamma_1 = 0.2$, $\gamma_2 = 0.5$. Le point source est localisé à $x_0 = L/2$ au temps $t = 0$. Les symboles représentent la simulation par la méthode de Monte Carlo et les lignes continues ont été obtenues à partir du calcul numérique de $P_m(x,t)$ en appliquant la réaction (5.23) sous sa forme discretisée.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle de transport de particules dans les milieux poreux, qui généralise le modèle f-MIM. La généralisation revient à imaginer que certaines régions d'un milieu peuvent être le siège de dispersion plus ou moins anormale. A petite échelle ceci équivaut à ce que les durées d'immobilisation des particules soient distribuées par des lois de probabilité radicalement différentes dans une partie du milieu ou dans une autre.

Cette généralisation a été l'occasion pour nous de présenter des arguments démontrant comment un modèle de marche au hasard pour les mouvements à petite échelle correspond à une edp fractionnelle pour l'évolution de la densité à l'échelle macroscopique. On passe de l'une à l'autre en faisant tendre vers zéro l'échelle du temps caractérisant la marche au hasard, et une échelle de longueur qui lui est associée. Ces arguments avaient déjà été publiés avec des hypothèses légèrement différentes comme par exemple la possibilité pour des paramètres comme v , D ou Λ de dépendre de x . La possibilité d'avoir des cinétiques différentes n'avait pas été abordée.

L'illustration numérique de cette démonstration montre la souplesse des outils disponibles pour représenter les équations fractionnaires.

En plus des hypothèses utilisées dans [68], nous avons considérés une co-existence de plusieurs types de pièges dans le milieu où chaque catégorie de piège est caractérisée par une distribution de temps d'attente décroissant comme une puissance bien précise.

Premièrement, nous avons étudié le dynamique des particules en se basant sur la relation fonctionnelle entre la densité des particules mobiles et la densité des particules immobiles (piégées). Cette relation résulte directement du comportement asymptotique de la distribution du temps d'attente (temps de piègagement) et donne bien une loi de transport modifiée avec de la mémoire pour les flux de particules. Le principe de conservation de masse, a ensuite conduit à une équation pour l'évolution des densités des phases mobile et immobile.

Ces résultats théoriques sont confirmés par leur bon accord entre la simulation des edp d'une part et des histogrammes issus de marche au hasard d'autre part. Ces histogrammes concernent les densités de particules ou les flux.

Chapitre 6

Conclusions générales et perspectives

Les résultats présentés dans cette thèse concernent des modèles pour le transport de masse. Ils s'adressent plus particulièrement au transport dans les milieux où il est raisonnable d'imaginer que les particules fluides peuvent être arrêtées, puis relâchées. Ce point de vue est pertinent en milieu poreux (saturé ou insaturé), à cause de la matrice solide, qui reste immobile contrairement aux fluides. Ce point de vue est compatible avec des observations faites sur des courbes de percée. Les méthodes de transport sur lesquelles nous avons travaillé présentent la particularité d'avoir deux versions : nous avons d'une part des processus stochastiques représentant le mouvement des particules de fluide ou de traceur. Leur densité de probabilité vérifie d'autre part une edp avec des opérateurs non locaux, qui caractérise complètement le processus si on fait abstraction de toutes conditions aux limites et si on prend une donnée initiale très simple. Chacune des deux versions présente des avantages que l'autre n'a pas. Le processus stochastique permet d'étudier des observables qui concernent plus d'un instant et sont inaccessibles au moyen de l'edp régissant la densité de probabilité associée à un seul instant. L'edp est essentielle pour traiter de conditions aux limites réalistes. Chacun de ces points de vue permet de traiter des données issues d'expériences. Le point de vue des processus stochastiques est important pour analyser et interpréter les expériences RMN, celui des edp est intéressant pour les expériences de traçage.

Des résultats ont été obtenus à partir de ces deux points de vue. Nous avons considéré une vaste classe de processus de transport incluant la possibilité que les particules s'arrêtent pour des temps plus ou moins longs, mais finis et aléatoires. Ces processus n'étant pas Markoviens, la question de la distribution de leurs déplacements n'est pas triviale. Nous avons proposé une expression exacte pour la fonction caractéristique de ces déplacements. Nous l'avons fait

dans le cadre de trois classes de mouvements Browniens subordonnés par des subordinateurs de Lévy. Parmi ces derniers, qui forment une classe très vaste, nous avons obtenu ce résultat pour tous les subordinateurs stables, ainsi que pour certains processus de Poisson composites. Ce résultat a été étendu aux vols de Lévy subordonnés, afin d'inclure la possibilité d'avoir des mouvements avec de grands sauts. Une partie de ces résultats correspond à des données de RMN recueillies par d'autres membres du projet ANR TRAM (Transport Anormal en Milieu Poreux) qui finançait cette thèse. En effet, les expériences en RMN permettent de mesurer la fonction caractéristique du déplacement des porteurs de spin.

Ces résultats ont été illustrés par des simulations par la méthode de Monte Carlo en bon accord avec la formulation mathématique qu'il a aussi fallu approcher numériquement. Ces résultats concernent des processus stochastiques dont la densité vérifie une edp parmi les trois possibilités que sont le MIM, sa version fractionnaire f-MIM et l'équation de Fokker-Planck fractionnaire en temps.

Du point de vue des edp, nous avons généralisé le modèle f-MIM qui régit la densité de processus accumulant des sauts Gaussiens et des déplacements convectifs effectués pendant des périodes de durée identiques, mais suivis d'immobilité de durée aléatoire, distribuée selon une loi stable. L'exposant de stabilité de cette dernière se retrouve dans l'edp, sous la forme de l'ordre d'une dérivée temporelle (d'ordre non entier donc). Ce modèle est un outil adapté aux expériences de traçage. Dans ce modèle, nous avons inclus la possibilité que l'ordre de cette dérivée fractionnaire dépende de la position, tout en restreignant au cas simple de deux ordres différents, correspondant à deux sous-domaines du milieu. Dans ce contexte, nous avons établi le lien entre l'edp et le modèle stochastique fondé sur des immobilités dont la distribution dépend de la position. Nous avons établi le lien entre le flux des traceurs et ces densités. Ces résultats ont été illustrés numériquement. Pour cela nous avons généralisé un schéma discrétisant le f-MIM. Nous avons comparé avec la méthode de Monte Carlo.

L'extension logique de notre travail est de créer un modèle plus général qui portera sur la coexistence de plusieurs types de pièges dans le milieu, chaque piège étant caractérisé par un temps d'attente avec une densité de probabilité distincte. Cette approche donnerait alors lieu à un opérateur un peu plus complexe.

Bibliographie

Bibliographie

- [1] Anomalous transport in “ classical ” soil and sand columns. [11](#)
- [2] S. Alexander, J. Bernasconi, W. R. Schneider, and R. Orbach. Excitation dynamics in random one-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 53 :175–198, Apr 1981. [10](#)
- [3] F. Amblard, A.C. Maggs, B. Yurke, A.N. Pargellis, and S. Leibler. Subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in actin networks. *Physical review letters*, 77(21) :4470–4473, 1996. [11](#)
- [4] R.P. Argarwal. A propos d’une note de m. pierre humbert. *C.R. Académie des Sciences*, 236 :2031–2032, 1953. [127](#)
- [5] B. Baeumer and MM Meerschaert. Fractional diffusion with two time scales. *Physica A : Statistical and Theoretical Physics*, 373 :237–251, 2007. [16](#)
- [6] E. Barkai. Fractional fokker-planck equation, solution, and application. *Physical Review E*, 63(4) :046118, 2001. [36](#)
- [7] E. Barkai and J. Klafter. Comment on “subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in actin networks”. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :1134–1134, Aug 1998. [11](#)
- [8] E. Barkai, R. Metzler, and J. Klafter. From continuous time random walks to the fractional fokker-planck equation. *Physical Review E*, 61(1) :132, 2000. [16](#), [36](#)
- [9] A. Baule and R. Friedrich. Joint probability distributions for a class of non-markovian processes. *Physical Review E*, 71(2) :026101, 2005. [50](#), [51](#)
- [10] S. Bekri and PM Adler. Dispersion in multiphase flow through porous media. *International journal of multiphase flow*, 28(4) :665–697, 2002. [12](#)
- [11] S. Benkadda and G.M. Zaslavsky. *Chaos, kinetics and nonlinear dynamics in fluids and plasmas : proceedings of a workshop held in Carry-Le Rouet, France, 16-21 June 1997*, volume 511. Springer Verlag, 1998. [10](#)

