



HAL
open science

Méthode d'inversion d'un Modèle de diffusion Mobile Immobile fractionnaire

Martyrs Ouloin

► **To cite this version:**

Martyrs Ouloin. Méthode d'inversion d'un Modèle de diffusion Mobile Immobile fractionnaire. Autre [cond-mat.other]. Université d'Avignon, 2012. Français. NNT : 2012AVIG0504 . tel-01016447

HAL Id: tel-01016447

<https://theses.hal.science/tel-01016447>

Submitted on 30 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.

UNIVERSITE D'AVIGNON et DES PAYS DU VAUCLUSE
Faculté des Sciences
Département de Physique

**Méthode d'inversion d'un modèle de diffusion Mobile Immobile
fractionnaire**
Spécialité : Mécanique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du Diplôme de Doctorat par

Martyrs Ouloin

17 Juillet 2012

Jury composé de

Christelle Latrille (Examineur)	CEA- Saclay
Mohamed El Ganaoui (Rapporteur)	Université de Lorraine
Mohamed Najib Ouarzazi (Rapporteur)	Université de Lille
Marie Christine Néel (Directeur)	Université d'Avignon
Maminirina Joelson (Directeur)	Université d'Avignon

Résumé

L'étude expérimentale du transport de soluté dans les milieux poreux montre des écarts à la loi de Fick. D'autre part, des progrès importants ont été accomplis sur le transport en milieu poreux, en supposant que les fluides (et les traceurs) en mouvement dans ces milieux sont arrêtés pendant des durées aléatoires. La matrice solide rend cette idée plausible. Nous étudions un modèle utilisant cette idée en l'associant à des durées d'immobilisation sans moyenne finie, en fait distribuées par des lois de Lévy. On arrive ainsi au modèle MIM fractionnaire, ou fractal.

Ce modèle est une équation aux dérivées partielles pour la densité de traceur. Il équivaut à supposer que les particules de fluide et de traceur font des déplacements régis par un processus stochastique. Ce dernier est la limite hydrodynamique de marches au hasard fondées sur des déplacements convectifs, des sauts gaussiens, et des arrêts distribués suivant une loi de Lévy. Ces deux versions du même modèle donnent deux méthodes de simulation numérique.

Nous montrons comment mettre en oeuvre ces méthodes. Ceci a pour but la maîtrise d'outils de simulation, afin de comparer avec des données expérimentales pour savoir si ce modèle convient pour décrire le transport dans un milieu donné. Cette simulation, pour être efficace, nécessite la connaissance des paramètres du transport de soluté au sein du milieu donné. Ils sont difficilement mesurables et/ou identifiables en pratique. Donc, il faut pouvoir les estimer à partir de grandeurs qu'on sait mesurer directement, comme la densité d'un traceur. Pour cela, nous avons mis en place une méthode d'inversion qui permet d'extraire les paramètres du modèle MIM fractionnaire, à partir de données expérimentales.

Cette méthode d'inversion est basée sur la transformation de Laplace. Elle utilise le lien entre les paramètres de transport du modèle MIM fractionnaire, et les dérivées de la transformée de Laplace des solutions de ce modèle. Ce lien est exact dans un milieu semi-infini, et seulement approché dans un milieu fini. Après avoir testé cette méthode en l'appliquant à des données numériques en essayant de retrouver leurs paramètres à l'"aveugle", nous l'appliquons à des données issues d'une expérience de traçage en milieu poreux insaturé.

Table des matières

0.1	Introduction	9
1	Le phénomène de diffusion dans un milieu poreux	12
1.1	Introduction	12
1.2	Modèle classique de transport par diffusion	14
1.3	Observation du transport anormal	16
1.4	Conclusion	21
2	Outils Théoriques	22
2.1	Introduction	22
2.2	Notion de variable aléatoire	23
2.2.1	Moments d'une variable aléatoire	25
2.2.2	Loi de probabilité gaussienne	25
2.2.3	Version simplifiée du théorème de la limite centrale	28
2.2.4	Simulation de la réalisation d'une variable aléatoire	28
2.2.5	Lois α -stables de Lévy	31
2.2.6	Moments	38
2.2.7	Théorème de la limite centrale généralisée	38
2.2.8	Simulation de variables aléatoires α -stables	39
2.3	Fonction aléatoire ou processus stochastique	42
2.4	Les opérateurs fractionnaires	47
2.4.1	Les opérateurs fractionnaires d'intégration	48
2.4.2	Dérivées d'ordre non entier	48
2.4.3	Les formules de Grünwald-Letnikov pour la dérivée frac- tionnaire	50
2.4.4	La dérivée de Caputo	54
2.4.5	La dérivée de Riesz-Feller	55
2.5	Fonction de Mittag-Leffler	55
2.5.1	Définition	55
2.5.2	Transformée de Laplace	56

2.5.3	Equations différentielles vérifiées par les fonctions de Mittag-Leffler	56
2.5.4	Représentation graphique	57
2.6	Conclusion	59
3	Modélisation de la diffusion anormale	60
3.1	Introduction	60
3.2	Le modèle MIM classique	63
3.2.1	Principe du MIM	63
3.2.2	Simulation numérique du modèle MIM	64
3.2.3	Allure des solutions du Modèle MIM	65
3.3	Modèles fractionnaires	66
3.3.1	Modèle fractionnaire en espace	66
3.3.2	L'équation de Fokker-Planck fractionnaire	67
3.3.3	Le modèle MIM fractionnaire en temps	68
3.4	Principe de la solution numérique des diverses formulations du fMIM	78
3.4.1	La dérivée de Caputo ∂_t^γ	78
3.4.2	La dérivée de Riemann-Liouville	79
3.4.3	Discrétisation de $\mathcal{H} = (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1}$	79
3.4.4	L'opérateur \mathcal{H}	79
3.4.5	L'inversion de \mathcal{H}	81
3.4.6	Schéma semi-implicite permettant de résoudre le fMIM	83
3.4.7	Conditions aux limites	83
3.4.8	Allure des profils spatiaux et des courbes de percée	84
3.5	Modèle de marche aléatoire subordonnée en temps	86
3.5.1	Principe des Marches au hasard	87
3.5.2	Principe de la Simulation des Marches au hasard	89
3.6	Conclusion	92
4	Inversion du modèle MIM fractionnaire. Détermination des paramètres du modèle à partir de données	93
4.1	Introduction	93
4.2	Rappel d'une méthode utilisant des moments temporels dans le cadre du MIM	94
4.3	Méthode des moments temporels tronqués pour le modèle MIM fractionnaire	96
4.3.1	Moments temporels tronqués	96

4.3.2	Transformée de Laplace de $P(x, t)$ en milieu semi-infini pour les deux versions du modèle MIM	97
4.3.3	Lien entre $M_n(x, s)$ et les dérivées de f	98
4.3.4	Extraction des paramètres	100
4.3.5	Procédure pour estimer les paramètres du MIM ou fMIM à partir de 2 courbes de concentration	102
4.3.6	Expérience numérique	104
4.3.7	Mise en oeuvre numérique avec des données tronquées . .	108
4.3.8	Application à des données expérimentales	109
4.4	Conclusion	113
5	Conclusion et perspectives	114
A	Discussion de l'hypothèse du milieu semi-infini, dans le cadre du MIM fractionnaire	126

Table des figures

1.1	Comparaison entre un histogramme d'un mouvement Brownien simulé et la solution de l'équation de diffusion (1.2) d'après Gorenflo et Minardi (2002). A gauche on a un diagramme semi logarithmique représentant en abscisses les positions d'un ensemble de marcheurs aléatoires, et en ordonnées leur densité. Les points représentent cette densité par l'intermédiaire d'un histogramme, les traits pleins correspondent à la solution de l'équation de la diffusion. Le paramètre $\alpha = 2$ définit dans un ensemble plus vaste la loi de probabilité gaussienne des sauts du mouvement Brownien. La partie de droite montre des échantillons de sauts (en bas) et la trajectoire d'une particule (haut).	15
1.2	Illustration schématique de l'effet de la dispersion anormale sur l'allure de courbes de percée, d'après Berkowitz et al. (2000)	17
1.3	Figure : Courbes de restitution de plusieurs essais de traçage au bromide sur le site de Mirror Lake en domaine cristallin fracturé. D'après Becker et Shapiro (2003).	18
1.4	Comparaison de données expérimentales sur une fracture simple avec le modèle ADE et un modèle incluant un terme de stockage transitoire, d'après Raven et al. (1988).	19
1.5	Comparaison entre un modèle ADE (en pointillés) et un modèle de marche aléatoire CTRW (en trait plein) pour représenter des résultats d'expériences (cercles) en laboratoire d'après Bromly et Hinz [17]	20
2.1	Exemple de densité de probabilité (ici une loi lognormale) et de fonction de répartition d'une variable aléatoire continue	24
2.2	Exemples de densités de probabilité de variables aléatoires suivant la loi normale	26
2.3	Exemple de fonction de répartition de variable aléatoire de loi normale	27
2.4	Densité de probabilité de lois α -stables symétriques calculées numériquement. Toutes les densités représentées correspondent à la valeur maximale $\beta = 1$ du paramètre de dissymétrie. C'est seulement avec $\alpha < 1$ qu'on obtient des densités dont le support est \mathbb{R}^+	35
2.5	Densité de probabilité de lois α -stables asymétriques calculées numériquement. Toutes les densités représentées correspondent à la valeur maximale $\beta = 1$ du paramètre de dissymétrie. C'est seulement avec $\alpha < 1$ qu'on obtient des densités dont le support est \mathbb{R}^+	36
2.6	Fonction de répartition de lois α -stables symétriques calculées numériquement.	36
2.7	Fonction de répartition de lois α -stables asymétriques calculées numériquement.	37

2.8	Simulations numériques d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 2$ et $\alpha = 1.5$	40
2.9	Simulation numérique d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 0.5$	41
2.10	Simulation numérique d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 1$ et $\beta = 0.5$ et $\beta = 1$	41
2.11	Simulation numérique d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 0.5$ et $\beta = 1$	42
2.12	Simulation numérique de différentes trajectoires d'un mouvement Brownien ($W_t, t \geq 0$).	46
2.13	Courbe de la fonction de Mittag-Leffer $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ pour $\Lambda = 1$ et $\alpha = 0.5$	57
3.1	Courbes de percée $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM donnés par l'équation (3.4) avec comme condition aux limites en $x = 0$ flux $R(t) = R_0$ pour $t < t_0$, $R(t) = 0$ pour $t > t_0$; on a pris $D = 0.01$, $v = 1$, $K = 1$ et $\omega = 10$	65
3.2	Représentation de quelques étapes de marche aléatoire approchant le mouvement Brownien avec une vitesse moyenne uniforme	70
3.3	Représentation d'une étape d'une marche aléatoire combinant des sauts instantanés, de l'advection et des immobilisations et approchant le fMIM.	71
3.4	Profil de $C(x, t)$ lorsque $v = 0$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.5$; conditions aux limites $C(0,t)=C(1,t)=0$	77
3.5	La solution approchée et la solution exacte sont en accord, $\gamma = 0.5$, $\alpha = 0.5$	80
3.6	La solution approchée et exacte sont en accord, $\gamma = 0.5$, $\alpha = 0.25$	81
3.7	Profils temporels $P(x,t)$ des courbes de percée solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) avec $D = 0.001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.6$; $D = 0.001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.5$ pour différentes positions.	84
3.8	Profils temporels $P(x,t)$ des courbes de percée solutions du modèle MIM fractal donnés par l'équation (3.29) avec $D = 0.001$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.9$; $D = 0.001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.8$ pour différentes positions.	85
3.9	Courbes de percée en coordonnées logarithmiques, montrant le comportement asymptotique de 2 jeux de paramètres donnant des profils, excepté aux grands temps.	85
3.10	Instantanés $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM-fractionnaire en temps donnés par l'équation (3.29) comparés à la Marche aléatoire (3.38) avec $D = 0.00001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.9$	86
3.11	Profils temporels $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) avec $D = 0.00001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.9$	86
3.12	Trajectoires des marches au hasard définies par (3.38). Les trajectoires ont été obtenues avec les mêmes déplacements lN_n	88
3.13	Profils $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) comparés à la Marche aléatoire (3.38)	90
3.14	Courbes de percée correspondant à $D = 0.1$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1.2$, et $\gamma = 0.5$	90

3.15 Courbes de percée correspondant à $D = 0.1$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1.2$, et $\gamma = 0.6$ 91

3.16 Courbes de percée correspondant à $D = 0.1$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1.2$, et $\gamma = 0.8$ 91

4.1 Paramètres estimés et profils temporels qui en sont issus. A gauche, les courbes représentées par des lignes correspondent à $P^*(x_i, t)$ pour des paramètres initiaux $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$. A droite : paramètres estimés $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$ à partir des profils temporels $P^*(x_i, t)$ représentés à gauche par des courbes. A gauche, les symboles représentent les profils temporels calculés à partir des estimations associées au minimum de E . De plus, les positions des profils utilisés pour l'estimation sont $x = 0$ et $x = 0.2$ 105

4.2 Les paramètres initiaux $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.001, 0.46, 0.84, 0.89)$. A gauche, les profils temporels correspondant $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ et $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$. A droite, paramètres estimés et erreur relative de E 106

4.3 Effet d'un bruit gaussien artificiel d'amplitude très faible devant le signal. Les vrais paramètres sont $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$ et l'estimation a été effectuée en ajoutant ηB à P^* , avec $\eta = 1$ à gauche et $\eta = 10$ à droite. Les paramètres estimés et les valeurs de E diffèrent peu de ce que montre la partie droite de la figure. 108

4.4 Effet d'un bruit gaussien artificiel réalisant un rapport signal sur bruit de l'ordre de 10 (avec $\eta = 100$) pour de "vrais" paramètres égaux à $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$. L'allure générale de la courbe \mathcal{C} ressemble encore à ce qu'on obtient sans bruit. Cependant, les estimations des 4 paramètres couvrent des plages réduites qui ne contiennent pas toutes les vraies valeurs. La courbe \mathcal{C} est en quelque sorte repliée en plusieurs courbes plus petites qui se recouvrent partiellement. Ceci se voit nettement sur la représentation de l'erreur E . On voit aussi que Λ est représenté par au moins deux traits superposés, comme D et γ 108

4.5 Estimation des paramètres, appliqués à des données numériques tronquées à $t = t_c$. A gauche : solution du MIM fractionnaire obtenu pour $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.001, 0.46, 0.01, 0.4)$ (lignes), ainsi que $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$ (symboles). A droite : paramètres estimés à partir de $1_{[0, t_c]}(t)$, et valeurs de E pour $t_c = 6$, c'est à dire un peu plus que la durée du pic représentée à gauche. 110

4.6 Paramètres estimés à partir des données de la figure (précédente) en les tronquant à $t_c = 5$ à gauche, à $t_c = 4$ à droite. A gauche, $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ représente encore une approximation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. A droite, avec une troncature plus sévère, seul $(D^{(e)}, v^{(e)})(s_m)$ approche (D^*, v^*) , $(\gamma^{(e)})(s_m) = 0.42$ correspond à une erreur relative de 10/100, et $(\Lambda^{(e)})(s_m)$ est négatif. 110

4.7 Solutions du modèle (3.29) correspondant aux paramètres estimés à partir des courbes de percée expérimentales. Les traits représentent ces solutions, les données correspondent aux symboles 111

5.1	Erreurs relatives commises sur les dérivées de f en appliquant l'approximation du milieu semi-infini, avec les données de la figure 4.2	127
-----	---	-----

0.1 Introduction

Contexte de l'étude

Les milieux poreux constituent une grande part de notre environnement. En particulier, les milieux naturels (sols, roches, tissus organiques) sont essentiellement faits de milieux poreux. Le transport dans ces milieux présente par conséquent un intérêt fondamental pour la compréhension des différents mécanismes complexes qui gèrent l'environnement naturel et pour la préservation d'un environnement sain.