- [12] D.A. Benson and M.M. Meerschaert. A simple and efficient random walk solution of multi-rate mobile/immobile mass transport equations. *Advances in Water Resources*, 32(4) :532–539, 2009. [16](#), [36](#), [37](#), [40](#), [42](#), [43](#), [44](#), [49](#)
- [13] B. Berkowitz. Characterizing flow and transport in fractured geological media : A review. *Advances in water resources*. [11](#)
- [14] B. Berkowitz, A. Cortis, I. Dror, and H. Scher. Rapid communications-w02201-laboratory experiments on dispersive transport across interfaces : The role of flow direction (doi 10.1029/2008wr007342). *Water Resources Research*, 45(2), 2009. [95](#)
- [15] B. Berkowitz and H. Scher. Anomalous transport in random fracture networks. *Physical review letters*, 79(20) :4038–4041, 1997. [11](#)
- [16] B. Berkowitz and H. Scher. Theory of anomalous chemical transport in random fracture networks. *Physical Review E*, 57(5) :5858, 1998. [10](#), [11](#)
- [17] P. W. M. Blom and M. C. J. M. Vissenberg. Dispersive hole transport in poly(*p*-phenylene vinylene). *Phys. Rev. Lett.*, 80 :3819–3822, Apr 1998. [10](#), [11](#)
- [18] F. Boano, AI Packman, A. Cortis, R. Revelli, and L. Ridolfi. A continuous time random walk approach to the stream transport of solutes. *Water Resources Research*, 43(10) :10425, 2007. [11](#)
- [19] S. Borak, W. Härdle, and R. I Weron. 1 stable distributions. *Statistical tools for finance and insurance*, page 19, 2005. [26](#)
- [20] S. Borak, W. Härdle, and R. I Weron. 1 stable distributions. *Statistical tools for finance and insurance*, page 19, 2005. [115](#)
- [21] M. Bromly and C. Hinz. Non-fickian transport in homogeneous unsaturated repacked sand. *Water Resour. Res*, 40(77) :7402–7402, 2004. [vii](#), [3](#), [11](#), [12](#), [37](#), [76](#)
- [22] A. Cartalade, S. Cadelen, R. Harich, and C. Ardois. Marche aléatoire à temps continu pour la modélisation du transfert de masse en milieu poreux insaturé : Théorie, simulations comparatives et application sur mesures expérimentales. *Rapport DM2S-SFME/MTMS/RT/07-002/A*, 2007. [11](#)
- [23] J.M. Chambers, C.L. Mallows, and BW Stuck. A method for simulating stable random variables. *Journal of the American Statistical Association*, pages 340–344, 1976. [115](#)

- [24] DR Champ, WF Merritt, and JL Young. Potential for the rapid transport of plutonium in groundwater as demonstrated by core column studies. 1982. [4](#)
- [25] E.W. Cheney, C.L. Lawson, H.J. Maehly, J.R. Mesztenyi, C.K. and Rice, Jr. H.G., Thacher, Witzgall C., and J.F., Hart. *Computer approximations, The SIAM series in applied mathematics*. John Wiley&Sons, New York, 1968. [128](#)
- [26] C. Choquet and MC Néel. Feynman-kac equation for convection-dispersion with mobile and immobile walkers. *Chaos Complexity and Transport, Marseille 2011*. [79](#), [85](#)
- [27] KH Coats and BD Smith. Dead-end pore volume and dispersion in porous media. *Old SPE Journal*, 4(1) :73–84, 1964. [13](#)
- [28] K. Diethelm, N.J. Ford, A.D. Freed, and Y. Luchko. Algorithms for the fractional calculus : a selection of numerical methods. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 194(6-8) :743–773, 2005. [16](#), [57](#), [89](#), [131](#)
- [29] M. Doi and S.F. Edwards. *The theory of polymer dynamics*, volume 73. Oxford University Press, USA, 1988. [11](#)
- [30] C. Doussan, A. Pierret, E. Garrigues, and L. Pagès. Water uptake by plant roots : li-modelling of water transfer in the soil root-system with explicit account of flow within the root system–comparison with experiments. *Plant and soil*, 283(1) :99–117, 2006. [4](#)
- [31] B. Duplantier. Le mouvement brownien,,Ä÷divers et ondoyant,Ä÷. *Séminaire Poincaré*, 1 :155–212, 2005. [8](#)
- [32] A. Einstein. On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat. *Ann. Phys., Lpz*, 17 :549, 1905. [8](#)
- [33] K.J. Falconer. *Fractal geometry : mathematical foundations and applications*. John Wiley & Sons Inc, 2003. [11](#)
- [34] W. Feller. An introduction to probabability theory and its applications, vol. 1, 1970. [23](#)
- [35] W. Feller and T. Teichmann. An introduction to probability theory and its applications, vol. 2. *Physics Today*, 20 :76, 1967. [23](#)
- [36] Hans C. Fogedby. Langevin equations for continuous time lévy flights. *Phys. Rev. E*, 50 :1657–1660, Aug 1994. [11](#)

- [37] JP Gaudet, H. Jegat, G. Vachaud, and PJ Wierenga. Solute transfer, with exchange between mobile and stagnant water, through unsaturated sand. *Soil Science Society of America Journal*, 41(4) :665–671, 1977. [13](#), [76](#)
- [38] R. Gorenflo and F. Mainardi. Fractals and fractional calculus in continuum mechanics. 378, 1997. [16](#), [53](#)
- [39] R. Gorenflo, F. Mainardi, D. Moretti, G. Pagnini, and P. Paradisi. Discrete random walk models for space-time fractional diffusion. *Arxiv preprint cond-mat/0702072*, 2007. [16](#), [89](#)
- [40] R. Gorenflo, F. Mainardi, and A. Vivoli. Continuous-time random walk and parametric subordination in fractional diffusion. *Chaos, Solitons & Fractals*, 34(1) :87–103, 2007. [40](#)
- [41] C. Grasser and V. Sitta. Water and solute transport in homogeneous and stratified media (in german). *Swiss Fed.Inst. of Technol. (ETH), Zurich*, 1993. [3](#)
- [42] R. Haggerty and S.M. Gorelick. Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity. *Water Resources Research*, 31(10) :2383–2400, 1995. [13](#)
- [43] C.D. Hardin Jr. Skewed stable variables and processes. Technical report, DTIC Document, 1984. [30](#)
- [44] G. Hornung, B. Berkowitz, and N. Barkai. Morphogen gradient formation in a complex environment : an anomalous diffusion model. *Physical Review E*, 72(4) :041916, 2005. [95](#)
- [45] M. Javaux, T. Schroder, J. Vanderborght, and H. Vereecken. Use of a three-dimensional detailed modeling approach for predicting root water uptake. *Vadose Zone Journal*, 7(3) :1079, 2008. [4](#)
- [46] VM Kenkre, EW Montroll, and MF Shlesinger. Generalized master equations for continuous-time random walks. *Journal of Statistical Physics*, 9(1) :45–50, 1973. [11](#)
- [47] J. Klafter, M.F. Shlesinger, and G. Zumofen. Beyond brownian motion. *Physics Today*, 49(2) :33–39, 1996. [11](#)
- [48] N. Krepyshva, L. Di Pietro, and M.C. Néel. Space-fractional advection-diffusion and reflective boundary condition. *Physical Review E*, 73(2) :021104, 2006. [2](#)
- [49] A. Kyprianou. *Introductory lectures on fluctuations of Lévy processes with applications*. Springer, 2006. [30](#), [34](#), [44](#), [46](#), [49](#)

- [50] A.N. Lagerås. A renewal-process-type expression for the moments of inverse subordinators. *Journal of Applied Probability*, pages 1134–1144, 2005. [46](#), [47](#), [48](#)
- [51] C. Latrille and Néel. transport study in unsaturated porous media by tracer experiment in a dichromatic x-ray experimental device. The 6th INternational Conference on tracers and Tracing methods, Oslo, Norway, June 2011. [76](#)
- [52] Y. Li, G. Farrher, and R. Kimmich. Sub-and superdiffusive molecular displacement laws in disordered porous media probed by nuclear magnetic resonance. *Physical Review E*, 74(6) :066309, 2006. [10](#)
- [53] M. Magdziarz. Langevin picture of subdiffusion with infinitely divisible waiting times. *Journal of Statistical Physics*, 135(4) :763–772, 2009. [36](#)
- [54] M. Magdziarz and A. Weron. Fractional fokker-planck dynamics : Stochastic representation and computer simulation. *PHYSICAL REVIEW E Phys Rev E*, 75 :016708, 2007. [36](#), [37](#)
- [55] M. Magdziarz, A. Weron, and J. Klafter. Equivalence of the fractional fokker-planck and subordinated langevin equations : the case of a time-dependent force. *Physical review letters*, 101(21) :210601, 2008. [36](#), [40](#)
- [56] F. Mainardi and R. Gorenflo. On mittag-leffler-type functions in fractional evolution processes. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 118(1) :283–299, 2000. [52](#)
- [57] B.B. Mandelbrot. *The fractal geometry of nature*. WH freeman, 1983. [11](#)
- [58] B. Maryshev, M. Joelson, D. Lyubimov, T. Lyubimova, and M.C. Néel. Non fickian flux for advection–dispersion with immobile periods. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 42 :115001, 2009. [16](#), [37](#), [42](#), [53](#), [57](#), [76](#), [89](#), [95](#)
- [59] M.M. Meerschaert, D.A. Benson, H.P. Scheffler, and B. Baeumer. Stochastic solution of space-time fractional diffusion equations. *Physical Review E*, 65(4) :041103, 2002. [11](#), [16](#)
- [60] M.M. Meerschaert and H.P. Scheffler. *Limit distributions for sums of independent random vectors : Heavy tails in theory and practice*, volume 321. Wiley-Interscience, 2001. [23](#)
- [61] M.M. Meerschaert and H.P. Scheffler. Limit theorems for continuous-time random walks with infinite mean waiting times. *Journal of applied probability*, 41(3) :623–638, 2004. [15](#)