Le développement d'outils de modélisation et de prédiction dans un contexte de contamination de l'environnement par des rejets liés aux activités humaines représente donc un enjeu sociétal important. C'est dans ce cadre que le présent travail s'inscrit.

Les milieux poreux constitués d'une matrice solide autour de laquelle des fluides peuvent se mouvoir. Cette hétérogénéité, la présence de la matrice solide qui impose aux écoulements des conditions aux limites très complexes, font que le champ des vitesses d'un fluide à petite échelle peut être représenté à l'aide d'une moyenne, et de fluctuations. La moyenne peut être rattachée à la vitesse de Darcy grâce à divers procédés d'homogénéisation [3]. Les fluctuations imposent d'autre part des mouvements aux particules de fluide et de soluté. La dispersion résume l'effet de ces fluctuations et de la diffusion moléculaire, sur le mouvement d'un traceur : c'est le sujet de ce travail.

On modélise en général la dispersion à l'aide de la loi de Fick et de l'équation d'advection dispersion (ADE), en conformité avec les résultats de l'homogénéisation. Ceci équivaut à représenter les mouvements à petite échelle à l'aide du mouvement Brownien. Or, dans certains milieux poreux très hétérogènes ou non saturés, des résultats expérimentaux suggèrent d'utiliser d'autres modèles. En de nombreuses circonstances, le Modèle Mobile/Immobile (MIM)[24][109] est en meilleur accord avec les expériences [41]. Il est fondé sur l'idée que fluide et traceur se répartissent tous deux en deux phases, mobile et immobile : le flux de traceurs est donné par loi de Fick appliquée à la phase mobile, et les deux phases échangent de la matière selon une cinétique d'ordre 1. A l'échelle microscopique, ce modèle correspond à un mouvement Brownien soumis à un changement de temps aléatoire [11], et ce processus est approché par des marches au hasard accumulant des étapes mobiles et immobiles de durées aléatoires, mais possédant une moyenne finie. A l'échelle macroscopique, la densité de traceur immobile s'obtient en appliquant une convolution (de noyau exponentiel) à la densité

mobile. On a ainsi un opérateur non-local, dont le noyau (ou fonction mémoire) représente l'effet du passé sur le présent. Dans de nombreux milieux naturels où l'existence d'une phase immobile est plausible voire évidente, ce modèle ne suffit cependant pas pour décrire la dispersion. Ce point est bien mis en évidence lorsque les expériences produisent des courbes de percée dont la traînée reste significativement importante aux grands temps. En effet, les solutions du MIM peuvent avoir des traînées très épaisses, cependant elles finissent par décroître exponentiellement. Or, certaines expériences suggèrent plutôt des lois de puissance, en meilleur accord avec le plus récent [100] fractal Mobile/Immobile Model (fMIM). Ce dernier est fondé sur la même idée que le MIM, sauf que la densité de traceur immobile s'obtient (dans le cas de fMIM) en appliquant à la densité mobile une convolution dont le noyau est une puissance et non pas une exponentielle. A l'échelle microscopique, le fMIM correspond encore à un mouvement Brownien subordonné, lui-même approché par des marches au hasard. Cette fois-ci elles incorporent des immobilités dont la durée est distribuée par une loi (de probabilité) stable de Lévy. L'équation d'advection dispersion (ADE), fondée sur le mouvement Brownien, le MIM et le fMIM, sont trois modèles qui méritent d'être envisagés lorsqu'on cherche à représenter quantitativement la dispersion dans un milieu poreux. On a besoin pour cela d'outils adaptés de simulation numérique et de méthodes permettant de déterminer les paramètres sur la base de données expérimentales. Nous précisons ces points dans le cadre du fMIM.

Motivation et objectifs de la thèse

Il est souhaitable de pouvoir appliquer le modèle fMIM, parmi d'autres modèles, à des données de traçage recueillies dans des milieux poreux divers. On pense tout d'abord aux milieux non saturés et aux sols. Il s'agit cependant d'un modèle récent, pour lequel on a besoin d'outils de simulation que l'on a bien en main, et dont on peut vérifier la précision. Nous concentrons donc nos efforts sur ce modèle. Les marches au hasard et la discrétisation des équations aux dérivées partielles (edp) fractionnaires en temps fournissent de tels outils de simulation, présents au laboratoire EMMAH. Ils ont été conçus pour résoudre le fMIM lorsque ses paramètres sont constants ou au contraire dépendent de la variable d'espace. Notre premier objectif est de montrer comment les utiliser, comment les comparer entre eux ou avec des solutions exactes, pour être certain de la qualité du résultat. Le modèle fMIM est une e.d.p avec quatre paramètres indépendants. Face à des données expérimentales correspondant à

un problème pour lequel le fMIM pourrait convenir, on a besoin de déterminer les paramètres de ce dernier qui correspondent le mieux. Ceci est indispensable pour comparer avec d'autres modèles. Par conséquent, un second objectif est de proposer à une méthode d'inversion permettant d'estimer ces paramètres à partir de données expérimentales.

Plan du mémoire :

Le mémoire se compose de cinq parties qui s'articulent de la façon suivante :

- Le premier chapitre présente succinctement la dynamique de déplacements dispersifs en milieu poreux homogène, ainsi que les équations générales qui la gouvernent. Ce chapitre contient l'étude bibliographique non exhaustive permettant l'analyse du cadre théorique et expérimental des différents processus de transport.

- Le deuxième chapitre aborde de façon synthétique les éléments de la théorie des probabilités appliqués au problème que nous allons aborder. Ce chapitre expose aussi de façon plus détaillée comment ces outils sont appliqués aux problèmes de transport. La théorie de l'intégration et de la dérivation fractionnaire appliquée aux phénomènes de transport anormal et le lien avec le point de vue probabiliste sont également rappelés.

- Au chapitre trois, sont abordées la présentation et la formulation mathématique du problème physique en question en s'appuyant sur les outils théoriques du chapitre précédent. On rappelle quelques modèles fractionnaires mis en oeuvre dans le cas du transport anormal. La modélisation à l'aide des marcheurs aléatoires est aussi décrite. Les méthodes analytiques ainsi que les méthodes numériques pour la résolution des équations aux dérivées partielles d'ordre non entier sont discutées. Les solutions de ces équations différentielles fractionnaires sont comparées aux densités obtenues par marche aléatoire.

- Dans le quatrième chapitre, nous abordons l'inversion du modèle de dispersion étudié, le MIM fractionnaire, avec pour objectif de mettre en place une méthode pour extraire ses paramètres. La formulation mathématique basée sur la méthode des moments est présentée. Des tests sur l'efficacité de la méthode sont effectués et discutés.

- Le cinquième chapitre concerne la conclusion et les perspectives.

Chapitre 1

Le phénomène de diffusion dans un milieu poreux

1.1 Introduction

Dans de nombreuses circonstances, le déplacement d'un soluté dans un milieu poreux homogène ou hétérogène saturé suit une évolution en temps et en espace régie par un processus de diffusion. Le processus de diffusion qui représente le transport de solutés dans un tel milieu repose donc, à l'échelle des particules de soluté, sur le mouvement Brownien. A l'échelle macroscopique ce processus se traduit par une équation de convection-dispersion souvent désignée par l'acronyme anglais ADE.

Il y a une correspondance bien établie entre les aspects macroscopiques et microscopiques du processus de diffusion. Les modèles de type advection-dispersion sont basés sur la représentation de deux phénomènes supposés responsables de transport en milieu poreux homogène et saturé. Le premier concerne le flux advectif qui entraîne les éléments du soluté par un écoulement plus ou moins simple. Il correspond à une moyenne effectuée sur l'ensemble des particules dispersées. Ceci revient à accepter l'idée qu'une mesure de vitesse de cet écoulement change lorsqu'on recommence la mesure, même en régime stationnaire.

Le second est le flux dispersif qui représente la propagation des éléments du soluté au sein même de l'écoulement. Le processus dispersif vient de la diffusion moléculaire et de la variabilité de l'écoulement convectif : il prend en compte les fluctuations locales de la vitesse de l'écoulement.

L'ensemble de ces deux processus (convection et dispersion) est en général caractérisé par une propriété intrinsèque au milieu poreux dans lequel s'effectue le transport. Cette propriété traduit un lien direct entre l'évolution en temps de la diffusion et son étalement dans l'espace sous la forme d'une constante

qui représente le rapport entre la variance des moments des déplacements dûs aux fluctuations de la vitesse de l'écoulement, et le temps pendant lequel on mesure. C'est un coefficient de diffusion ou de dispersion. La constance de ce coefficient de dispersion est intimement liée aux lois classiques du transport en milieu homogène telles les lois de Fick. Cette propriété d'invariance du couple temps et espace est la marque de la diffusion normale. On peut souvent mesurer ou plutôt estimer la valeur de ce rapport. Si le mouvement Brownien représente la dispersion dans un milieu, il est constant.

Pour un milieu hétérogène, cette caractéristique de dispersion peut varier et dépendre de l'échelle, ce qui nous fait sortir du cadre de l'hypothèse des modèles de type convection-dispersion. La prise en compte de cette variabilité du coefficient de dispersion oblige à reconsidérer l'hypothèse d'homogénéité dans un sens plus large. C'est l'idée à la base de la théorie d'homogénéisation qui cherche à substituer l'hétérogénéité par des propriétés d'ensemble, à des échelles bien choisies. D'un autre point de vue, il s'agit de considérer un milieu homogène équivalent (milieu effectif) et d'en étudier la réponse au niveau macroscopique sans se soucier de détails aux échelles inférieures à celle qu'on considère. Soutenue par des théories mathématiques bien établies, cette approche a ouvert la voie à d'importants progrès qui ont permis d'aborder la complexité des phénomènes de transport en milieu hétérogène. La pertinence de cette approche repose sur la possibilité de considérer que les propriétés de dispersion varient suivant au moins deux échelles caractéristiques bien distinctes du milieu, dont le rapport permet d'établir un "petit paramètre" de développement. Cette condition peut ne pas être réalisée dans un milieu naturel tel que le sol ou les aquifères hétérogènes dont les propriétés physiques possèdent des variabilités complexes voire aléatoires ou partiellement inconnues. Des tentatives pour généraliser la théorie de l'homogénéisation à des contextes aléatoires ont été effectuées par quelques auteurs [15][111].

Même si on pouvait disposer d'une description complète du milieu, celle-ci serait si compliquée et ferait intervenir tellement d'échelles différentes qu'il serait impossible de résoudre le problème complet de manière analytique ou numérique. La représentation des mouvements de soluté à l'aide d'un processus aléatoire peut simplifier énormément l'analyse en vertu des théorèmes limites. L'application de théorèmes limites permet de passer d'une description probabiliste à l'échelle microscopique à une description aussi probabiliste à l'échelle macroscopique. C'est l'approche que nous avons développée. Elle consiste à adopter une modélisation qui intègre les caractères aléatoires du milieu. Cette modé-

lisation est basée sur l'utilisation des marches au hasard qui représentent le transport à l'échelle microscopique. Avant de présenter en détail nos travaux dans les chapitres suivants, nous avons trouvé utile d'aborder ce mémoire de thèse par une description générale du phénomène de transport par diffusion dans les milieux poreux. L'objectif de ce chapitre est d'une part de donner un aperçu sur les principes et les bases du transport par diffusion dans un cadre normal (classique), mais aussi de donner une synthèse bibliographique des observations expérimentales qui soutiennent l'importance de la diffusion anormale. Rappelons ici que notre objectif n'est pas de faire une synthèse supplémentaire de la large bibliographie déjà existante sur ce sujet. Nous nous proposons simplement de présenter des résultats qui ont retenu notre attention. Ces observations de diffusion anormale constituent en effet une des motivations du sujet que nous abordons dans cette thèse.

1.2 Modèle classique de transport par diffusion

Historiquement, l'estimation quantitative de la diffusion remonte aux travaux de Fick (1855). La loi de Fick prédit que dans un milieu immobile, le flux d'un soluté à travers une surface unitaire est proportionnel au gradient de la concentration. Sous sa forme unidimensionnelle, celle-ci s'écrit :

$$\text{Flux} = -D\partial_x C(x, t) \quad (1.1)$$

où le coefficient de proportionnalité D représente le coefficient de diffusion du milieu physique considéré. La fonction $C(x, t)$ représente la concentration du soluté au point x à l'instant t .

Combinée avec la loi de conservation de la masse, la loi de Fick donne lieu à l'équation de la diffusion appelée aussi l'équation de la chaleur :

$$\partial_t C(x, t) = D\nabla^2 C(x, t) \quad (1.2)$$

Pour un fluide en mouvement, il faut rajouter à cette diffusion des particules du soluté, une dispersion due aux variations de vitesse du fluide transportant les particules. Cette opération conduit au modèle d'advection-dispersion (ADE) :

$$\partial_t C(x, t) + \nabla \cdot \langle v \rangle C(x, t) = D\nabla^2 C(x, t) \quad (1.3)$$

où $\langle v \rangle$ est la vitesse moyenne du fluide. A cette formulation macroscopique de la diffusion correspond une description probabiliste à l'échelle des particules du soluté basée sur le modèle de déplacement d'un nuage de particules sous la forme

d'un mouvement Brownien. Cette correspondance fut établie pour la première fois dans les travaux d'A. Einstein en 1905. Dans cette représentation duale de la diffusion, $C(x, t)$ représente aussi bien la concentration des particules que leur probabilité de présence $P(x, t) = \theta C(x, t)$ où θ représente la teneur en solvant du milieu. Le point clé de cette construction qui permet de passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique repose sur l'application d'outils mathématiques tels que le théorème central limite. En effet, l'importance accordée au modèle de diffusion et la question de son application à des milieux à grande échelle repose sur ce théorème qui implique que la somme de variables aléatoires (qui représentent des variations à petite échelle) indépendantes mais distribuées par une même loi de probabilité possédant une variance finie, converge vers une distribution gaussienne, qui constitue une solution standard de l'équation de la diffusion (1.3). En d'autres termes, la loi normale est un attracteur pour les lois de probabilité possédant une variance finie. Une illustration de l'accord entre un histogramme de déplacements obtenu à partir d'un nuage de particules effectuant un mouvement Brownien et la solution gaussienne (1.2) est donnée sur la figure 1.1.