- [62] M.M. Meerschaert and H.P. Scheffler. Limit theorems for continuous-time random walks with infinite mean waiting times. *Journal of Applied Probability*, 41(3) :623–638, 2004. [29](#), [42](#)
- [63] R. Metzler and J. Klafter. The random walk’s guide to anomalous diffusion : a fractional dynamics approach. *Physics Reports*, 339(1) :1–77, 2000. [14](#), [36](#), [51](#)
- [64] R. Metzler and J. Klafter. The restaurant at the end of the random walk : recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 37 :R161, 2004. [36](#)
- [65] G.M. Mittag-Leffler. Sur la nouvelle fonction $e_\alpha(x)$. *C.R. Académie des Sciences*, 137 :554–558, 1903. [127](#)
- [66] G.M. Mittag-Leffler. Sur la représentation analytique d’une branche uniforme d’une fonction homogène. *Acta mathematica*, 92 :101–182, 1905. [127](#)
- [67] R. Muralidhar, D. Ramkrishna, H. Nakanishi, and D. Jacobs. Anomalous diffusion : a dynamic perspective. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 167(2) :539–559, 1990. [11](#)
- [68] M.C. Néel, A. Zoia, and M. Joelson. Mass transport subject to time-dependent flow with nonuniform sorption in porous media. *Physical Review E*, 80(5) :056301, 2009. [42](#), [83](#), [97](#)
- [69] J. P. Nolan. *Stable Distributions - Models for Heavy Tailed Data*. Birkhauser, Boston, 2012. In progress, Chapter 1 online at academic2.american.edu/~jpnolan. [25](#), [115](#)
- [70] J.P. Nolan. Numerical calculation of stable densities and distribution functions. *Communications in Statistics-Stochastic Models*, 13(4) :759–774, 1997. [27](#)
- [71] G. Nutzmann, S. Maciejewski, and K. Joswig. Estimation of water saturation dependence of dispersion in unsaturated porous media : experiments and modelling analysis. *Advances in water resources*, 25(5) :565–576, 2002. [12](#)
- [72] Ben O’Shaughnessy and Itamar Procaccia. Analytical solutions for diffusion on fractal objects. *Phys. Rev. Lett.*, 54 :455–458, Feb 1985. [11](#)
- [73] H. Ovdad and B. Berkowitz. Pore-scale imbibition experiments in dry and prewetted porous media. *Advances in Water Resources*, 30(11) :2373–2386, 2007. [12](#)

- [74] I.Y. Padilla, T.C.J. Yeh, and M.H. Conklin. The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 35(11) :3303–3313, 1999. 12
- [75] W.R. Penrose, W.L. Polzer, E.H. Essington, D.M. Nelson, and K.A. Orlandini. Mobility of plutonium and americium through a shallow aquifer in a semiarid region. *Environmental science & technology*, 24(2) :228–234, 1990. 4
- [76] J. Perrin. Comptes rendus (paris) 146, 967 (1908). *Ann. Chim. Phys*, 18(5), 1909. 8
- [77] I. Podlubny and ScienceDirect (Online service). *Fractional differential equations : an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*. Academic press San Diego, 1999. 52, 65
- [78] Igor Podlubny. Mittag-leffler function. <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/8738>, , 17 Oct 2005 (Updated 25 Mar 2009). 128
- [79] D.M. Reeves, D.A. Benson, and M.M. Meerschaert. Transport of conservative solutes in simulated fracture networks : 1. synthetic data generation. *Water Resources Research*, 44(5), 2008. 15
- [80] Rhodes Rémi. Processus de lévy et calcul stochastique. <http://www.ceremade.dauphine.fr/~rhodes/enseignement>, 10 Novemebre 2010. 33
- [81] L.F. Richardson. Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 110(756) :709–737, 1926. 10
- [82] T. Roose and AC Fowler. A mathematical model for water and nutrient uptake by plant root systems. *Journal of theoretical biology*, 228(2) :173–184, 2004. 4
- [83] M. Sahimi, A.A. Heiba, H. Ted Davis, and LE Scriven. Dispersion in flow through porous media–ii. two-phase flow. *Chemical engineering science*, 41(8) :2123–2136, 1986. 12
- [84] S.G. Samko, A.A. Kilbas, and O.I. Marichev. Fractional integrals and derivatives : theory and applications. 1993. 16, 83
- [85] G. Samorodnitsky and MS Taqqu. Stable non-gaussian random processes. 1994. *Chapman&Hall, New York*. 29

- [86] E. Scalas, R. Gorenflo, and F. Mainardi. Uncoupled continuous-time random walks : Solution and limiting behavior of the master equation. *Physical Review E*, 69(1) :4679, 2004. [15](#), [79](#)
- [87] H. Scher and M. Lax. Stochastic transport in a disordered solid. i. theory. *Physical Review B*, 7(10) :4491, 1973. [79](#)
- [88] H. Scher and M. Lax. Stochastic transport in a disordered solid. ii. impurity conduction. *Phys. Rev. B*, 7 :4502–4519, May 1973. [11](#)
- [89] H. Scher and E.W. Montroll. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. *Physical Review B*, 12(6) :2455, 1975. [10](#)
- [90] H. Scher, M.F. Shlesinger, and J.T. Bendler. Time-scale invariance in transport and relaxation. *Phys. Today*, 44(1) :26, 1991. [10](#), [11](#)
- [91] Harvey Scher and Elliott W. Montroll. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. *Phys. Rev. B*, 12 :2455–2477, Sep 1975. [10](#), [11](#)
- [92] R. Schumer, D.A. Benson, M.M. Meerschaert, and B. Baeumer. Fractal mobile/immobile solute transport. *Water Resour. Res*, 39(10) :1296, 2003. [15](#), [16](#), [37](#)
- [93] V. Seshadri and B.J. West. Fractal dimensionality of lévy processes. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 79(14) :4501, 1982. [11](#)
- [94] A.N. Shiryaev. Probability, volume 95 of graduate texts in mathematics, 1996. [23](#)
- [95] M.F. Shlesinger. Asymptotic solutions of continuous-time random walks. *Journal of Statistical Physics*, 10(5) :421–434, 1974. [10](#)
- [96] C. Tadjeran, M.M. Meerschaert, and H.P. Scheffler. A second-order accurate numerical approximation for the fractional diffusion equation. *Journal of Computational Physics*, 213(1) :205–213, 2006. [16](#)
- [97] M.S. Taqqu. *Stable non-Gaussian random processes : stochastic models with infinite variance*. Chapman & Hall/CRC, 1994. [29](#)
- [98] G. Taylor. The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 223(1155) :446–468, 1954. [9](#)
- [99] Van Genuchten and Wierenga. Mass transfer studies in sorbing porous media : I. analytical solutions. *Soil.Soc. J.*, 40(4) :473–480. [12](#), [13](#), [42](#)

- [100] KG Wang and M. Tokuyama. Nonequilibrium statistical description of anomalous diffusion. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 265(3) :341–351, 1999. [11](#)
- [101] H.W. Weber and R. Kimmich. Anomalous segment diffusion in polymers and nmr relaxation spectroscopy. *Macromolecules*, 26(10) :2597–2606, 1993. [11](#)
- [102] G.H. Weiss and R.J. Rubin. Random walks : theory and selected applications. *Advances in Chemical Physics*, pages 363–505, 1983. [10](#)
- [103] A. Weron, M. Magdziarz, and K. Weron. Modeling of subdiffusion in space-time-dependent force fields beyond the fractional fokker-planck equation. *Physical Review E*, 77(3) :036704, 2008. [36](#)
- [104] GM Zaslavsky. Fractional kinetic equation for hamiltonian chaos. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 76(1-3) :110–122, 1994. [36](#)
- [105] GM Zaslavsky, M. Edelman, and BA Niyazov. Self-similarity, renormalization, and phase space nonuniformity of hamiltonian chaotic dynamics. *Chaos : An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 7(1) :159–181, 1997. [14](#)
- [106] Y. Zhang, D.A. Benson, and B. Baeumer. Moment analysis for spatiotemporal fractional dispersion. *Water Resour. Res*, 44(5) :05404, 2008. [37](#)
- [107] Y. Zhang, D.A. Benson, M.M. Meerschaert, E.M. LaBolle, and H.P. Schefler. Random walk approximation of fractional-order multiscaling anomalous diffusion. *Physical Review E*, 74(2) :026706, 2006. [11](#), [15](#), [16](#)
- [108] V.M. Zolotarev. *One-dimensional stable distributions*, volume 65. Amer Mathematical Society, 1986. [25](#)

Annexes

Annexe A

Algorithme de simulation de loi α -stable

Les lois stables ont été définies par Lévy (1925) lors de ses études sur les comportements des sommes de V.A. indépendantes. Le mot stabilité recouvre des situations très diverses. Ici il s'agit de la stabilité d'un loi de probabilité lors de l'addition des V.A. indépendantes. Plus précisément, une somme de deux V.A. indépendantes ayant une distribution α -stable est aussi distribuée suivant une loi α -stable. Une loi α -stable est caractérisée par quatre paramètres, un indice de stabilité $\alpha \in (0;2]$, un paramètre de symétrie $\beta \in [-1,1]$, un paramètre d'échelle $\gamma > 0$ et un paramètre de position $\mu \in \mathbb{R}$.