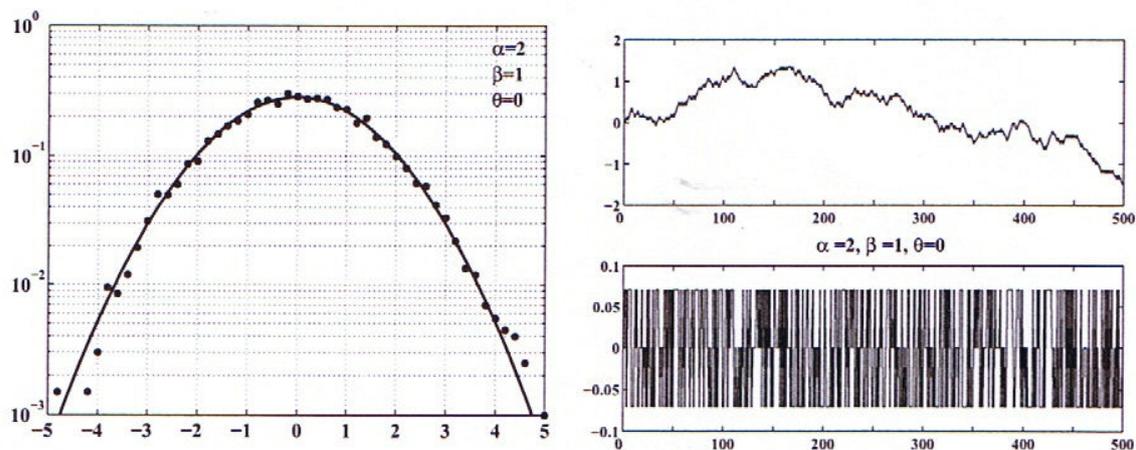


FIGURE 1.1 – Comparaison entre un histogramme d'un mouvement Brownien simulé et la solution de l'équation de diffusion (1.2) d'après Gorenflo et Minardi (2002). A gauche on a un diagramme semi logarithmique représentant en abscisses les positions d'un ensemble de marcheurs aléatoires, et en ordonnées leur densité. Les points représentent cette densité par l'intermédiaire d'un histogramme, les traits pleins correspondent à la solution de l'équation de la diffusion. Le paramètre $\alpha = 2$ définit dans un ensemble plus vaste la loi de probabilité gaussienne des sauts du mouvement Brownien. La partie de droite montre des échantillons de sauts (en bas) et la trajectoire d'une particule (haut).

Ce résultat illustre le lien entre la diffusion normale et la loi de probabilité gaussienne. En effet, un des critères permettant de confirmer la validité du

modèle d'advection dispersion, (ADE), consiste à tester si les grandeurs observées (concentration, histogramme) sont gaussiennes. Il est devenu ainsi habituel d'attribuer le caractère "non-gaussien" comme le critère principal qui décrit la diffusion anormale.

1.3 Observation du transport anormal

Avant d'aller plus loin, rappelons brièvement ce que nous entendons par le qualificatif "non gaussien". De nombreux résultats publiés montrent que dans un milieu saturé homogène, les courbes de concentration d'un contaminant non réactif sont généralement symétriques et s'apparentent facilement à des lois gaussiennes. Les profils spatiaux représentés sur la partie gauche de la figure 1.2 illustrent ceci. Souvent, il faut attendre un peu pour observer de tels profils, et les observations effectuées aux temps courts montrent des dissymétries entre la partie montante et la partie descendante des profils. Lorsque le milieu est hétérogène en structure (agencement de différents types de grains) ou bien lorsque le milieu devient insaturé (présence de phase "air" en plus de la phase liquide), la courbe de concentration peut présenter selon l'échelle étudiée une traînée qui détruit sa symétrie, de manière persistante lorsque le temps d'observation augmente. A cause de cette asymétrie, on parle de transport "non-gaussien" ou également de "non Fickien". Une représentation schématique des caractéristiques de diffusion anormale est illustrée par la partie droite de la figure ci-dessous, due à Berkowitz et al [13]

Différentes expériences rapportent des observations de longues traînées de restitution des traceurs aux temps longs (comportement asymptotique). D'un point de vue plus théorique, ce caractère asymétrique des lois de probabilité (ou des concentrations), au-delà du fait de traduire un écart avec la loi normale, montre aussi que l'on peut être en présence d'une dynamique marquée par des effets de grands déplacements ou de stagnation des particules. Expérimentalement, on parle dans ce cas de temps de percée courts ou d'effets de traînée. On attribue formellement à ces régimes de transport respectivement les termes de super-diffusion ou sous-diffusion. Dans ce paragraphe, nous allons donner une brève synthèse des résultats d'observations expérimentales de la diffusion anormale. Plusieurs observations du transport anormal ont été rapportées dans la littérature. Elles suggèrent que les processus à la base des observations ne peuvent pas être décrits convenablement avec le modèle d'advection-dispersion. On peut distinguer ces observations selon l'échelle considérée en deux catégories

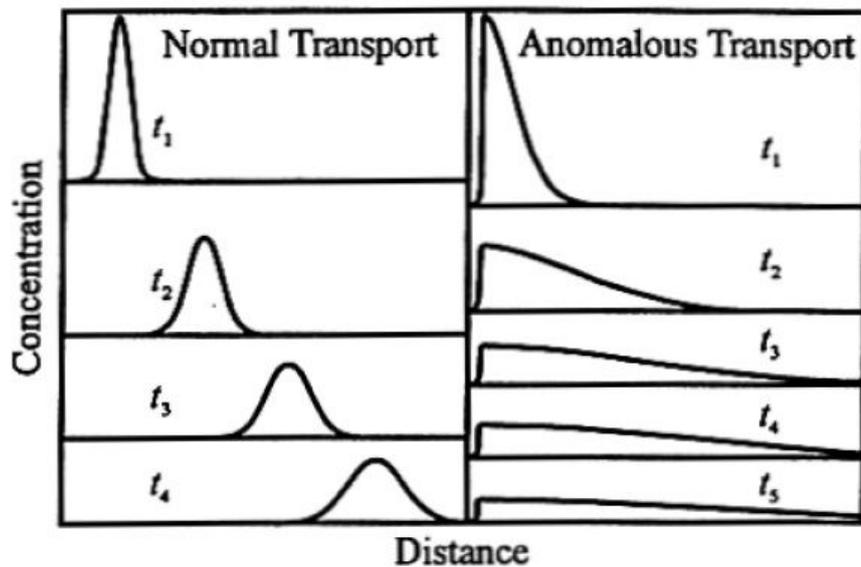


FIGURE 1.2 – Illustration schématique de l'effet de la dispersion anormale sur l'allure de courbes de percée, d'après Berkowitz et al. (2000)

suivant qu'elles sont réalisées en laboratoire ou en conditions in-situ. Un autre critère de distinction consiste à regarder le degré d'homogénéité et de saturation en fluide du milieu. En adoptant ces critères, il apparaît que l'existence d'un régime de transport anormal peut s'observer aussi bien à l'échelle d'une colonne de laboratoire qu'à l'échelle d'une parcelle en milieu naturel et ceci pour différents types de milieux (aussi bien en milieux poreux comme l'argile ou le sable [12][17] que pour les milieux fracturés comme les roches [25]). Des expériences [18] indiquent aussi que dans un milieu homogène (colonne remplie de sable) et saturé en eau, la concentration en traceur passif (ici du bromure) peut ne pas présenter le caractère gaussien. Ces expériences, qui correspondent en fait à un écoulement assez complexe, ont été interprétées par Benson et al [9] en suggérant que les courbes issues des observations sont liées à des lois α -stables. Lévy et Berkowitz [60] ont proposé trois séries d'expériences en colonne permettant de voir l'effet de l'hétérogénéité du milieu sur le régime transport. Pour cela, ils ont considéré un milieu homogène, un milieu hétérogène à distribution uniforme et un milieu hétérogène aléatoire. Ces expériences ont montré que pour un milieu hétérogène, l'écart à la loi gaussienne est observé après un temps long et à forte vitesse d'advection. Les résultats en milieu hétérogène suivent la même tendance avec des écarts plus marqués.

Des résultats incompatibles avec les équations (1.2) ou (1.3) ont aussi été ob-

tenus dans des conditions in-situ. Sur le site de Cape Cod [40], qui est un aquifère alluvial de faible hétérogénéité, les résultats de Benson et al [10] montrent que la concentration de contaminants dans le panache pour des temps suffisamment longs s'écarte de la loi gaussienne et paraît mieux représentée par des lois α -stables. Des expériences similaires ont été menées pour des milieux naturels fortement hétérogènes. L'expérience MADE (Macrodispersion Experiment) sur le site de Columbus (Mississippi) a été mise en oeuvre pour tester l'applicabilité du modèle de macrodispersion (une variante de l'advection-dispersion) pour un aquifère alluvial fortement hétérogène [1]. Un des principaux résultats issus de cette campagne est rapporté par [6] sur la figure 1.3 ci-dessous. Les courbes de restitution des traceurs injectés dans le milieu montrent une nette asymétrie qui n'est pas accessible par les modèles de type ADE. D'autres résultats issus

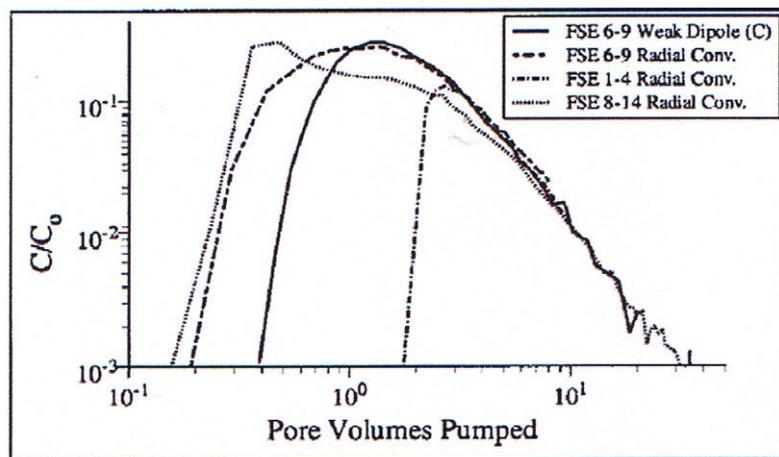


FIGURE 1.3 – Figure : Courbes de restitution de plusieurs essais de traçage au bromide sur le site de Mirror Lake en domaine cristallin fracturé. D'après Becker et Shapiro (2003).

du même site ont été auparavant rapportés dans [102]. Ces résultats montrent que les panaches de soluté obtenus dans des expériences sur ce site présentent des pics et des formes asymétriques caractéristiques d'un comportement non-gaussien. Les processus principaux contrôlant le profil de concentration dans ces expériences restent peu expliqués. Parmi les tentatives d'explication, Harvey et Gorelick [51] et Zheng et al [112] mettent en avant l'influence des chemins préférentiels et des zones de stagnation. Plus tard, Benson et al [8] ont montré que les résultats de l'expérience MADE pouvaient être représentés par des lois α -stables dont nous donnerons dans le chapitre suivant la définition et le rôle dans la dispersion anormale.

D'autres expériences présentent des résultats comparables [28][30][53][89][113].

Nous notons les observations [23][93] qui décrivent le transport de radio-éléments fortement plus rapides que ce qu'on pourrait espérer par la loi de Fick. Une bibliographie sur différentes expériences sur le transport anormal peut être trouvée dans l'article de revue [75].

La figure 1.4 présente les résultats obtenus par Raven et al. [96] sur un milieu poreux fracturé. Ce résultat indique qu'il est impossible d'ajuster le modèle ADE aux données expérimentales, que ce soit en amplitude ou au niveau de la traînée. Ces auteurs introduisent dans leur modèle un terme de stockage transitoire qui rend compte de la présence de zones d'eau stagnante dans les fissures.

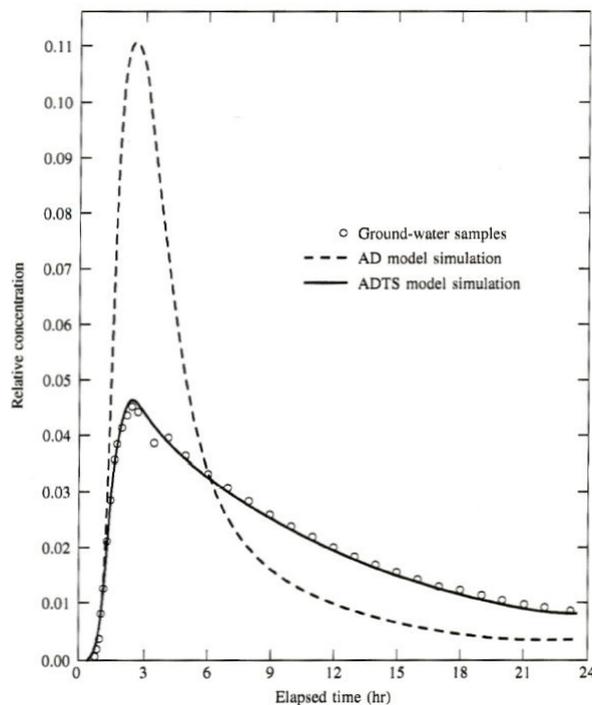


FIGURE 1.4 – Comparaison de données expérimentales sur une fracture simple avec le modèle ADE et un modèle incluant un terme de stockage transitoire, d'après Raven et al. (1988).

Pour finir cette brève synthèse bibliographique, nous rappelons les résultats de Bromly et Hinz [17] obtenus à partir de données expérimentales réalisées sur trois colonnes de longueurs respectives 10, 20 et 40 cm. Les colonnes avaient été remplies de sable recompacté dans des conditions contrôlées de façon à avoir un milieu poreux artificiel homogène. Dans ces colonnes un écoulement insaturé avait été établi. Les courbes de percée obtenues à la sortie des colonnes présentent des ailes épaisses caractéristiques du transport non-gaussien représentées sur la figure 1.5 ci-dessous. Elles montrent que même dans un milieu homogène, la dynamique du transport dans un milieu poreux insaturé peut ne

pas être représentée par le modèle ADE. Bien que ces résultats ne concernent que des expériences en laboratoire, en remarquant que le régime insaturé est la situation la plus fréquente dans les milieux poreux naturels, on peut mesurer ici la portée des résultats de Bromly et Hinz. Nous n'oublions pas aussi de mentionner qu'il existe de nombreux résultats associés à la diffusion normale (dynamique gaussienne) pour des milieux homogènes en régime saturé.

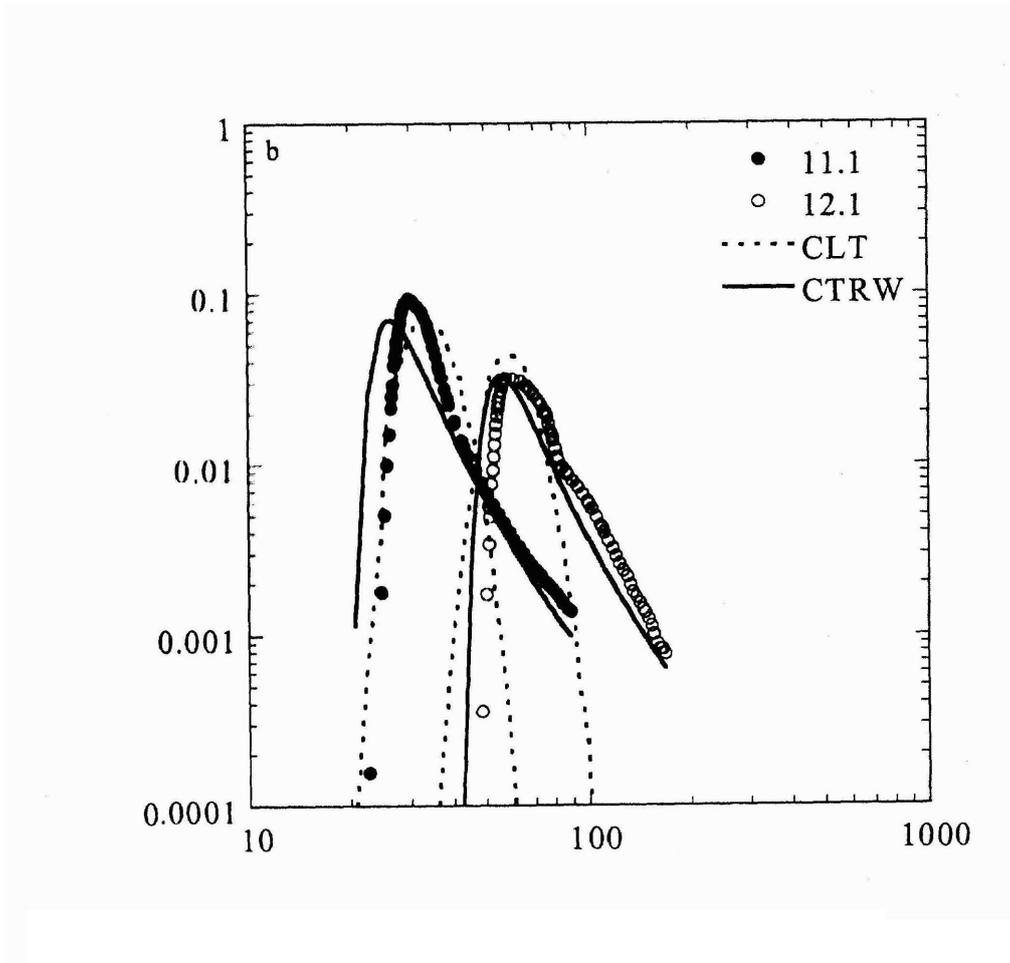


FIGURE 1.5 – Comparaison entre un modèle ADE (en pointillés) et un modèle de marche aléatoire CTRW (en trait plein) pour représenter des résultats d'expériences (cercles) en laboratoire d'après Bromly et Hinz [17]

1.4 Conclusion

Les résultats que nous avons rapportés suggèrent que le modèle d'advection-dispersion n'est pas toujours satisfaisant pour décrire la dynamique du transport dans les milieux naturels, en particulier dans des conditions hétérogènes et/ou insaturées. Ces constatations ouvrent la discussion sur la complexité de l'explication physique qu'on doit mettre en face des observations. Elles mettent aussi en évidence la nécessité de trouver des outils qui permettent d'estimer et de représenter les processus mis en jeu. Certains des travaux que nous avons présentés tentent d'apporter une contribution à cette question. En particulier, les études menées par Bromly et Hinz [17] montrent que le modèle MIM et les marches au hasard de temps continu (CTRW) modélisent mieux les observations quand celles-ci mettent en évidence des comportements non-gaussiens. Nous notons aussi les différents travaux de Benson qui associent la famille des lois α -stables de Lévy pour représenter les concentrations de traceurs. Ceux-ci montrent que la modélisation de ces observations de la diffusion anormale requiert un cadre probabiliste à petite échelle, plus général que la loi normale. D'autre part, les nombreuses observations indiquant des longues traînées de restitution de traceurs aux temps longs sont généralement interprétées comme la manifestation d'un transport non Fickien sous-diffusif [5][6][48][107]. Un tel régime de diffusion peut être associé à des effets de mémoire. Ces effets de mémoire constituent l'aspect de la diffusion anormale que nous traitons dans cette thèse. Dans le chapitre suivant, nous abordons la description des différents outils théoriques nécessaires à la description d'un modèle de diffusion anormale avec effets de mémoire.

Chapitre 2

Outils Théoriques

2.1 Introduction

Nous présentons dans ce chapitre d'une part des notions de base de la théorie des probabilités utiles à la résolution de problèmes de transport de masse. D'autre part nous présentons d'une manière synthétique et unifiée les éléments de calcul fractionnaire dont nous aurons besoin, en particulier les intégrales et dérivées d'ordre non entier nécessaires à l'utilisation du modèle fMIM. Compte tenu de la complexité des milieux poreux naturels, les phénomènes de transport de soluté qui s'y déroulent présentent en effet des caractéristiques aléatoires. Leur modélisation à petite échelle (échelle microscopique) requiert alors l'utilisation d'outils de probabilité : les déplacements des éléments de soluté peuvent être modélisés par des marches aléatoires à l'échelle microscopique.

Quand ces marches aléatoires sont non-gaussiennes, la migration des éléments de soluté peut dépendre de mécanismes différents de ceux correspondant à la diffusion normale. Les propriétés du milieu ainsi que les multiples interactions entre les processus sont difficiles à décrire. Mais leurs effets peuvent occasionner de la diffusion plus rapide (super-diffusion) ou de la diffusion plus lente (sous-diffusion) que la normale. Les régimes de diffusion rapide peuvent être représentés par des marches aléatoires incluant la possibilité d'effectuer de très grands sauts [57][83]. Tandis que la sous-diffusion se traduit par la possibilité pour les particules de soluté de pouvoir être piégées longtemps dans le milieu poreux. Ces immobilisations de particules se modélisent par des marches aléatoires incluant des temps d'attente entre deux sauts pouvant être très longs dans le cas du modèle fMIM. Ces temps d'attente sont mathématiquement représentés par des variables aléatoires distribuées par des lois stables.

La modélisation de la sous-diffusion à l'échelle des observations macroscopiques fait intervenir des opérateurs non-locaux en temps pouvant rendre compte

d'effets de retard dans le transport (on parle alors d'effets de mémoire).

Le modèle fMIM incluant des dérivées d'ordre non entier ou fractionnaire en temps est une généralisation du modèle de l'équation d'advection dispersion. Rappelons que l'équation d'advection dispersion modélise la diffusion classique dont la représentation à petite échelle est donnée par des marches aléatoires gaussiennes dont la limite hydrodynamique est le mouvement Brownien.

2.2 Notion de variable aléatoire

La notion de variable aléatoire peut être directement liée à la définition du hasard. En d'autres termes, une variable aléatoire représente le résultat d'une épreuve dont on ne connaît pas par avance le résultat, qu'on ne peut donc pas prédire de manière exacte. Une variable aléatoire est donc particulièrement indiquée pour représenter le résultat d'une mesure : en général on ne trouve pas le même résultat lorsqu'on recommence la mesure.

Une variable aléatoire est caractérisée par l'ensemble des valeurs qu'elle peut prendre et par l'expression mathématique de la probabilité d'avoir ces valeurs. Cette expression définit la loi de probabilité (ou distribution de probabilité) de l'épreuve considérée. Ainsi, à une épreuve donnée on peut associer une variable aléatoire et identifier la loi suivie par celle-ci.

Dans notre situation, les grandeurs aléatoires qu'on souhaite modéliser sont à valeurs réelles, ce sont des variables aléatoires continues. Pour une variable aléatoire X , l'expression donnant la probabilité pour que X prenne sa valeur dans un intervalle de valeurs possibles se définit de la manière suivante : Soit $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$ un espace probabilisé où Ω est l'univers et \mathcal{A} une σ -algèbre de Ω qui représente l'ensemble des évènements et \mathcal{P} une mesure de probabilité, telle que $\mathcal{P}(\Omega) = 1$. Pour tout intervalle $[a, b] \in \mathcal{A}$, on a :

$$\mathcal{P}(a < X \leq b) = \int_a^b f(x)dx \quad (2.1)$$

où $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est la densité de probabilité de X .

Pour pouvoir considérer $\mathcal{P}(a < X \leq b)$ pour $a < b \in \mathbb{R}$, il faut que $\forall a < b \in \mathbb{R}$ l'intervalle $]a, b[$ appartienne à l'ensemble \mathcal{A} des ensembles mesurables. La fonction densité de probabilité $f(x)$ doit être positive. Elle doit de plus admettre une primitive et vérifier

$$\int_{\mathbb{R}} f(x)dx = 1 \quad \text{pour que } \mathcal{P}(\Omega) = 1 \quad (2.2)$$

D'un point de vue infinitésimal, on a

$$\mathcal{P}(X \in [x, x + dx]) = f(x)dx. \quad (2.3)$$

La variable aléatoire peut aussi être caractérisée par la fonction de répartition définie par

$$F(x) = \mathcal{P}(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(t)dt \quad (2.4)$$

$F(x)$ est une fonction monotone continue à gauche. C'est en fait une primitive de la densité de probabilité f et elle constitue dans certains cas un meilleur moyen que $f(x)$ pour estimer la loi d'une variable aléatoire. La figure 2.1 représente une illustration de la relation entre la fonction de répartition $F(x)$ et la densité de probabilité correspondante. Un autre intérêt pratique de la fonction de répartition est qu'elle permet de calculer la probabilité de tout intervalle dans \mathbb{R} :

$$\mathcal{P}(X \in [a, b]) = F(b) - F(a). \quad (2.5)$$

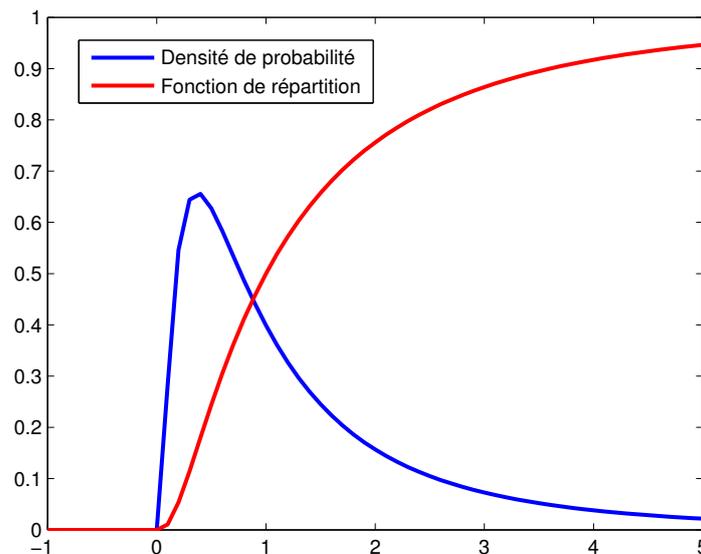


FIGURE 2.1 – Exemple de densité de probabilité (ici une loi lognormale) et de fonction de répartition d'une variable aléatoire continue

Une autre grandeur qui décrit la loi de distribution d'une variable aléatoire est la fonction caractéristique. Elle permet de déterminer, de façon unique, la loi de probabilité de X . Si X a pour densité f , la fonction caractéristique est la transformée de Fourier de la densité de probabilité. Les valeurs en zéro des dérivées successives de la fonction caractéristique permettent de calculer les moments de la variable aléatoire. La fonction s'écrit donc comme :

$$\varphi_X(x) = \int_{\mathbb{R}} e^{ixt} f(t) dt. \quad (2.6)$$

La fonction caractéristique est parfois le meilleur moyen de caractériser une variable aléatoire lorsque celle-ci ne possède pas de forme explicite pour sa densité de probabilité. Nous verrons que c'est le cas des variables aléatoires suivant les lois stables de Lévy.

2.2.1 Moments d'une variable aléatoire

Une variable aléatoire $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ de densité f est dite :

(i) - intégrable si $\int_{\mathbb{R}} |x| f(x) dx < +\infty$.

Ceci est le moment d'ordre 1, soit la moyenne pondérée :

$$\mathbb{E}(X) = \mu = \int_{\mathbb{R}} x f(x) dx;$$

(ii) - de carré intégrable si $\mathbb{E}(X^2) = \int_{\mathbb{R}} x^2 f(x) dx < +\infty$.

La variance est le moment d'ordre 2 dont la racine carrée est l'écart-type, c'est la mesure de dispersion de X autour de son espérance :

$$Var(X) = \sigma^2 = \mathbb{E}(X^2) - (\mathbb{E}(X))^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \mu)^2 f(x) dx$$

Pour définir des moments d'ordre supérieur, il existe une relation entre les moments et la fonction caractéristique d'une variable aléatoire. Lorsque les moments de la variable aléatoire X existent alors :

$$\phi_X(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{i^k w_k}{k!} t^k \quad (2.7)$$

où w_k est le moment d'ordre k de la variable X . Il est facile de voir par exemple que

$$1 = \phi_X(0); \quad \mathbb{E}(X) = -i\phi'_X(0); \quad \mathbb{E}(X^2) = \phi''_X(0).$$

2.2.2 Loi de probabilité gaussienne

La loi normale appelée aussi loi gaussienne, est une des principales distributions de probabilité qu'on évoque fréquemment pour interpréter les observations. Elle se présente comme une limite de nombreuses distributions. Elle est décrite par une courbe en "cloche" symétrique autour de la valeur moyenne (qu'on notera μ). On sait, par exemple, qu'une loi de probabilité binômiale de

paramètre n tend vers la loi normale quand ce paramètre n devient très grand. Plus généralement, on remarque souvent que lors d'observations expérimentales, la moyenne calculée sur un échantillon tend à suivre une loi normale quand la taille de l'échantillon augmente, même si l'échantillon initial a une toute autre distribution de probabilité. Ces simples constatations montrent l'importance de la loi normale et traduisent le fait qu'elle attire d'autres lois de probabilité. Cette importance de la loi normale qui se présente comme un attracteur s'énonce par la propriété plus générale du théorème de la limite centrale vu à la fois comme modèle pour décrire des situations pratiques mais aussi comme un outil théorique dont on en parlera dans le paragraphe qui suit après avoir défini ce qu'est une loi de probabilité "attracteur".

On dit que la variable aléatoire X suit une loi gaussienne (ou normale) de paramètre $\mu \in \mathbb{R}$ et $\sigma^2 > 0$ et on note $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ si X possède la densité de probabilité

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\sigma^2\pi)}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (2.8)$$

Lorsque les deux paramètres $\mu = 0$ et $\sigma^2 = 1$ on dit que la variable aléatoire qui suit une loi normale est centrée réduite. Les figures 2.2 et 2.3 représentent des lois de distribution de probabilité normales.