Différents auteurs [69][20][23] donnent une méthode pour simuler les lois stables. Dans cette partie nous allons utiliser un algorithme initialement développé par Chambers et al. [23]. Celui-ci permet de générer une V.A. suivant une loi stable notée $S_\alpha(0, \beta, 1)$. Pour en déduire une loi $S_\alpha(\mu, \beta, \gamma)$, il suffit de faire un changement de variable.

En effet, si X suit une loi $S_\alpha(\mu, \beta, \gamma) \Leftrightarrow Y = \frac{X - \mu}{\gamma^{1/\alpha}}$ suit une loi $S_\alpha(0, \beta, 1)$.

Comme pour la loi normale la simulation des lois stables passe par des V.A. uniformes exponentiellement distribuées.

A.1 Première étape

Elle consiste à générer une loi Φ uniformément distribuée sur $]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$ et une loi exponentielle W de paramètre 1. Pour cela, il faut d'abord générer deux VA uniformes sur $]0;1[$ (notées U_1 et U_2). Puis en utilisant le changement de

variables suivant

$$\begin{cases} \Phi = \pi U_1 - \frac{\pi}{2} \\ W = -\log(1 - U_2) \end{cases}$$

on obtient bien le résultat désiré.

A.2 Deuxième étape

Elle consiste à calculer différentes quantités (fonction de Φ et de W).

$$\begin{cases} \epsilon = 1 - \alpha, \\ a = \tan \frac{\Phi}{2}, \\ b = \tan \frac{\epsilon \Phi}{2}, \\ \tau = -\epsilon \tan(\alpha \Phi_0), \\ B = \frac{b}{\frac{\epsilon \Phi}{2}}, \\ d = \frac{z^{\frac{\epsilon}{1-\epsilon}} - 1}{\epsilon}, \\ z = \frac{\cos(\epsilon \Phi) - \tan(\alpha \Phi_0) \sin(\epsilon \Phi)}{W \cos \Phi} \end{cases}$$

A.3 Troisième étape

Elle consiste à générer une loi α -stable $S_\alpha(0, \beta, 1)$. Pour obtenir cela, il faut utiliser la proposition suivante

Proposition A.3.1. Soit Φ une loi uniforme sur $]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$ et W une loi exponentielle de paramètre 1, si nous posons

– Pour $\alpha \neq 1$

$$\begin{aligned} Y &= (\cos(\alpha \phi_0))^{1/\alpha} \left[\frac{2(a-b)(1+ab) - \Phi \tau B [b(1-a^2) - 2a]}{(1-a^2)(1+b^2)} \cdot (1 + \epsilon d) + \tau \left(d + \frac{1}{\epsilon} \right) \right] \\ &= \frac{\sin(\alpha(\Phi - \phi_0))}{(\cos(\phi))^{1/\alpha}} \cdot \left(\frac{\cos(\Phi - \alpha(\Phi - \phi_0))}{W} \right)^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \end{aligned}$$

où

$$\phi_0 = \frac{-\pi}{2} \beta \cdot \frac{1 - |1 - \alpha|}{\alpha}$$

– Pour $\alpha = 1$,

$$Y = \frac{2}{\pi} \left(\left(\frac{1}{2}\pi + \beta\Phi \right) \tan \Phi - \beta \log \left(\frac{\frac{1}{2}\pi W \cos \Phi}{\frac{1}{2}\pi + \beta\Phi} \right) \right)$$

alors la VA Y suit une loi $S_\alpha(0, \beta, 1)$.

Les figures suivantes illustrent l'implémentation numérique de l'algorithme décrit ci-dessus. Les figures (A.1) et (A.2) mettent en évidence l'effet de l'expo-

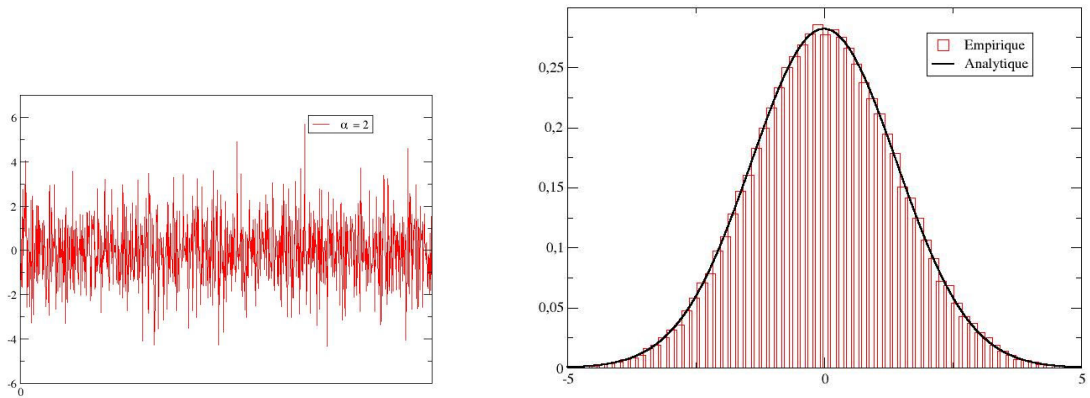


FIG. A.1: Simulations numériques d'une variable aléatoire qui suit une loi α -stable avec $\alpha = 2$

sant de stabilité. Elles sont obtenues avec un paramètre d'asymétrie et de position nul et un paramètre d'échelle égale à 1. On remarque que les échantillons présentent des valeurs extrêmes, qui augmente en grandeur et en fréquence, quand l'exposant de stabilité α diminue.

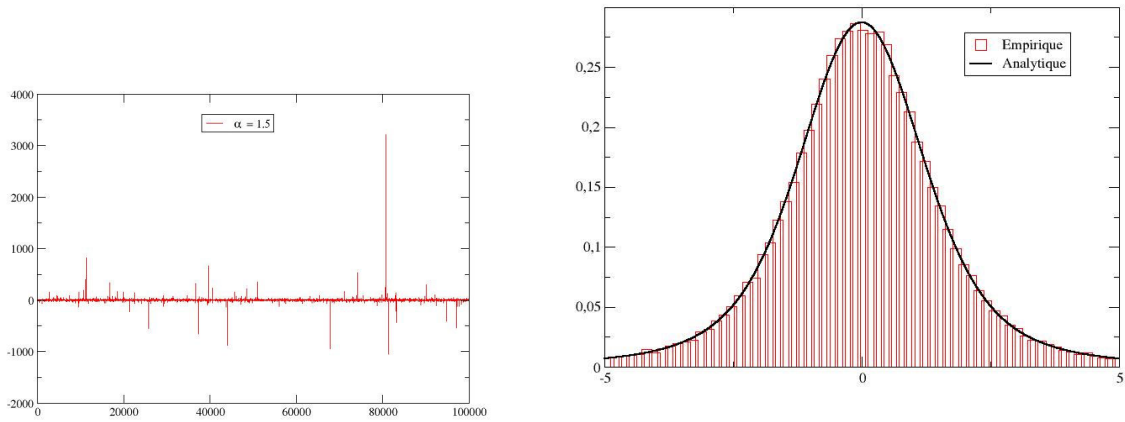


FIG. A.2: Simulations numériques d'une variable aléatoire qui suit une loi α -stable symétrique avec $\alpha = 1.5$

Les figures (A.3) et (A.4) montrent des échantillons de lois α -stable avec des paramètres d'asymétrie β non-nuls. En particulier, lorsque le paramètre d'asymétrie β est maximal c'est dire $\beta = 1$ (figure (A.5)), toutes les réalisations des variables aléatoires de lois α -stables prennent des valeurs positives quand l'exposant de stabilité α est inférieur ou égal à 1. Cette propriété présente un intérêt capital dans notre utilisation des lois α -stables.