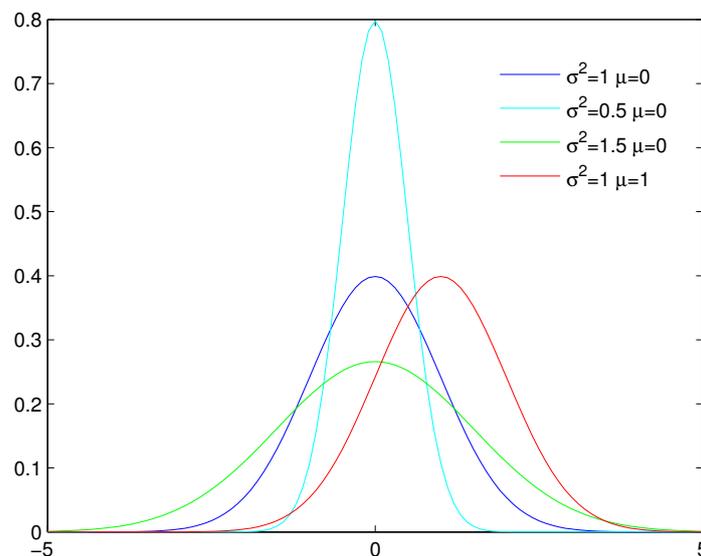


FIGURE 2.2 – Exemples de densités de probabilité de variables aléatoires suivant la loi normale

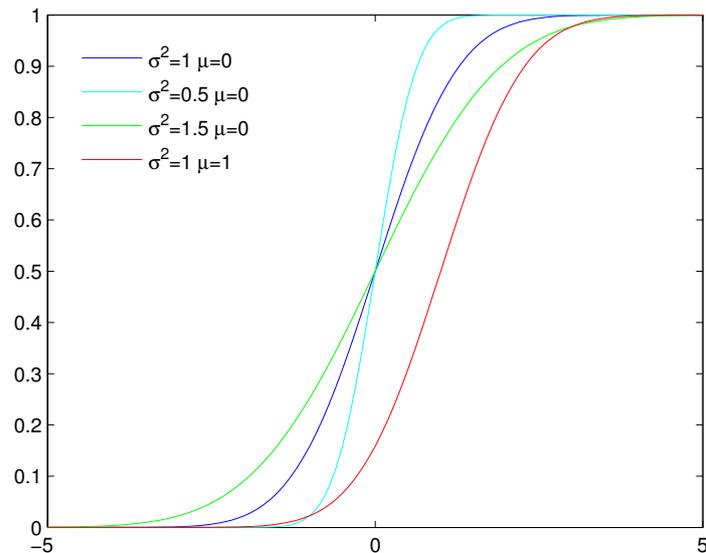


FIGURE 2.3 – Exemple de fonction de répartition de variable aléatoire de loi normale

Le terme d'attracteur est utilisé dans plusieurs domaines de la science, avec des sens qui peuvent être différents. Rappelons ce que signifie ce mot en termes de probabilités.

Notion d'attracteur

Définition : (d'après Feller [36]) Soit F la fonction de répartition d'une suite de variables aléatoires indépendantes X_n . On dit qu'une loi de probabilité de fonction de répartition G est un attracteur pour la loi de fonction de répartition F ou encore que F est dans le domaine d'attraction de G , s'il existe une suite de nombres (A_n) et (B_n) avec $B_n \geq 0$ telle que la fonction de répartition de

$$\frac{X_1 + \dots + X_n}{B_n} - A_n \quad \text{tend vers } G \text{ lorsque } n \rightarrow \infty.$$

Domaine d'attraction d'une loi de probabilité

Nous admettons le résultat suivant : seules les lois stables (que nous aborderons après avoir parlé de la loi normale), ont un domaine d'attraction non vide, comme l'indique le théorème suivant : *"Une loi de probabilité G possède un domaine d'attraction non vide si et seulement si elle est stable. Il existe un grand nombre de lois stables mais qui se distinguent par leur comportement asymptotique."* (Gnedenko et Kolmogorov [42]). Ceci permet de préciser le terme d'attracteur utilisé pour la loi normale.

2.2.3 Version simplifiée du théorème de la limite centrale

Le théorème de la limite centrale nous dit à quoi on peut s'attendre en matière d'une somme de variables aléatoires indépendantes (de même loi) et identiquement distribuées lorsqu'on la centre, en lui soustrayant sa moyenne, et qu'on la réduit, en la divisant par son écart-type. Sous des conditions assez larges, la loi de probabilité (de la moyenne) tend vers une loi normale centrée réduite, ce qu'on peut écrire :

Soit $(X_n)_{n>1}$ une suite de variables aléatoires réelles indépendantes et identiquement distribuées telles que $\mu = \mathbb{E}(X_1) < +\infty$ et $\sigma^2 = \sqrt{\text{Var}(X_1)} > 0$. On note $\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j$ la moyenne empirique. Alors pour $n \rightarrow +\infty$,

$$\frac{\sqrt{n}}{\sigma}(\bar{X}_n - \mathbb{E}(X_1)) \rightarrow Y \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

On peut écrire encore

$$Y_1 + \dots + Y_n \approx n\mu + \sigma\sqrt{n}\mathcal{N}(0, 1) \quad (2.9)$$

Comme bon nombre de phénomènes naturels sont dûs à la superposition de causes nombreuses plus ou moins indépendantes, il est tout à fait légitime de s'attendre à ce qu'ils soient distribués selon des lois possédant la propriété d'attractivité. Or, une vaste classe de lois plus générales que la loi normale joue le même rôle lorsque les X_n n'ont pas de variance finie. Pour ces lois, il faut réduire la somme des variables aléatoires dans (2.9) par un coefficient différent de $n^{\frac{1}{2}}$. Ces lois forment la famille des lois α -stables. Elles ont été introduites par Lévy [61].

Après avoir parlé de la simulation d'une variable aléatoire de loi gaussienne sur ordinateur, on abordera la notion de loi α -stable et la généralisation du théorème centrale limite.

2.2.4 Simulation de la réalisation d'une variable aléatoire

Afin de réaliser des simulations numériques de marche aléatoire, il est nécessaire de pouvoir simuler numériquement les sauts et les temps d'attente associés. Il s'agit donc de simuler la réalisation de variables aléatoires dont on connaît les lois de distribution de probabilité. Une telle approche est communément appelée "méthode de Monte-Carlo". D'une manière générale, toutes les procédures de simulation d'échantillons pseudo-aléatoires sont basées sur le théorème suivant qui stipule que toutes les distributions sont liées à la loi uniforme :

Théorème de la réciproque : Pour une variable aléatoire de fonction de répartition F , on note G sa réciproque généralisée, définie par

$$G(\omega) = \inf \{x \in \mathbb{R} \mid F(x) \geq \omega\}.$$

Si U désigne une variable aléatoire réelle uniforme sur $[0,1]$, alors la variable aléatoire $X = G(U)$ a pour fonction de répartition F . Par exemple la variable aléatoire $Y = -\ln(U)/\lambda$ est distribuée selon la loi exponentielle de paramètre λ , [64].

Principes de la simulation

Pour simuler des variables aléatoires d'une loi donnée, on dispose principalement de deux moyens :

1. L'inversion de la fonction de répartition. En effet si la fonction de répartition de la loi est F et U une variable aléatoire de loi uniforme sur $[0, 1]$ alors la loi de $X = F^{-1}(U)$ a comme fonction de répartition F . F^{-1} est ici l'inverse à droite de F , c'est-à-dire que

$$F^{-1}(\alpha) = \inf\{x, F(x) \geq \alpha\}. \quad (2.10)$$

On utilise cette méthode pour la simulation de variables aléatoires à valeurs discrètes telles que, la loi exponentielle, ou la loi de Weibull.

2. Dans le cas où la fonction de répartition ne s'inverse pas bien mais où l'on connaît la densité f , on utilise la méthode de rejet. L'idée de la méthode de rejet repose sur le théorème suivant : Soit f une fonction de densité de probabilité. On suppose qu'il existe une densité de probabilité g telle que :

$$\exists K > 0, \forall x \in \mathbb{R}, \quad f(x) \leq Kg(x).$$

Soit alors Z une variable aléatoire distribuée suivant la loi de densité g et Y une variable uniforme sur $[0, Kg(Z)]$. Alors la variable aléatoire $X = \{Z|Y \leq f(Z)\}$ est distribuée selon la loi de probabilité f .

Pour effectuer des simulations probabilistes sur ordinateur, on utilise un générateur de nombres pseudo-aléatoires. Un tel générateur retourne une suite $(x_n)_n$ de nombres réels compris entre 0 et 1. Ces réels sont calculés avec un algorithme déterministe simulant une réalisation de variables aléatoires suivant la loi uniforme sur $[0, 1]$. Le bon comportement de la suite est vérifié à l'aide de tests statistiques. En supposant qu'on dispose d'un bon générateur de

nombres pseudo-aléatoires uniformément distribués, nous pouvons construire une variable aléatoire de loi donnée, avec une attention particulière pour les lois usuelles notamment, la loi exponentielle, la loi normale.

Méthode polaire pour la simulation de la loi normale centrée réduite

Proposition : Soient R de loi exponentielle de paramètre $\frac{1}{2}$ et Θ de loi uniforme sur $[0, 2\pi]$ indépendantes alors $X = \sqrt{R} \cos(\Theta)$ et $Y = \sqrt{R} \sin(\Theta)$ sont des variables indépendantes, de loi normale $\mathcal{N}(0, 1)$, de densité $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2})$.

Nous appliquons la méthode de la fonction muette : Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction bornée. Nous avons

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(f(X, Y)) &= \mathbb{E}(f(\sqrt{R} \cos \Theta, \sqrt{R} \sin \Theta)) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} f(\sqrt{\varrho} \cos \theta, \sqrt{\varrho} \sin \theta) e^{-\frac{\varrho}{2}} d\varrho d\theta. \end{aligned}$$

Le changement de variable $(x, y) = \varphi(\varrho, \theta) = (\sqrt{\varrho} \cos \theta, \sqrt{\varrho} \sin \theta)$ est une bijection C^1 ainsi que son inverse de $]0, \infty[\times]0, 2\pi[$ sur $\mathbb{R}^2 \setminus \{(x, 0) : x \geq 0\}$. Sa matrice jacobienne est

$$\frac{D(x, y)}{D(\varrho, \theta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta)/(2\sqrt{\varrho}) & -\sqrt{\varrho} \sin(\theta) \\ \sin(\theta)/(2\sqrt{\varrho}) & \sqrt{\varrho} \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

ce qui entraîne que $dx dy = \frac{1}{2} d\theta d\varrho$. Nous concluons par la formule de changement de variable que

$$\mathbb{E}(f(X, Y)) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} f(x, y) e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} dx dy$$

D'après ce qui précède si (U_1, U_2) est un couple de variables uniformes sur $[0, 1]$ indépendantes $(-2 \ln(U_1), 2\pi U_2) = (R, \Theta)$. Ce qui entraîne que

$$(\sqrt{-2 \ln(U_1)} \cos(2\pi U_2), \sqrt{-2 \ln(U_1)} \sin(2\pi U_2)) = (X, Y)$$

Nous concluons que X et Y sont deux variables gaussiennes normales centrées réduites indépendantes. La simulation d'une gaussienne non réduite $\mathcal{N}(m, \sigma)$ s'en déduit par une transformation affine.

$$Z = m + \sigma X \quad \text{ou} \quad Z = m + \sigma Y.$$

Pour simuler une variable aléatoire gaussienne, on a donc besoin de 2 variables aléatoires uniformes. Par contre on obtient 2 variables aléatoires pour prix d'une.

2.2.5 Lois α -stables de Lévy

Comme nous l'avons souligné précédemment, la loi la plus utilisée est la loi gaussienne. En fait il lui correspond un ensemble de variables aléatoires qui s'obtiennent toutes à partir de l'une d'elles en lui faisant subir des translations et des dilatations : elles dépendent de deux paramètres liés à ces transformations. Sa propriété, de stabilité, suffit à la caractériser. De plus, le théorème de la limite centrale fait que cette loi représente de nombreuses situations expérimentales. Parmi ces situations, nous avons le phénomène classique d'advection dispersion utilisé pour modéliser le transport dans le milieu poreux.

Bien que les calculs d'estimation, de prévision, soient rapides avec l'hypothèse d'une fluctuation gaussienne, on se rend compte qu'elle est trop restrictive. Souvent, c'est parce qu'il faut prendre en compte une plus grande variabilité des données. Mais il a aussi été rapporté que certains traitements de données d'observations finies utilisant une estimation empirique de la variance peuvent produire un résultat de variance parfois très grande ou surtout dépendant nettement de la taille de l'échantillon. Ce fait amène naturellement à se poser la question de savoir si la variance théorique est finie ou infinie. Or dans le cadre des distributions à variance infinie sont apparues les lois α -stables, dont le moment d'ordre 2 est infini dès que le paramètre α est strictement inférieur à 2. La loi normale est précisément une loi stable d'exposant de stabilité égal à 2. Les lois stables d'exposant de stabilité inférieur à 1 n'ont, elles, pas d'espérance finie.

2.2.5.a Définition de la loi α -stable

Une variable aléatoire réelle X est dite stable si et seulement si chaque fois qu'on prend deux variables aléatoires X_1 et X_2 indépendantes distribuées comme X , il existe des réels a et b tels que $X_1 + X_2$ soit distribuée comme $aX + b$. Lorsque ceci est vérifié, on obtient une variable aléatoire distribuée comme $a_k X + b_k$ chaque fois qu'on additionne les k variables aléatoires indépendantes de X .

Propriété : Si la variable aléatoire X est stable, pour tout k et toute famille X_1, \dots, X_k i.i.d (indépendantes et indentiquement distribuées) de même loi que X , il existe $a_k > 0$ et $b_k \in \mathbb{R}$ tels que

$$X_1 + \dots + X_k = a_k X + b_k,$$

où $X_1 + X_2, \dots, X_k$ sont des copies indépendantes de X . Lorsque $b_k = 0$, on dit que X est strictement stable. On peut montrer [36] qu'il existe alors une constante α , $0 < \alpha < 2$, telle que $a_k = k^{\frac{1}{\alpha}}$ pour $k \in \mathbb{N}^*$.

Il n'y a pas d'expression commode de la densité d'une loi stable, sauf dans quelques cas particuliers, parmi lesquels figure la loi normale. Cependant, on sait expliciter la fonction caractéristique d'une loi stable.

2.2.5.b Fonction caractéristique

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

$$\phi_X(t) = \begin{cases} \exp(i\mu t - \sigma^\alpha |t|^\alpha [1 - i\beta \operatorname{sign}(t) \tan \frac{\pi\alpha}{2} (|\sigma t|^{1-\alpha} - 1)]) & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \exp(i\mu t - \sigma |t| [1 + i\beta \frac{2}{\pi} \operatorname{sign}(t) (\ln |t| + \ln \sigma)]) & \text{si } \alpha = 1 \end{cases} \quad (2.11)$$

On note $S_\alpha(\sigma, \beta, \mu)$ la distribution associée à cette fonction caractéristique. Les paramètres α, β, σ et μ s'interprètent comme suit :

- α est l'exposant caractéristique, $0 < \alpha \leq 2$. Il décrit le comportement asymptotique de la densité et de la distribution et intervient dans la constante de renormalisation qui apparaît dans l'énoncé de la propriété décrivant la stabilité.
- Le paramètre d'asymétrie β , $\beta \in [-1, 1]$. Si $\beta = \pm 1$, on dit que la distribution est totalement asymétrique. Si $\alpha < 1$, le support de X est \mathbb{R}^+ . Si $\beta = 0$, la distribution est symétrique.
- Le paramètre d'échelle σ , $\sigma \in \mathbb{R}^+$, aussi appelé paramètre de dispersion. Lorsque $\alpha = 2$, σ représente l'écart type de X . C'est un réel positif quelconque, il intervient parce que chaque fois qu'on dilate une variable aléatoire stable on en obtient une autre.
- Le paramètre de position μ , $\mu \in \mathbb{R}$. Si $\alpha > 1$, ce paramètre est égal à l'espérance mathématique.