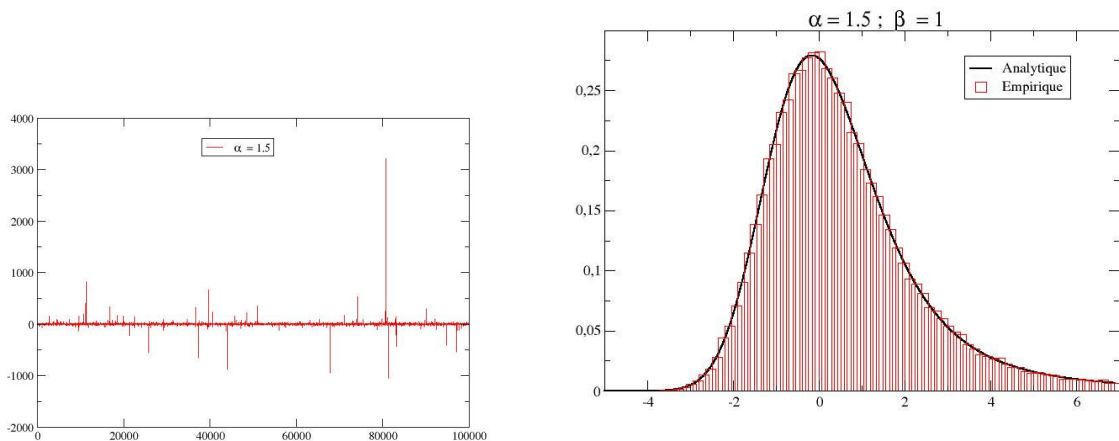


FIG. A.3: Simulations numériques de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 1$ et $\beta = 1.5$ et $\beta = 1$

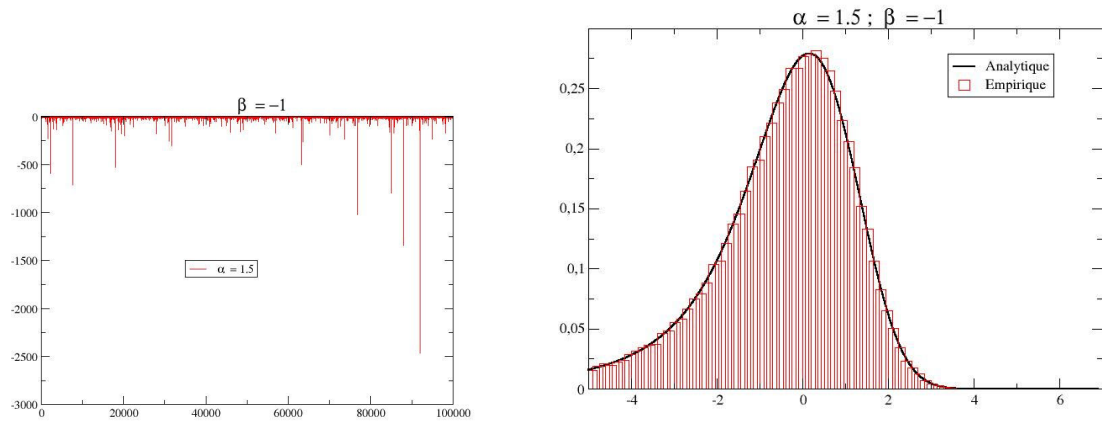


FIG. A.4: Simulations numériques de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 1$ et $\beta = 1.5$ et $\beta = -1$

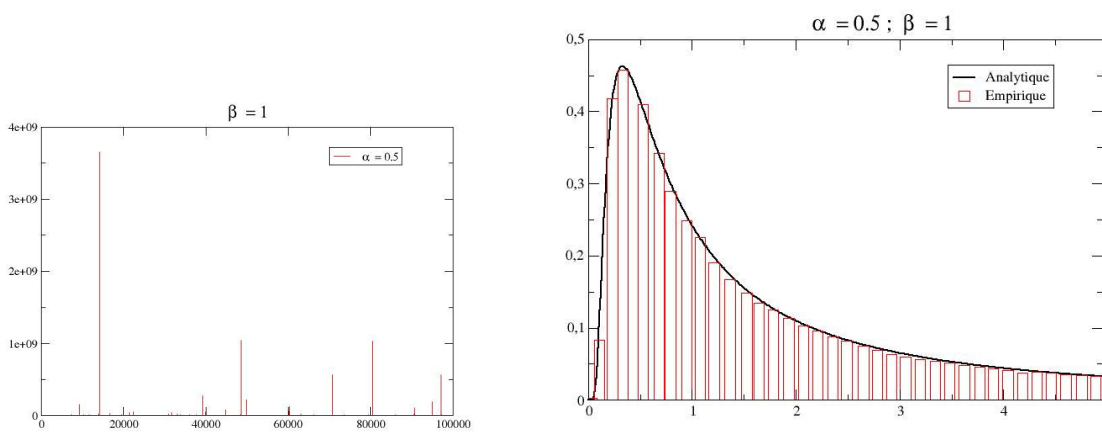


FIG. A.5: Simulations numériques de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 0.5$ et $\beta = 1$

Annexe B

Les opérateurs fractionnaires

L'intégration fractionnaire est la généralisation d'intégration itérée. Ensuite, les dérivées fractionnaires s'obtiennent en inversant les opérateurs intégraux.

B.1 L'intégrale fractionnaire

L'intégration fractionnaire généralise une formule due à Cauchy, et qui exprime une intégration multiple à l'aide d'une seule intégration, mais avec un noyau bien choisi. L'itération n -fois d'une fonction intégrable f est donnée par la formule suivante avec $n \in \mathbb{R}$:

$$\int_a^t dx_1 \int_a^{x_1} dx_2 \cdots \int_a^{x_{n-1}} f(x_n) dx_n = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^{1-\gamma}}$$

dans cette formule Γ représente la fonction gamma d'Euler. Cette formule donne l'intégrale d'ordre entier n , sur l'intervalle $[0, t]$. L'intégrale d'ordre non entier la généralise. On remarque immédiatement que pour parler d'une intégrale d'ordre entier ou non il faut préciser l'intervalle d'intégration.

B.1.1 Définition

Pour $\gamma > 0$, l'intégrale fractionnaire dans l'intervalle $[a, x]$, d'ordre γ est définie par la formule suivante :

$$I_{a,+}^\gamma f(x) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_a^x (x-t)^{\gamma-1} f(t) dt$$

Notons que l'intégration fractionnaire a la propriété d'un semi-groupe, c'est à dire

$$I_{a,+}^{\gamma} I_{a,+}^{\alpha} = I_{a,+}^{\gamma+\alpha}.$$

Notons aussi que parler d'intégration fractionnaire a un sens sur un certain intervalle, explicite dans l'écriture même de l'opérateur d'intégration. Dans ces relations a peut être fini ou égal à $-\infty$. Nous concentrerons notre attention sur le cas $a = 0$, car notre travail concerne principalement ce cas.

Nous avons aussi besoin, ponctuellement de l'intégrale fractionnaire « à droite » $I_{-,b}^{\gamma}$ défini par

$$I_{-,b}^{\gamma} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_x^b (t-x)^{\gamma-1} f(t) dt$$

B.1.2 Remarque

Si $f(x) = x^{\alpha}$ avec $\alpha > -1$ et $x < 0$ et pour $\gamma \geq 0$, on a la relation suivante :

$$I_{0,+}^{\gamma} x^{\alpha} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1+\gamma)} x^{\alpha+\gamma}.$$

S'agissant d'intégration sur $[0, x]$, on utilise la transformation de Laplace.

B.1.3 La transformée de Laplace de $I_{0,+}^{\gamma} f(x)$

L'interprétation de l'intégrale fractionnaire comme un produit de convolution permet le calcul de la transformée de Laplace de l'intégrale d'ordre non entier d'une fonction causale.

$$\mathcal{L} \left\{ I_{0,+}^{\gamma} f(x) \right\} = \frac{\mathcal{L}(s)}{s^{\gamma}}, \quad \gamma > 0 \quad ; \quad n-1 < \gamma < n, \quad (\text{B.1})$$

où s représente la variable de Laplace et $\mathcal{L}(s)$ la transformée de Laplace de $f(x)$.

S'agissant d'intégration sur des intervalles semi infinis, on utilise la transformation de Fourier.

B.1.4 La transformée de Fourier de $I_{-\infty,+}^{\gamma}f(x)$

La transformée de Fourier de l'intégrale fractionnaire est donnée par la relation suivante :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\{I_{-\infty,+}^{\gamma}f(x)\} &= \mathcal{F}\left\{\frac{t_+^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)}\right\}\mathcal{F}(f(x)) \\ &= (-j\omega)^{-\gamma}\mathcal{F}(\omega)\end{aligned}\tag{B.2}$$

où ω représente la variable de Fourier et $\mathcal{F}(\omega)$ la transformée de Fourier de $f(x)$. Si la fonction f est causale (nulle pour $x < 0$) cette relation implique (B.1)

B.2 La dérivée fractionnaire

Notons D^n ($n \in \mathbb{N}$) l'opérateur dérivée d'ordre n et soit f une fonction n -fois dérivable, remarquons que $D^n I^n f = Id$ et $I^n D^n f \neq Id$, c'est à dire que D^n est l'inverse à gauche (pas à droite) de l'intégrale d'ordre n I^n . La dérivée d'ordre n est un opérateur local, qui peut aussi être défini sans faire référence à une intégration. La dérivée d'ordre non entier est au contraire un opérateur non local toujours défini en relation avec un intervalle.