Avec la définition ci-dessus de $S_\alpha(\sigma, \beta, \mu)$, qu'on appelle paramétrisation standard, la fonction caractéristique présente des discontinuités pour $\alpha = 1$ et $\beta = 0$. Au lieu de la paramétrisation standard notée $S_\alpha(\sigma, \beta, \mu)$, nous suivons la paramétrisation S^0 proposée par Zolotarev [114] utilisée par Weron [110] et notée $S_\alpha^0(\sigma, \beta, \mu_0)$.

Les paramètres α, β , et σ de la paramétrisation S^0 sont les mêmes que ceux de la paramétrisation standard S , cependant μ et μ_0 sont reliés par :

$$\mu = \begin{cases} \mu_0 - \beta \tan \frac{\alpha\pi}{2} & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \mu_0 - \frac{2}{\pi} \log \sigma & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

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

2.2.5.c Densité des lois α -stables

Forme analytique de la densité de probabilité

La fonction de densité de probabilité des variables aléatoires stables existe et est en général une fonction continue, mais à quelques exceptions près, aucune forme analytique n'est connue. Toutefois Nolan [85] a obtenu des formules similaires à celles de Zolotarev [115], utilisant une représentation intégrale de la densité de probabilité et de la fonction de répartition des variables aléatoires stables. Cette représentation intégrale s'écrit :

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

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

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

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

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

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

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

et

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

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

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

et

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

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 $\alpha = 1$:

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

et

$$F(x; 1, \beta) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \exp(-e^{-\frac{\pi x}{2\beta}} V(\Theta, 1, \beta)) d\Theta & \text{pour } \beta > 0 \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan x & \text{pour } \beta = 0 \\ 1 - F(x; \alpha, -\beta) & \text{pour } \beta < 0 \end{cases}$$

Pour la démonstration du théorème voir [85].

Les quelques formes explicites : 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

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

2. la loi de Cauchy $S_1(\sigma, 0, \mu)$ de densité

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

3. La loi de Lévy $S_{0.5}^0(\sigma, 1, \mu)$ de densité

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

Les figures 2.4 et 2.5 représentent les densités de quelques lois stables. La figure 2.4 montre que leurs densités font apparaître un pic plus aigu lorsque l'exposant de stabilité diminue. En même temps, les ailes s'épaississent : la variable correspondante prend moins de valeurs intermédiaires, plus de valeurs extrêmes sans dégarnir le voisinage immédiat de 0. La figure 2.3 montre des densités de lois "extrêmement dissymétriques" obtenues avec une valeur extrême du paramètre de dissymétrie β ($\beta = 1$). Même en prenant $\beta = 1$ on obtient pour α proche de 2 des densités peu dissymétriques (voire pas dissymétriques du tout pour $\alpha = 2$). Au contraire, pour $\alpha < 1$ la dissymétrie correspond à un support égal à \mathbb{R}^+ (pour $\beta = 1$) ou \mathbb{R}^- (pour $\beta = -1$)

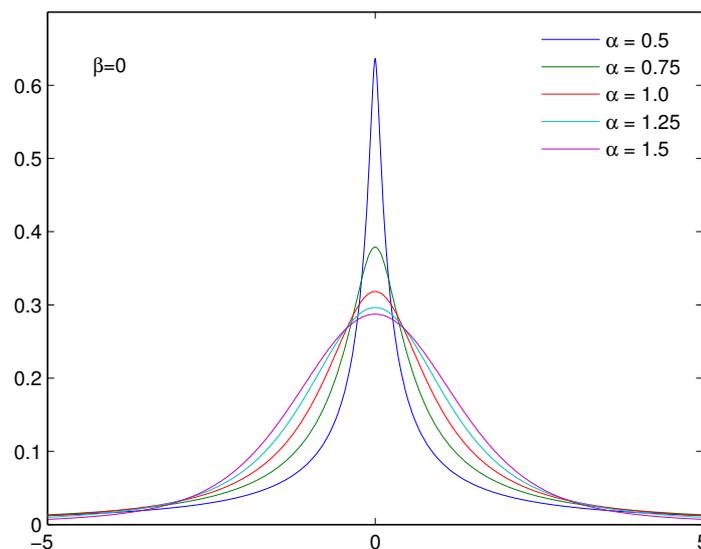


FIGURE 2.4 – Densité de probabilité de lois α -stables symétriques calculées numériquement. Toutes les densités représentées correspondent à la valeur maximale $\beta = 1$ du paramètre de dissymétrie. C'est seulement avec $\alpha < 1$ qu'on obtient des densités dont le support est \mathbb{R}^+

Comme nous l'avons mentionné plus haut, l'exposant de stabilité d'une loi stable décrit son comportement asymptotique. On parle d'"ailes épaisses" même si c'est impropre, parce que cet exposant décrit la décroissance plus ou moins lente des ailes de la densité d'une loi stable, et pas vraiment une épaisseur localisée. Il s'agit d'une propriété globale.

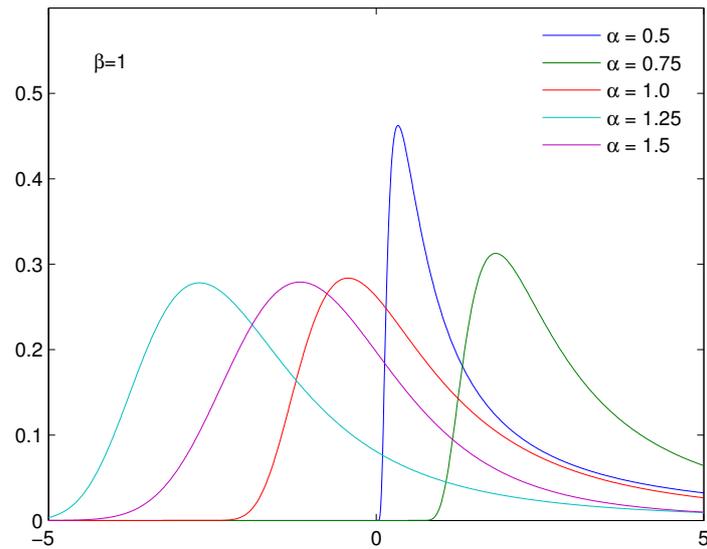


FIGURE 2.5 – Densité de probabilité de lois α -stables asymétriques calculées numériquement. Toutes les densités représentées correspondent à la valeur maximale $\beta = 1$ du paramètre de dissymétrie. C'est seulement avec $\alpha < 1$ qu'on obtient des densités dont le support est \mathbb{R}^+

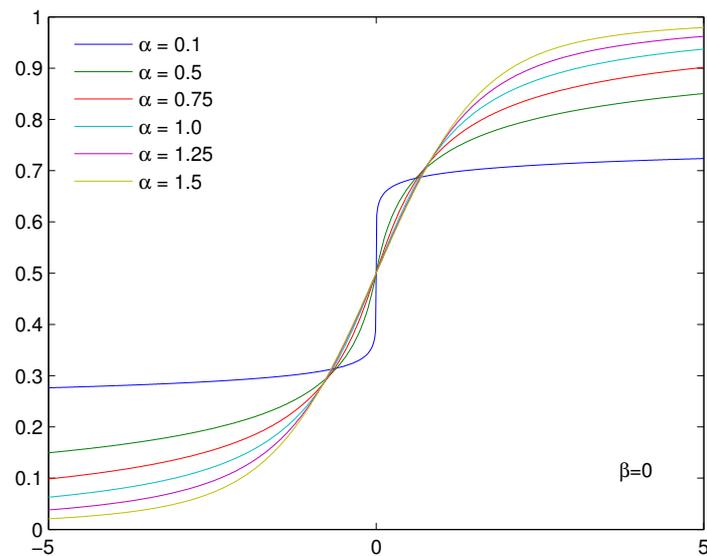


FIGURE 2.6 – Fonction de répartition de lois α -stables symétriques calculées numériquement.

Ailes épaisses : C'est la caractérisation du comportement asymptotique de la variable aléatoire réelle.

Si X est une variable aléatoire de loi $S_\alpha(\sigma, \beta, \mu)$, avec $\alpha \neq 2$ on a les deux résultats suivants

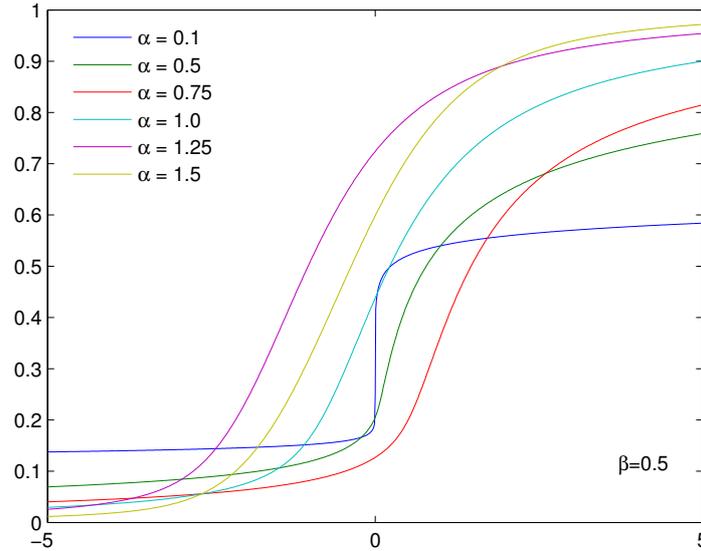


FIGURE 2.7 – Fonction de répartition de lois α -stables asymétriques calculées numériquement.

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

où $C(\alpha)$ est une grandeur qui dépend de α .

Support : Le support d'une variable aléatoire stable est en général \mathbb{R} tout entier, sauf pour $0 < \alpha \leq 1$, à condition d'avoir, en plus, $\beta = \pm 1$. Dans ce cas et dans ce cas seulement le support est \mathbb{R}^+ ou \mathbb{R}^- . Lorsque $\alpha = 1$, on obtient des variables dégénérées, ici des masses de Dirac. Ceci implique en particulier que des variables aléatoires stables d'exposant $\alpha > 1$ sont incapables de représenter des durées.

Convergence asymptotique : L'égalité précédente nous fait penser à la caractérisation des lois de Pareto. En effet, une variable aléatoire suit une loi du type Pareto si :

$$\mathcal{P}(X \geq x) = x^{-\alpha} h(x)$$

où $h(x)$ est une fonction à variation lente, c'est-à-dire pour tout $t > 0$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{h(tx)}{h(x)} = 1.$$

Mandelbrot [69] a montré que pour les lois α -stables, nous avons

$$\mathcal{P}(X \leq x) = x^{-\alpha}[f_1(\alpha) + f_2(\alpha)x^{-\alpha} + o(-2\alpha)].$$

Par passage à la limite quand x tend vers $+\infty$, on s'aperçoit que les lois stables sont asymptotiquement parétiennes.

Lévy avait montré que quand $\alpha < 2$ les distributions α -stables convergent vers une loi de Paréto lorsque $x \rightarrow \infty$, suivant, pour $X > 0$,

$$\begin{cases} \mathcal{P}(X > x) = 1 - F(x) \rightarrow C_\alpha \frac{1+\beta}{2} \sigma^\alpha x^{-\alpha} \\ \mathcal{P}(X > -x) = F(-x) \rightarrow C_\alpha \frac{1-\beta}{2} \sigma^\alpha x^{-\alpha} \end{cases}$$

avec

$$C_\alpha = \left(\int_0^\infty x^{-\alpha} \sin x dx \right)^{-1} = \frac{2}{\pi} \Gamma(\alpha) \sin\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right) = \begin{cases} \frac{1-\alpha}{\Gamma(2-\alpha)\cos(\frac{\pi\alpha}{2})} & \text{si } \alpha \neq 1 \\ \frac{2}{\pi} & \text{si } \alpha = 1 \end{cases}$$

2.2.6 Moments

Une conséquence directe de la décroissance "lente" des lois de probabilité α -stables est que si X est une variable aléatoire suivant une loi stable de paramètres α , β , σ et μ , avec $\alpha \neq 2$, alors

$$\begin{cases} \mathbb{E}|Z|^p < \infty & \text{pour tout } p \in]0, \alpha[\\ \mathbb{E}|Z|^p = \infty & \text{pour tout } p \geq \alpha. \end{cases}$$

Nous avons noté plus haut que les lois stables sont des attracteurs. Chacune d'elles attire des lois de probabilité qu'ont le même comportement asymptotique.

2.2.7 Théorème de la limite centrale généralisée

Soit α un réel, avec $0 < \alpha < 2$, et soit X une variable aléatoire dont la fonction de répartition vérifie les conditions suivantes, qui concernent son comportement asymptotique :

$$\begin{cases} \mathcal{P}(X > x) \sim Cpx^{-\alpha} & \text{et} \\ \mathcal{P}(X < -x) \sim Cqx^{-\alpha} & \text{pour } x > 0 \text{ assez grand.} \end{cases}$$

Supposons de plus que p et q soient des réels positifs vérifiant $p + q = 1$. 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, Feller [36], Meerschaert [74] :

Théorème2 : Soit 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 de réels (a_n) et (b_n) telles que

$$\frac{X_1 + \dots + X_k}{a_k} - b_k$$

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

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

2.2.8 Simulation de variables aléatoires α -stables

Une première solution au problème de la génération de variables aléatoires stables a été trouvée par Kanter [54]. Dans [54], Kanter a développé une méthode directe pour la génération de variables de loi $S_\alpha(1, 1, 0)$ pour $\alpha < 1$. Puis cette méthode a été étendue au cas général. Chambers et al.[114] ont été les premiers à obtenir une formule en se basant sur la représentation intégrale de la densité. Il y a aussi les formules de Chambers, Mallows, Stuck [22] qui permettent de générer les lois α -stables dont la description a été faite ci dessous.

On génère deux variables aléatoires, U de loi uniforme sur $(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ et W_a de loi exponentielle de paramètre 1. Mais avant cela, on génère d'abord deux variables aléatoires de loi uniforme, à l'aide d'un générateur de nombres pseudo aléatoires représenté par la fonction "Random Number" en *Fortran*, U_1 et U_2 sur $]0; 1[$. Puis par changement de variable

$$(b_s - b_i)U_1 - b_s,$$

où b_s et b_i sont respectivement la borne supérieure et la borne inférieure, on obtient :

$$U = \pi U_1 - \frac{\pi}{2}$$

et par transformation inverse on obtient

$$W_a = -\log(1 - U_2)$$

On fabrique une variable aléatoire X donnée par :

- pour $\alpha \neq 1$

$$\mathbb{B}(\alpha, \beta) = \left(\frac{\arctan(\beta \tan \frac{\pi\alpha}{2})}{2} \right)$$

$$S(\alpha, \beta, 0) = \left(1 + \beta^2 \tan^2 \frac{\pi\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2\alpha}}$$

$$X = S(\alpha, \beta, 0) \frac{\sin \alpha(U + \mathbb{B}(\alpha, \beta))}{(\cos U)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\cos(U - \alpha(U + \mathbb{B}(\alpha, \beta)))}{W_a} \right)^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}$$

- Pour $\alpha = 1$

$$X = \frac{2}{\pi} \left(\left(\frac{\pi}{2} + \beta U \right) \tan U - \beta \log \left(\frac{W_a \cos U}{\frac{\pi}{2} + \beta U} \right) \right)$$

de loi $S_\alpha^0(1, \beta, 0)$. On passe à une variable aléatoire Y de distribution $S_\alpha^0(\sigma, \beta, \mu)$ par :

$$Y = \begin{cases} \sigma X + \mu & \text{pour } \alpha \neq 1 \\ \sigma X + \frac{2}{\pi} \sigma \log \sigma + \mu & \text{pour } \alpha = 1 \end{cases}$$

suit une loi stable de paramètres $\alpha, \beta, \sigma, \mu$.