B.2.1 La dérivée fractionnaire au sens de Riemann-Liouville

Notons $D_{0,+}^{\gamma}$ l'inverse à gauche de $I_{0,+}^{\gamma}$, soit m un entier positif tel que $m - 1 < \gamma < m$. La dérivée fractionnaire d'ordre γ au sens de Riemann-Liouville est définie par :

$$D_{0,+}^{\gamma}f(x) = D^m I_{0,+}^{m-\gamma}f(x)$$

c'est à dire

$$D_{0,+}^{\gamma}f(x) = \begin{cases} \frac{d^m}{dx^m} \left[\frac{1}{\Gamma(m-\gamma)} \int_0^x \frac{f(\tau)}{(x-\tau)^{\gamma+1-m}} d\tau \right] & \text{si } m-1 < \gamma < m \\ \frac{d^m}{dx^m} f(x) & \text{si } \gamma = m \end{cases}\tag{B.3}$$

Si $f(x) = x^{\alpha}$ avec $\alpha > -1$, $t > 0$ et pour $\gamma \geq 0$ on a relation suivante :

$$D_{0,+}^{\gamma}x^{\alpha} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1-\gamma)}x^{\alpha-\gamma}$$

En particulier si $f(x) \equiv 1$ et $\gamma \notin \mathbb{N}$, on a :

$$D_{0,+}^{\gamma} 1 = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} x^{-\gamma}$$

C'est à dire qu'au sens de Riemann-Liouville la dérivée fractionnaire d'une fonction constante n'est pas nulle.

B.2.2 La dérivée fractionnaire au sens de Caputo

Notons ∂_t^{γ} la dérivée au sens de Caputo, elle est définie par :

$$\partial_t^{\gamma} = I_{0,+}^{m-\gamma} \partial_t$$

encore

$$\partial_t^{\gamma} f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(m-\gamma)} \int_0^x \frac{f^{(m)}(\tau)}{(x-\tau)^{\gamma+1-m}} d\tau & \text{si } m-1 < \gamma < m \\ \frac{d^m}{dx^m} f(x) & \text{si } \gamma = m \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

On voit assez facilement qu'en général :

$$D_{0,+}^{\gamma} f(x) = D_{0,+}^m I_{0,+}^{m-\gamma} f(x) \neq I_{0,+}^{m-\gamma} D_{0,+}^m f(x) = \partial_t^{\gamma} f(x)$$

à moins que la fonction $f(x)$ et toutes ses dérivées usuelles jusqu'à l'ordre de $m-1$ s'annulent en $x = 0^+$.

Contrairement à la dérivée au sens de Riemann-Liouville, la dérivée au sens de Caputo d'une fonction constante est nulle.

B.2.3 La dérivée fractionnaire au sens de Grünwald-Letnikov

La définition donnée par Grünwald et Letnikov pour la dérivée fractionnaire détermine l'inverse à gauche de l'intégrale $I_{-\infty, \mathcal{H}}^{\alpha}$. Par conséquent c'est une autre façon de calculer l'intégrale de Riemann-Liouville.

Les formules de Grünwald-Letnikov pour représenter la dérivée fractionnaire font intervenir des limites de différences finies d'ordre fractionnaire. Cette approche est importante pour la discrétisation de nos équations incluant des opérateurs d'ordre non entier. La différence finie d'ordre α et de pas h d'une fonction f sont, pour $\alpha > 0$

$$(\nabla_h^{\alpha} f)(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - kh). \quad (\text{B.5})$$

Le terme $\binom{\gamma}{k}$ est défini par

$$\binom{\gamma}{\beta} = \frac{\Gamma(\gamma + 1)}{\Gamma(\beta + 1)\Gamma(\gamma - \beta + 1)}$$

où Γ représente la fonction gamma d'Euler. On peut aussi voir que $(\nabla_h^\alpha f)$ généralise les différences finies d'ordre entier. Considérons en effet une fonction continue $f(x) \in \mathcal{C}^n$ dérivable n -fois (f de classe \mathcal{C}^n), la dérivée première de la fonction f est donnée par

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - f(x-h)}{h}. \quad (\text{B.6})$$

L'application de cette définition deux fois nous donne la dérivée seconde :

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{d^2f(x)}{dx^2} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(x) - f'(x-h)}{h} \\ f''(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{h^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

En utilisant (B.6) et (B.7) nous obtenons

$$f'''(x) = \frac{d^3f(x)}{dx^3} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - 3f(x-h) + 3f(x-2h) - f(x-3h)}{h^3}. \quad (\text{B.8})$$

et par récurrence on peut établir que :

$$f^{(n)}(x) = \frac{d^{(n)}f(x)}{dx^n} = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-n} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} f(x - kh). \quad (\text{B.9})$$

La dérivée fractionnaire au sens de Grünwald-Letnikov est une extension de cette formule, puisque pour tout nombre fractionnaire positif γ on a

$$\mathcal{G}_{a,+}^\gamma f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-\gamma} \sum_{k=0}^{\frac{x-a}{h}} (-1)^k \binom{\gamma}{k} f(x - kh); \quad (a < x < b) \quad (\text{B.10})$$

B.2.4 La transformée de Laplace de $D_{0,+}^\gamma f(x)$

La transformée de Laplace de la dérivée fractionnaire est donnée par la relation suivante :

– **Au sens de Riemann-Liouville**

$$\mathcal{L} \left\{ D_{0,+}^\gamma f(x) \right\} = s^\gamma \mathcal{L}(f(x)) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k \left[D_{0,+}^{\gamma-1-k} f(x) \right]_{x=0} \quad (\text{B.11})$$

– **Au sens de Caputo**

$$\mathcal{L} \{ \partial_t^\gamma f(x) \} = s^\gamma \mathcal{L}(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\gamma-k-1} f^{(k)}(0) \quad (\text{B.12})$$

Annexe C

Les Fonctions de Mittag-Leffler

La fonction exponentielle e^z joue un rôle très important dans la théorie des équations différentielles d'ordre entier. La généralisation de la fonction exponentielle à un seul paramètre a été introduite par G.M. Mittag-Leffler [65],[66]. Les fonctions de Mittag-Leffler jouent un rôle important pour les dérivées d'ordre non entier.

C.1 Définition

La fonctions de Mittag-Leffler est définie comme suit

$$E_\gamma(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(1 + \gamma k)} \quad \gamma \in \mathbb{R}_+, z \in \mathbb{C}. \quad (\text{C.1})$$

Avec $\gamma = 1$ on reconnaît l'exponentielle qui est un cas particulier des fonctions de Mittag-Leffler à un paramètre notées E_γ . Ces dernières font elles mêmes partie de l'ensemble plus général des fonctions de Mittag-Leffler $E_{\gamma,\beta}$ à deux paramètres. La fonction de Mittag Leffler a deux paramètres $E_{\gamma,\beta}(z)$ a été introduite par Argawal [4] est définie pour tout $z \in \mathbb{C}$ par le développement en série entière

$$E_{\gamma,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\beta + \gamma k)} \quad \gamma \in \mathbb{R}_+, \beta \in \mathbb{R}, \quad z \in \mathbb{C} \quad (\text{C.2})$$

Notons que $E_\gamma(x) = E_{\gamma,1}(x)$ est la première fonction étudiée par Mittag-Leffler.

Dans les équations différentielles fractionnaire cette fonction joue le même rôle que la fonction exponentielle e^z joue dans les équations différentielles ordinaires. On remarque que $E_{1,1}(z) = e^z$.

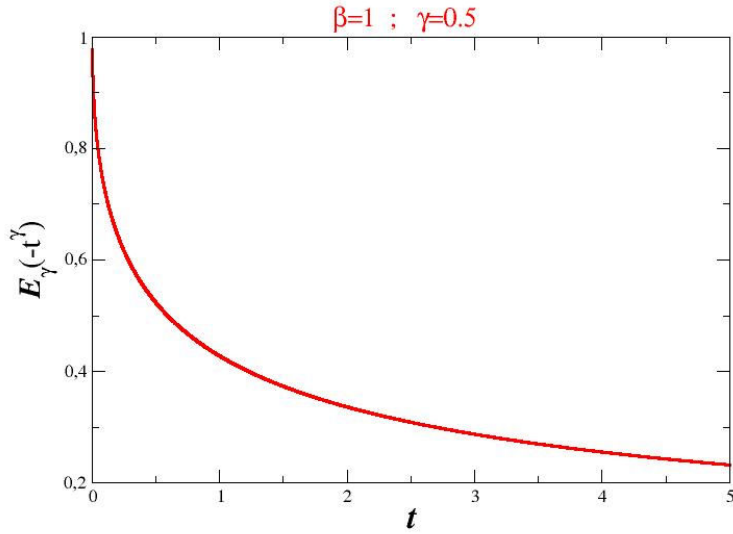


FIG. C.1: Courbe de la fonction de Mittag-Leffler $E_\gamma(-\Lambda t^\gamma)$ pour $\Lambda = 1$ et $\gamma = 0.5$.

A part cette formulation en série, plusieurs méthodes permettent de calculer la fonction de Mittag-Leffler, citons une approche qui utilise l'algorithme de Padé [25] et surtout la formulation intégrale, dont une version matlab développée par Podlubny est disponible dans [78].