Les figures suivantes illustrent l'implémentation numérique de la méthode de génération d'échantillons décrite ci-dessus.

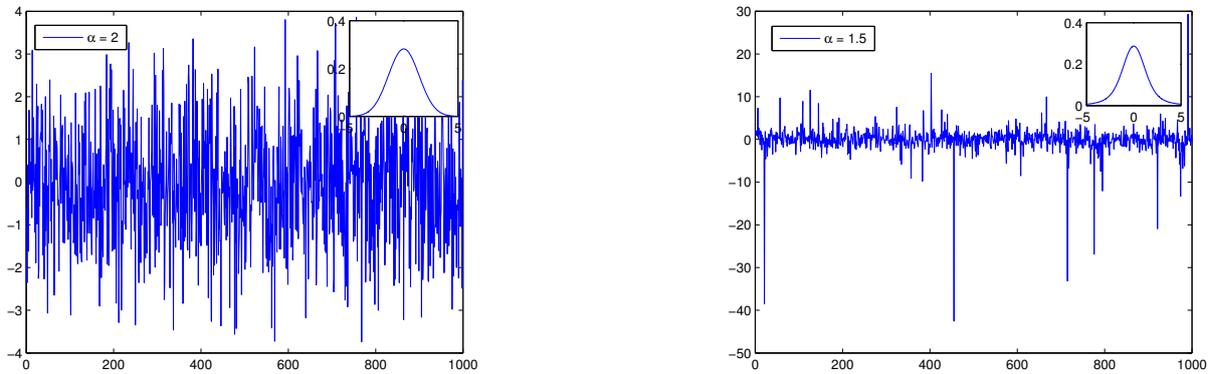


FIGURE 2.8 – Simulations numériques d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 2$ et $\alpha = 1.5$.

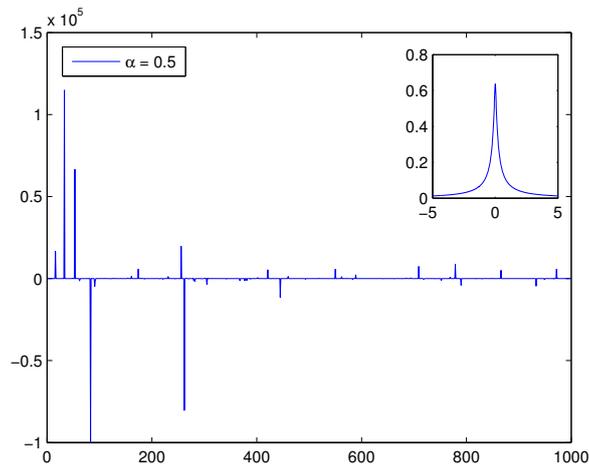


FIGURE 2.9 – Simulation numérique d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 0.5$.

Les figures 2.8 et 2.9 montrent des échantillons de lois α -stables avec un paramètre d'asymétrie nul ($\beta = 0$), un paramètre de localisation nul ($\mu = 0$) et un paramètre d'échelle qui vaut l'unité ($\sigma = 1$). Elles mettent en évidence l'effet de l'exposant de stabilité.

En particulier, on remarque que les échantillons présentent des valeurs extrêmes, qui augmentent en grandeur et en fréquence, quand l'exposant de stabilité α diminue. Pour cette raison, les lois stables permettent de prendre en compte les événements extrêmes. Cette propriété trouve une importance fondamentale dans toutes les applications où la dynamique étudiée est soumise à des variabilités aléatoires brutales (crack boursier,...). Les figures 2.10 et 2.11

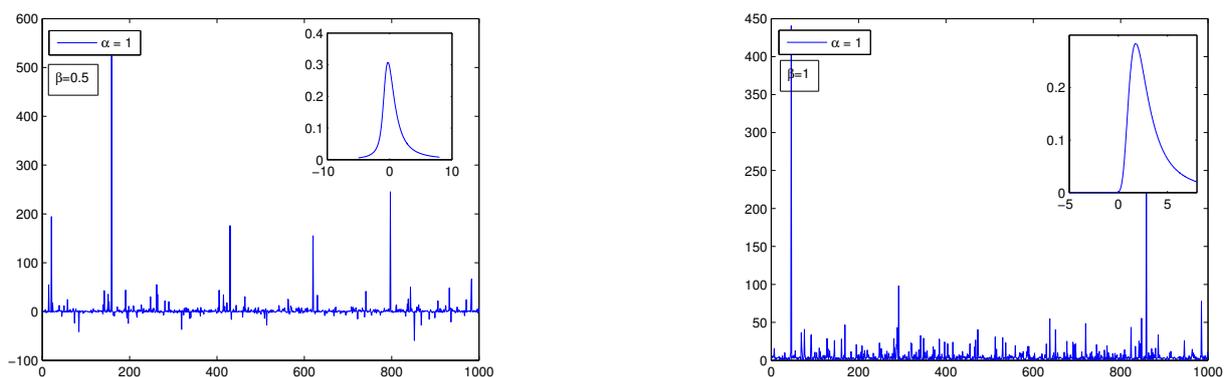


FIGURE 2.10 – Simulation numérique d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 1$ et $\beta = 0.5$ et $\beta = 1$.

montrent des échantillons de lois α -stables avec des paramètres d'asymétrie β non-nuls. Elles montrent en particulier que lorsque le paramètre d'asymétrie β est maximal ($\beta = 1$) alors toutes les réalisations de la variable aléatoire de loi

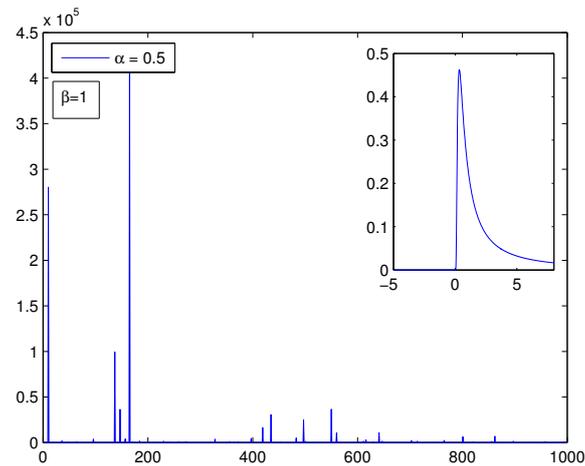


FIGURE 2.11 – Simulation numérique d'échantillons de variable aléatoire de loi α -stable avec $\alpha = 0.5$ et $\beta = 1$.

α -stable prennent systématiquement des valeurs positives quand l'exposant de stabilité α est inférieur ou égal à 1. Cette propriété qui se démontre mathématiquement présente un intérêt capital dans notre utilisation des lois α -stables. En effet, nous allons utiliser dans le chapitre suivant une variable aléatoire de loi α -stable pour modéliser des temps d'immobilité (donc toujours positifs) de marcheurs aléatoires qui représentent les déplacements de particules de soluté dans un milieu poreux.

Les variables aléatoires sont indispensables pour décrire de nombreux phénomènes physiques. Cependant cette notion ne suffit pas, on a aussi besoin de fonctions d'un paramètre dont les valeurs seraient elles mêmes des variables aléatoires et non pas des nombres.

2.3 Fonction aléatoire ou processus stochastique

Comme on vient de le souligner, la variable aléatoire se situe à la base de la caractérisation des phénomènes du hasard. Le caractère aléatoire peut également s'appliquer à une fonction d'une ou plusieurs variables. Un tel objet constitue ce que nous appelons fonction aléatoire. Généralement, la fonction aléatoire s'interprète comme une collection de variables reliées entre elles par la dynamique du système considéré.

Par exemple si nous considérons une fonction aléatoire $X(t)$ où t représente le temps alors pour chaque t_i , $X(t_i)$ est une variable aléatoire. La probabilité pour que sa valeur à l'instant t appartienne à $]x - \frac{dx}{2}, x + \frac{dx}{2}[$ peut être notée $P(x, t)dx$, $P(x, t)$ est la densité de probabilité de $X(t)$.

Cependant la notion de fonction aléatoire permet de gérer aussi des évènements qui concernent les variables aléatoires $X(t_1)$ et $X(t_2)$: par exemple la probabilité pour que $X(t_1)$ appartienne à $]x_1 - \frac{dx_1}{2}, x_1 + \frac{dx_1}{2}[$ et $X(t_2)$ appartienne à $]x_2 - \frac{dx_2}{2}, x_2 + \frac{dx_2}{2}[$ est notée $P(x_1, x_2, t_1, t_2)dx_1dx_2$ où $P(x_1, x_2, t_1, t_2)$ est la densité de probabilité jointe. Plus généralement la densité de probabilité jointe correspond à la probabilité que $X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_n)$, ces variables, appartiennent à

$]x_1 - \frac{dx_1}{2}, x_1 + \frac{dx_1}{2}[, \dots,]x_n - \frac{dx_n}{2}, x_n + \frac{dx_n}{2}[$. Elle est associée à la densité $P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$.

A partir de cette loi de probabilité jointe, il est possible d'écrire des probabilités conditionnelles qui permettent en particulier de relier les états passés de la fonction aléatoire à son présent. La densité $P(x, t)$ est loin de suffire à représenter un tel objet, et les probabilités qui lui correspondent.

Probabilité conditionnelle

On définit la densité de probabilité conditionnelle de la séquence x_i, x_{i+1}, \dots, x_n aux instants t_i, t_{i+1}, \dots, t_n sachant que la séquence x_1, x_2, \dots, x_n a eu lieu aux instants t_1, t_2, \dots, t_{i-1} comme

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_{i-1}, t_{i-1} \mid x_i, t_i; x_{i+1}, t_{i+1}; \dots, x_n, t_n) = \frac{P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_n, t_n)}{P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_{i-1}, t_{i-1})} \quad (2.12)$$

On définit la probabilité marginale $P(x_2, t_2)$ d'une probabilité conjointe $P(x_1, t_1; x_2, t_2)$ comme la somme des évènements x_1 qui sont apparus à l'instant t_2 .

$$P(x_2, t_2) = \int_{\mathbb{R}} dx_1 P(x_1, t_1; x_2, t_2) \quad (2.13)$$

De la même manière, on peut généraliser ce type d'équation pour la probabilité d'avoir un évènement x_3 à t_3 .

$$P(x_1, t_1; x_3, t_3) = \int_{\mathbb{R}} dx_2 P(x_1, t_1; x_2, t_2 \mid x_3, t_3) \quad (2.14)$$

$$P(x_1, t_1; x_3, t_3) = \int_{\mathbb{R}} dx_2 P(x_1, t_1, x_2, t_2 \mid x_3, t_3) P(x_1, t_1 \mid x_2, t_2) \quad (2.15)$$

Fonction aléatoire Markovienne

L'estimation de ces probabilités conditionnelles permet d'évaluer l'importance des états passés et donc de donner une idée sur la capacité du phénomène

aléatoire à mémoriser son passé ("effet mémoire"). Il existe une classe de fonction aléatoire "sans mémoire" dont la dépendance au passé se limite à l'état au temps t_{i-1} . La densité de probabilité conditionnelle d'une telle fonction s'écrit :

$$P(x_i, t_i | x_{i-1}, t_{i-1} \dots x_2, t_2, x_1, t_1) = P(x_i, t_i | x_{i-1}, t_{i-1}) \quad (2.16)$$

De telles fonctions sont dites "Markoviennes". Il est possible de montrer dans ce cas que la probabilité de transition d'un état $(i-1)$ à l'état (i) suit une équation de Chapman-Kolmogorov. Plus précisément, la loi de probabilité conditionnelle

$$P(x, t) = P(x, t | x_0, 0) \quad (2.17)$$

évolue selon une équation de Fokker-Planck

$$\partial_t P(x, t) = -\partial_x(a(x)P(x, t)) + \frac{1}{2}\partial_x^2(b(x)P(x, t)) \quad (2.18)$$

Le mouvement Brownien est un processus de Markov.

Mouvement Brownien

Le mouvement Brownien physique, en référence au nom de l'auteur, a été observé au microscope en 1827 par le Botaniste anglais Robert Brown sur les particules de grains de pollen animés d'un mouvement erratique indescriptible, aléatoire, posant une réelle difficulté d'interprétation immédiate. Albert Einstein fut le premier en 1905 à décrire la correspondance qu'il y a entre le mouvement Brownien à l'échelle microscopique et l'équation de diffusion à l'échelle macroscopique en s'inspirant du raisonnement probabiliste pour la démonstration de la loi de Fick en 1905. Plus tard, Jean Perrin, mesura les trajectoires des particules soumises au mouvement Brownien et confirma ainsi l'analyse théorique d'Einstein. Marian Smoluchowski introduisit la notion de "marche aléatoire" en 1906. Paul Langevin en 1908 donna une formulation mécaniste du mouvement Brownien correspondant au déplacement désordonné de particules dans un fluide provoqué par les collisions entre particules voisines sous la forme d'une équation différentielle stochastique comportant une force aléatoire. A partir de ces observations, les mathématiciens ont défini puis étudié des processus aléatoires indexés par une variable réelle positive, le temps, et qu'on appelle mouvement Brownien. Lorsque nous parlerons de mouvement Brownien, nous ferons référence à celui-ci, celui des mathématiciens, qui possède une définition

claire et des propriétés décrites sous forme de théorèmes. Le mouvement Brownien sert de modèle mathématique pour certains processus physiques. Il est utilisé ici pour décrire les déplacements aléatoires des particules de soluté dans un milieu poreux. L'une des propriétés importantes du mouvement Brownien est l'absence de mémoire, c'est un processus Markovien.