C.1.1 La transformation de Laplace de $E_\gamma(-\Lambda t^\gamma)$

La transformation de Laplace de la fonction de Mittag-Leffler est donnée par :

$$\mathcal{L}\{E_\gamma(-\Lambda t^\gamma)\} = \frac{s^{\gamma-1}}{s^\gamma + \Lambda} \quad (\text{C.3})$$

$$\mathcal{L}\{t^{\beta-1}E_{\gamma,\beta}(-\Lambda t^\gamma)\} = \frac{s^{\gamma-\beta}}{s^\gamma + \Lambda} \quad (\text{C.4})$$

Remarquons que :

$$\mathcal{L}\left\{\int_0^\infty E_\gamma(-\Lambda t^\gamma) dt'\right\} = \frac{s^{\gamma-2}}{s^\gamma + \Lambda}$$

donc

$$\int_0^\infty E_\gamma(-\Lambda t^\gamma) dt' = tE_\gamma(-\Lambda t^\gamma).$$

Remarquons qu'à cause de (C.3) la fonction $E_\gamma(-\Lambda t^\gamma)$ n'est autre que l'image

de la fonction constante 1 par l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})^{-1}$. Ceci permet de calculer $E_\gamma(-\Lambda t^\gamma)$ et nous nous en sommes servis pour cette thèse.

Annexe D

Discrétisation de l'opérateur

$$\left(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} \right)^{-1}$$

Le calcul de cet opérateur est très important dans notre travail. Il est présent dans beaucoup d'équation présenté dans ce travail. De plus l'application de cet opérateur à la fonction 1 permet aussi de calculer la fonction de Mittag-Leffler.

D.1 L'opérateur $\left(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma} \right)$

L'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,+}^\alpha)$ présente la structure d'une convolution, son inversion reviendra à celle d'une matrice triangulaire. Il faut d'abord discrétiser l'intégrale fractionnaire $I_{0,+}^{1-\gamma}$ elle même.

Pour $I_{0,+}^\gamma f(x, N\Delta t)$, on dispose de l'approximation

$$I_{0,+}^\gamma f(x, N\Delta t) = \frac{\Delta t^\gamma}{\Gamma(2-\gamma)} \left(\sum_{n=0}^{N-1} W_n(f(x, (N-n)\Delta t)) + W'_N f(x, 0) \right) \quad (D.1)$$

avec

$$\begin{aligned} W_0 &= 1, \\ W_n &= (n+1)^{1+\gamma} - 2n^{1+\gamma} + (n-1)^{1+\gamma}, \\ W'_N &= (\gamma+1)N^\gamma - N^{\gamma+1} + (N-1)^{\gamma+1}, \end{aligned}$$

qui est d'ordre deux, voir Diethelm [28]. Cette approximation est fondée sur la méthode des trapèzes, qui consiste à partager le domaine d'intégration en petits

intervalles égaux au pas de temps Δt de la discrétisation. Ensuite sur chacun de ces petits intervalles, on approche par une droite la fonction $f(t)$ à laquelle on souhaite appliquer l'opérateur intégral $I_{0,+}^\gamma$. On obtient ainsi une approximation d'ordre deux pour $I_{0,+}^\gamma f$ si f est dérivable.

D.2 Inversion de $(Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma})$

Pour chaque fonction $g(t)$, intégrable dans \mathbb{R}_+ , notons

$$g(t) = (Id + \Lambda I_{0,+}^{1-\gamma}) f(t) \quad \forall t > 0$$

Ceci s'écrit

$$(1 - W_0)f(N\Delta t) + \sum_{n=1}^{N-1} W_n f((N-n)\Delta t) + W'_N f(0) = g(N\Delta t) \quad \forall N > 0,$$

donc on a

$$f(N\Delta t) = \sum_{n=0}^{N-1} B_n g((N-1)\Delta t) + B'_N f(0).$$

Les B_n se calculent facilement par récurrence selon la méthode qui suit. Appelons \mathcal{W}^N la matrice $(N+1) \times (N+1)$ qui, pour tout vecteur (Z_0, \dots, Z_N) détermine (Y_0, \dots, Y_N) tel que :

$$\begin{aligned} Y_0 &= W_0 Z_0 \\ &\vdots \\ Y_n &= \sum_{j=0}^n Z_{n_j} \quad \text{pour } n < N. \\ &\vdots \\ Y_N &= \sum_{j=0}^{N-1} Z_{n_j} + W'_N Z_0 \end{aligned}$$

Cette matrice triangulaire inférieure a pour éléments les $\mathcal{B}_{i,j}^N$ tels que :

$$\mathcal{W}_{i,j}^N = 0 \quad \text{si } j > i, \quad \mathcal{W}_{i,i}^N = W_0 \quad \text{et} \quad \mathcal{W}_{i,i-j}^N = W_j \quad \text{sauf} \quad \mathcal{W}_{N,0}^N = W'_N.$$

Son inverse, \mathcal{B}^N , a même structure avec $\mathcal{B}_{i,i}^N = \mathcal{B}^0$ et $\mathcal{B}_{i,i-j}^N = \mathcal{B}^j$.

Chaque relation

$$\sum_{k=0}^N \mathcal{B}_{ik}^N \mathcal{W}_{ki}^N = 1 \quad \text{s'écrit tout simplement} \quad \mathcal{B}_0 W_0 = 1.$$

Chaque relation

$$\sum_{k=0}^N \mathcal{B}_{0k}^N \mathcal{W}_{kn}^N = 0 \quad \text{avec} \quad 1 \leq n \leq N \quad \text{s'écrit} \quad B_0 W_0 + \dots + B_n W_0 = 0$$

et permet de calculer les B_n de proche en proche, sauf B_N . Pour ce dernier, une fois que les précédents sont calculés, on utilise $\sum_{k=0}^N \mathcal{B}_{0k}^N \mathcal{W}_{kN}^N = 0$ qui s'écrit

$$B_0 W_N + B_1 W_{N-1} + \dots + B_{N-1} W_1 + B_N W_0 = 0.$$

cet opérateur \mathcal{W} permet aussi un calcul rapide et précis des fonctions de Mittag-Leffler.

Notons que, la qualité de l'approche de $(Id + \Lambda I_{0,+}^\gamma)^{-1}$ dépend de la façon dont on approche l'intégrale fractionnaire $I_{0,+}^\gamma$. Pour valider notre méthode qui approche $I_{0,+}^\gamma$ nous avons donc comparé la solution exacte (analytique) de $I^\gamma t^\beta = \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta+1+\gamma)} t^{\gamma+\beta}$ avec celle obtenue en utilisant notre approche, (la figure (D.1) montre un bon accord entre les deux méthodes).

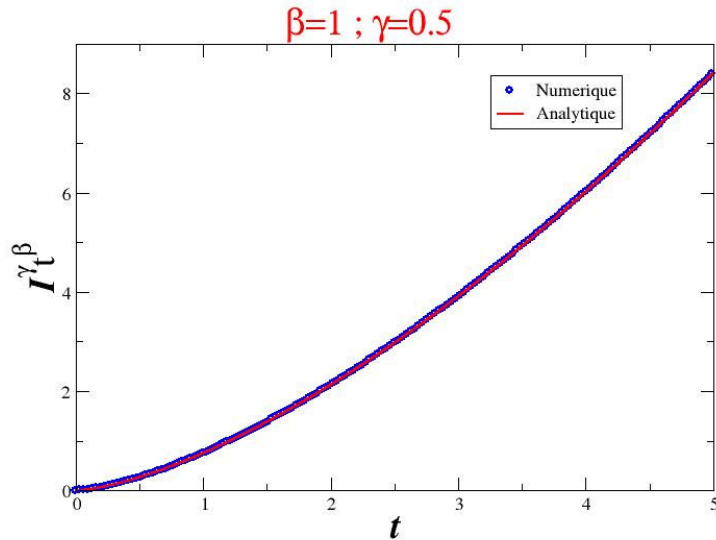


FIG. D.1: Comparaison de $I^\gamma t^\beta$ calculer numériquement et de $\frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta+1+\gamma)} t^{\gamma+\beta}$ pour $\beta = 1$ et $\gamma = 0.5$.

Quand $\gamma = 1$, la fonction de Mittag Leffler ressemble à la fonction exponentielle. La figure (D.2) montre la comparaison entre $(Id + \Lambda I_{0,+}^\gamma)^{-1}(1)$ et e^{-t} .

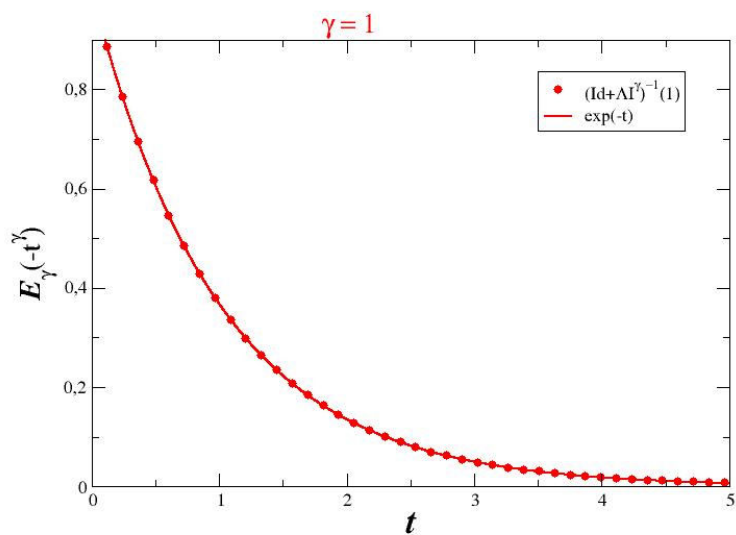


FIG. D.2: Comparaison entre $(Id + \Lambda I_{0,+}^\gamma)^{-1}(1)$ et e^{-t} , pour $\beta = 1$ et $\gamma = 1$.

Annexe E

Démonstration de la convergence faible $[(\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau] \rightharpoonup 0$

Rappelons que :

$$\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} \tau B_m^\tau = \int_{y \in \mathbb{R}} \tau B_m^\tau(x - y - v\tau, t - \tau) \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi\left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}}\right) dy.$$

Nous aurons démontré que $(\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau \rightarrow 0$ lorsque nous avons vérifié pour toute fonction test $g \in \mathcal{C}_b(E)$ que

$$\int_E g(x, t) (\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau dx dt \rightarrow 0. \quad \text{quad} \quad \tau \rightarrow 0$$

Soit donc $\forall g \in \mathcal{C}_b(E)$. On a :

$$\begin{aligned} \int_E \mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} \tau B_m^\tau(e) g(e) de &= \int_E \int_{y \in \mathbb{R}} \tau B_m^\tau(x - y - v\tau, t - \tau) \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi\left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}}\right) g(x, t) dy de \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left[\int_{y \in \mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi\left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}}\right) g(x + y + v\tau, t + \tau) dy \right] de \end{aligned}$$

Posons

$$I = \int_E (\mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} - Id) \tau B_m^\tau(e) g(e) de$$

$$\begin{aligned} I &= \int_E \mathbb{K}_\tau \mathcal{T}_{v\tau, \tau} \tau B_m^\tau(e) g(e) de - \int_E \tau B_m^\tau(e) g(e) de \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left[\int_{y \in \mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi\left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}}\right) g(x + y + v\tau, t + \tau) dy \right] de \\ &\quad - \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) g(e) de - \int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^T \tau B_m^\tau(e) g(e) de \end{aligned}$$

donc $I = I_1 + I_2 - I_3$ avec

$$I_1 = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left[\int_{y \in \mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) [g(x+y+v\tau, t+\tau) - g(x+v\tau, t+\tau)] dy \right] de$$

$$I_2 = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left(\int_{y \in \mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) dy \right) [g(x+v\tau, t+\tau) - g(x, t)] dxdt$$

$$I_3 = \int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^T \tau B_m^\tau(x, t) g(x, t) dxdt$$

Pour chacune des intégrales I_j , vérifions qu'elle tend vers zéro. La dernière est la plus facile.

Comme dans I_3 nous avons $\tau B_m^\tau(x, t)$ qui vérifie

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{T-\tau}^T B_m^\tau(x, t) dxdt < 1,$$

à cause de de la « propriété P », $|I_3|$ est majorée par $\sup_E |g|$ qui tend vers zéro quand $\tau \rightarrow 0$.

Comme $\int_{y \in \mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) dy = 1$, on a :

$$I_2 = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(x, t) [g(x+v\tau, t+\tau) - g(x, t)] dxdt.$$

Or g est continue alors que $\int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} B_m^\tau(x, t) dt < 1$. Donc le théorème de la convergence dominée entraîne que $I_2 \rightarrow 0$ quand $\tau \rightarrow 0$.

Pour I_1 , prenons $\epsilon > 0$. La décroissance rapide de φ au voisinage de l'infini implique qu'il existe $A > A_0$ telle que pour chaque $A > A_0$ on ait

$$\sup_E |g| \int_A^\infty \varphi(y) dy \leq \epsilon/2,$$

qui permet de majorer par ϵ la contribution à I_1 des y n'appartenant pas à $[-1, A]$ dans l'intégrale par rapport à y .

L'intégrale I_1 se décompose en $I_1 = I_1' + I_1''$ avec :

$$I_1' = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left(\int_0^{\sqrt{2D\tau}A} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) \times [g(x+v\tau, t+\tau) - g(x, t)] dy \right) de$$

et

$$I_1'' = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left(\int_{\sqrt{2D\tau}A}^\infty \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) \times [g(x+v\tau, t+\tau) - g(x, t)] dy \right) de.$$

Le choix de A ci-dessus implique

$$|I_1''| \leq \epsilon/2 \quad (\text{E.1})$$

Pour I_1' , nous avons :

$$\begin{aligned} |I_1'| &\leq \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \left(\int_0^{\sqrt{2D\tau}A} \frac{1}{\sqrt{2D\tau}} \varphi\left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}}\right) dy \right) \\ &\quad \sup_{y \in (0, \sqrt{2D\tau}A)} |g(x + v\tau + y, \cdot) - g(x + v\tau, \cdot)| de \\ &\leq C \int_{\mathbb{R}} \int_0^{T-\tau} \tau B_m^\tau(e) \sup_{y \in (0, \sqrt{2D\tau}A)} |g(x + v\tau + y, \cdot) - g(x + v\tau, \cdot)| de. \end{aligned}$$

A nouveau grâce au théorème de la convergence dominée, le second membre de cette dernière relation converge vers zéro quand $\tau \rightarrow 0$.

Donc le résultat énoncé est vérifié.

Annexe F

Comportement limite des flux

F.1 Preuve que

$$\int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} [V^\tau(x+y, t) - V^\tau(x-y, t)] dy \rightarrow 0$$

dans $\mathcal{D}'(E)$

Nous allons montrer que

$$\int_0^{+\infty} \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} [V^\tau(x+y, t) - V^\tau(x-y, t)] dy \rightarrow 0$$

dans $\mathcal{D}'(E)$ dès que $V \rightarrow 0$.

Soit $g \in \mathcal{D}(E)$. Nous devons montrer que

$$I = \int_E g(x, t) \int_0^\infty \frac{\Phi_\tau(y)}{\tau} [V^\tau(x+y, t) - V^\tau(x-y, t)] dy dx dt \rightarrow 0.$$

Tout d'abord,

$$I = \int_{\mathbb{R}} \int_0^T V^\tau(x, t) \left(\int_0^\infty (g(x-y, t) - g(x+y, t)) \right) \Phi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) dy dx dt$$

Posons $l = \sqrt{2D\tau}$ donc $D = l^2/2\tau$.

En utilisant le changement de variable $Y = y/\sqrt{2D\tau}$ on a :

$$I = \int_{\mathbb{R}} \int_0^T V^\tau(x, t) \left(\int_0^\infty (g(x-y, t) - g(x+y, t)) \right) \Phi \left(\frac{y}{\sqrt{2D\tau}} \right) dy dx dt$$

$$= 2D \int_{\mathbb{R}} \int_0^T V^\tau(x, t) \left(\int_0^\infty \frac{(g(x - Yl, t) - g(x + Yl, t))}{2l} \right) 2\Phi(Y) dY dx dt.$$

Nous allons utiliser $\int_0^\infty Y\Phi(Y) dY = 1/4$, qui est démontré à l'annexe G.

On en déduit que

$$\int_{\mathbb{R}} \int_0^T V^\tau(e) \left(\int_0^\infty \frac{(g(x - lY, t) - g(x + lY, t))}{l} \right) \Phi(Y) dY de = \int_E V^\tau(e) (-\partial_x g(e) - R^\tau(e)) de,$$

où le reste R^τ est défini par

$$R^\tau = \int_{\mathbb{R}} \int_0^T V^\tau(x, t) r^\tau(x, t) dx dt$$

avec

$$r^\tau(x, t) = \int_0^\infty \left(\frac{(g(x - lY, t) - g(x + lY, t))}{l} \right) \Phi(Y) dY.$$

Compte tenu de $\int_0^\infty Y\Phi(Y) dY = 1/4$, la formule de Taylor-Young implique que

$$|r^\tau(x, t)| \leq 2 \sup |\partial_x^2 g|.$$

Nous déduisons de cette dernière relation que :

$$\left| \int_E V^\tau(e) R^\tau(e) de \right| \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad \tau \rightarrow 0.$$

Ce qui démontre le résultat annoncé.

Annexe G

Une propriété de la Gaussienne

La densité d'une V.A. Gaussienne centrée réduite φ est que

$$\int_{\mathbb{R}} y^2 \varphi(y) dy = 1.$$

A cause de la symétrie ceci implique

$$\int_0^{+\infty} y^2 \varphi(y) dy = \frac{1}{2}$$

En intégrant par partie et en utilisant $\phi(y) = \int_y^{+\infty} y^2 \varphi(y) dy$ c'est à dire $\phi(y)' = -\varphi(y)$, on en déduit

$$\int_0^{+\infty} y \phi(y) dy = \left[\frac{y}{2} \phi(y) \right]_0^{+\infty} + \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} y^2 \varphi(y) dy.$$

Le premier terme du second membre est nul à cause de la décroissance rapide de ϕ à l'infini. On en déduit

$$\int_0^{+\infty} y \phi(y) dy = \frac{1}{4}$$

De la même façon $\int_0^{+\infty} y^2 \varphi(y) dy$ est fini à cause de

$$\int_0^{+\infty} y^2 \phi(y) dy = \left[\frac{y^2}{2} \phi(y) \right]_0^{+\infty} - \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} y^3 \varphi(y) dy.$$