Parmi les processus Markoviens, nous portons particulièrement notre attention sur le mouvement Brownien car il est le modèle à petite échelle et à grande échelle du phénomène de diffusion classique tel que nous allons le rappeler dans le chapitre suivant. D'un point de vue plus formel, un mouvement Brownien standard $(W_t, t \geq 0)$ est un processus stochastique (ou fonction aléatoire) construit sur un espace probabilisé $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$ tel que

- $\forall \omega \in \Omega$ on a $W_0(\omega) = 0$. Cette propriété indique que toutes les réalisations d'un mouvement Brownien commencent par une valeur nulle.
- $\forall 0 \leq t_0 \leq t_1 \leq t_2 \dots \leq t_{i-1} \leq t_i$ alors les incréments $(W_{t_1} - W_{t_0})$, $(W_{t_2} - W_{t_1})$, ..., $(W_{t_i} - W_{t_{i-1}})$, constituent une suite de variables aléatoires indépendantes.
- $\forall t, s \geq 0$ tels que $s < t$ alors l'incrément $(W_t - W_s)$ du mouvement Brownien est distribué selon une loi normale d'espérance 0 et de variance $t - s$. Ces incréments forment une autre fonction aléatoire appelée aussi "bruit blanc gaussien".
- $\forall \omega \in \Omega$, la trajectoire (réalisation) du mouvement Brownien $t \rightarrow W_t(\omega)$ est dérivable nulle part mais continue partout.

On peut montrer que la loi de distribution de probabilité du mouvement Brownien est donnée par la solution de l'équation de Fokker-Planck (2.18) quand les paramètres associés deviennent constants $a(x) = 0$ et $b(x) = \lambda$. En calculant les moments d'ordre un et deux du mouvement Brownien, on trouve les résultats suivants :

$$\begin{aligned} \langle W_t(\omega) \rangle &= 0 \\ \langle W_t(\omega)^2 \rangle &= 2\lambda t \\ \text{cov}(W_{t_1} W_{t_2}) &= 2\lambda \min(t_1, t_2) \end{aligned}$$

La figure 2.12 illustre ces propriétés par une simulation numérique d'un mouvement Brownien unidimensionnel. Pour compléter ce paragraphe sur le mouvement Brownien, nous allons établir de manière simple une relation avec le théorème de la limite centrale qui a été énoncé auparavant. En effet si on pose $n = \frac{t}{\delta t}$ dans l'équation (2.9), nous obtenons

$$Y_1 + \dots + Y_n \approx t \frac{\mu}{\sqrt{\delta t}} + \frac{\sigma}{\sqrt{\delta t}} \sqrt{t} \mathcal{N}(0, 1) \quad (2.19)$$

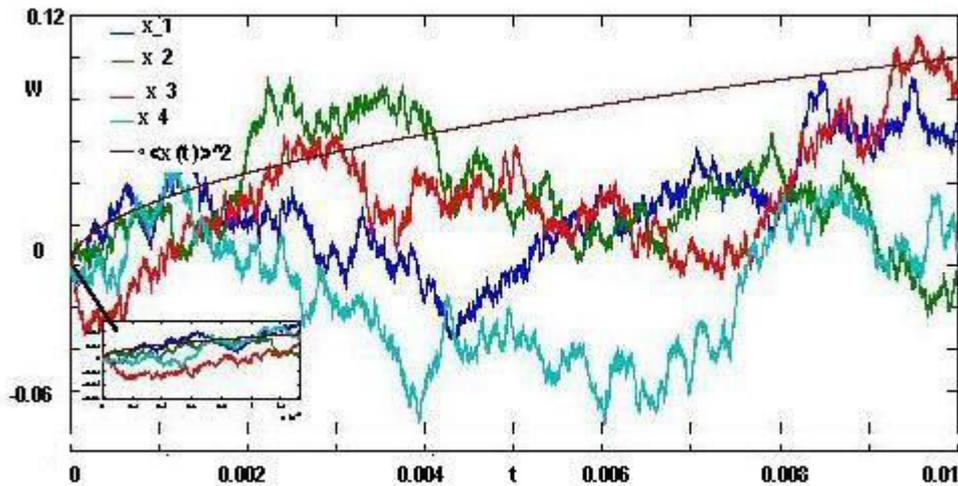


FIGURE 2.12 – Simulation numérique de différentes trajectoires d'un mouvement Brownien ($W_t, t \geq 0$).

où l'on peut remarquer que le terme de droite se présente comme un mouvement Brownien avec dérive. De même, si on note $\langle v \rangle = \frac{\mu}{\delta t}$ et $D = \frac{\sigma^2}{2\delta t}$ dans l'équation (2.19), on montre que le mouvement Brownien possède un lien direct avec la diffusion normale (modèle ADE) que nous avons décrite dans le chapitre précédent par l'équation (1.3). Dans ce cas la partie $\sqrt{2Dt}\mathcal{N}(0, 1)$ représente la dispersion et $\langle v \rangle$ une vitesse moyenne d'advection. En adoptant ceci, on trouve comme loi de probabilité associée au mouvement Brownien une densité gaussienne

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - \langle v \rangle t)^2}{4Dt}\right) \quad (2.20)$$

qui est précisément la solution exacte de l'équation (1.3). Ces résultats suggèrent que par additivité, les déplacements de marcheurs individuels suivant une loi gaussienne aboutissent à l'échelle macroscopique à un nuage de marcheurs animé par un phénomène de diffusion normale. On peut aussi dire plus formellement que le mouvement Brownien est la limite hydrodynamique d'une marche aléatoire gaussienne. A cause du théorème de la limite centrale, c'est encore vrai pour des marches aléatoires accumulant des déplacements distribués par une loi de variance finie (pensons par exemple à une variable aléatoire de Bernoulli). Il est important de noter ici qu'il existe un certain nombre de modèles microscopiques décrivant des phénomènes de diffusion anormale qui mettent en jeu des marcheurs aléatoires avec des distributions de probabilité différentes de celles du mouvement Brownien. En particulier, nous citons les modèles de type vols de Lévy ou marches aléatoires subordonnées en temps

qui utilisent les lois α -stables de Lévy que nous avons introduites dans le paragraphe précédent. Ces modèles conduisent à l'échelle macroscopique à une généralisation du modèle ADE en introduisant des dérivations et des intégrations d'ordre non entier. Ces opérateurs fractionnaires représentent des effets non-locaux en espace ou en temps. Les effets de mémoire sont un cas particulier associés aux opérateurs fractionnaires en temps. La section suivante est consacrée au rappel de ces notions de dérivation et d'intégration fractionnaire au sens de Riemann-Liouville, de Grünwald-Letnikov et de Caputo.

2.4 Les opérateurs fractionnaires

Historiquement, c'est au 17^{ème} siècle dans une lettre de Leibniz à L'Hopital qu'on trouve la première mention à la différentielle fractionnaire $d^{\frac{1}{2}}x$, qualifiée alors de "paradoxe apparent". Dès le 18^{ème} siècle, les prémices du concept de dérivation fractionnaire, c'est-à-dire d'un opérateur de dérivation d'ordre non entier, apparaissent dans des écrits d'Euler, de Lagrange. Les avancées les plus marquantes sont celles de Liouville dans ses multiples mémoires à l'Ecole Polytechnique entre 1832 et 1835, puis la contribution de Riemann en 1847, faisant que les noms de ces deux mathématiciens restent attachés à la fameuse transformation que nous rappellerons plus loin. C'est Lacroix (1879) qui montre que pour $f(x) = x^a$, et $a > 0$.

$$\frac{d^{\frac{1}{2}}f(x)}{d^{\frac{1}{2}}x} = \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a+\frac{1}{2})}x^{\alpha-\frac{1}{2}} \quad (2.21)$$

Plusieurs ouvrages sont dédiés à l'analyse fractionnaire notamment les pionniers Oldham et Spanier [87], Miller et Ross [78] et Samko et al.[97] qui représentent une source très complète. Le calcul fractionnaire permet d'interpoler entre les dérivées d'ordre entier, ainsi qu'entre des intégrations multiples. Il existe diverses théories qui permettent d'interpoler entre les dérivées d'ordre entier, c'est à dire de trouver des opérateurs indexés par un réel (l'ordre de dérivation) et tels que lorsque cet ordre vaut l'entier naturel m l'opérateur soit la dérivée d'ordre n . Celle que nous allons présenter généralise aux ordres quelconques une formule de Cauchy pour l'intégration répétée n -fois. Nous définirons ensuite des dérivées d'ordre non entier qui permettront d'inverser ces opérateurs intégraux. Les mathématiciens qui ont mis en place ces opérateurs cherchaient à unifier une théorie. Mais ce n'est pas pour cette raison que nous nous intéressons aux intégrales et aux dérivées fractionnaires. Notre motivation

est le fait que ces opérateurs interviennent lorsqu'on veut calculer des flux de particules, celles-ci effectuant certains types de marches au hasard.

2.4.1 Les opérateurs fractionnaires d'intégration

Soit $f(x)$ une fonction intégrable en (a, ∞) et $n \in \mathbb{N}^*$, alors l'intégrale de Cauchy :

$$I_{a,x}^n f(x) = \int_a^x du_1 \int_a^{u_1} du_2 \dots \int_a^{u_{n-1}} f(u_n) du_n = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-u)^{n-1} f(u) du \quad (2.22)$$

peut être généralisée à une intégrale d'ordre $\alpha \in \mathbb{R}^+$ en remplaçant $(n-1)!$ par la fonction gamma Γ d'Euler. On a ainsi

$$I_{a,x}^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-u)^{\alpha-1} f(u) du \quad (2.23)$$

et

$$I_{x,a}^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^a (u-x)^{\alpha-1} f(u) du \quad (2.24)$$

Les équations (2.23) et (2.24) définissent les opérateurs d'intégration fractionnaire de Riemann-Liouville. Remarquons qu'on définit ainsi une intégrale fractionnaire pour chaque intervalle d'intégration. De plus les bornes de cet intervalle ne jouent pas de rôles symétriques. La fonction $I_{a,x} f(x)$ dépend du comportement de f dans l'intervalle $]a, x[$ tout entier, cependant les valeurs de f en des u proches de x ont plus d'influence que pour u loin de x . La borne a peut être finie ou non. Dans le cas $a = -\infty$ l'intervalle d'intégration devient $] -\infty, x[$ dans $I_{-\infty,x}^\alpha$. Dans le cas $a = +\infty$ l'intervalle d'intégration qui correspond à $I_{x,+\infty}^\alpha$ est $]x, +\infty[$. La définition de l'intégration fractionnaire est explicitement associée à un intervalle et il en est de même pour la dérivation fractionnaire.

2.4.2 Dérivées d'ordre non entier

La dérivation fractionnaire $D_{a,x}^\alpha$ dans $[a, x]$ est définie comme l'inverse à gauche de l'opérateur $I_{a,x}^\alpha$: $D_{a,x}^\alpha I_{a,x}^\alpha \varphi = \varphi$ pour toute fonction φ intégrable ou continue dans un intervalle contenant $[a, x]$. De même la dérivation fractionnaire d'ordre α dans l'intervalle $[x, a]$ est l'inverse à gauche de $I_{x,a}^\alpha$: $D_{x,a}^\alpha I_{x,a}^\alpha \varphi = \varphi$. On parle aussi de dérivée à gauche pour $D_{a,x}^\alpha$ et à droite $D_{x,a}^\alpha$. Ces opérateurs $D_{a,x}^\alpha$ et $D_{x,a}^\alpha$ peuvent être calculés de différentes façons. Les formules suivantes sont aussi appelées "dérivées de Riemann-Liouville".

$$\mathbf{D}_{a,x}^{\alpha} f(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} I_{a,x}^{n-\alpha} f(x) \quad (2.25)$$

$$\mathbf{D}_{a,x}^{\alpha} f(x) \equiv (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} I_{x,a}^{n-\alpha} f(x) \quad (2.26)$$

$$\mathbf{D}_{a,x}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha + n + 1)} \left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1} \int_a^x (x-u)^{n-\alpha} f(u) du \quad (2.27)$$

avec

$$n \leq \alpha < n + 1$$

L'expression (2.25) est la définition la plus connue de la dérivée fractionnaire. Elle est souvent appelée la définition de Riemann-Liouville, mais il s'agit simplement d'une façon d'expliciter l'inverse à gauche de l'opérateur $I_{a,x}$. D'autres méthodes, largement aussi utiles, seront abordées par la suite. Nous accorderons une importance particulière aux dérivées d'ordre compris entre 0 et 1. Dans ces conditions, le théorème suivant permet d'inverser (à gauche) l'opérateur d'intégration d'ordre α sur un intervalle donné. On montre Samko [97] que lorsque f est de la forme $f(x) = I_{a,x}^{\alpha} \varphi$, la limite (si elle existe) quand $\epsilon \rightarrow 0^+$ de

$$\frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_{\epsilon}^{+\infty} \frac{f(x) - f(x-t)}{t^{\alpha+1}} dt \quad \text{n'est autre que } \varphi.$$

Le théorème suivant établit ceci avec plus de précision.

Théorème3 : *Soit α tel que $1 < p < \frac{1}{\alpha}$. Si $f(x) = I_{-\infty,+}^{\alpha} \varphi$ avec φ définie dans $L^p(\mathbb{R})$, alors*

$$\varphi(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_{\epsilon}^{+\infty} \frac{f(x) - f(x-t)}{t^{\alpha+1}} dt \quad (2.28)$$

Cette limite est prise dans $L^p(\mathbb{R})$ et elle donne aussi un résultat valable pour presque tout x . Ce théorème s'adapte à $L^p(] - \infty, a])$. Ce théorème établit que la limite ci-dessus est une inverse à gauche pour l'opérateur $I_{-\infty,x}^{\alpha}$. Donc c'est une dérivée fractionnaire. On l'appelle la dérivée de Marchaud. Ce n'est pas une nouvelle dérivée, mais simplement une façon (plus générale que les formules de Riemann-Liouville) de calculer l'inverse à gauche de $I_{-\infty,x}^{\alpha}$, c'est à dire une dérivée fractionnaire.

Les indices a et x désignent les deux bornes liées à l'opération de différentiation fractionnaire. On utilise deux notations pour désigner l'intégrale. Les cas $a = 0$ et $a = \infty$ présentent un intérêt particulier :

– i) pour $a = 0$ la transformée de Laplace de l'intégrale fractionnaire est

$$\mathcal{L}[I_{0,x}^\alpha f(x)] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \mathcal{L}[x^{\alpha-1}] \mathcal{L}[f(x)] = s^{-\alpha} \hat{f}(s) \quad (2.29)$$

La transformée de Laplace de la dérivée fractionnaire de Riemann-Liouville qui lui correspond est

$$\mathcal{L}[D_{0,x}^\alpha f(x)] = s^\alpha \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{m-1} D_x^{(k)} I_{0,x}^{n-\alpha} s^{m-1-k} \quad (2.30)$$

L'intégration et la dérivation fractionnaire ont un comportement différent des opérateurs d'ordre entier. En particulier on peut voir que la dérivée d'une puissance est une puissance, mais celle d'une constante n'est pas nulle :

$$D^{\alpha} t^q = \frac{\Gamma(1+q)}{\Gamma(1+q-\alpha)} t^{q-\alpha}$$

$$D^{\alpha} 1 = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} t^{q-\alpha}$$

$$\mathcal{L}[I_{0,x}^\alpha x^\mu] = \frac{(\mu+1)}{s^{\mu+\alpha+1}}, \quad \mu \geq -1$$

$$\mathcal{L}[I_{0,x}^\alpha e^{mt}] = \frac{1}{s^\alpha(s-m)}$$

– ii) Pour $a = \infty$ les opérateurs intégraux (2.23) et (2.24) sont connus sous le nom d'opérateur de Weyl. Il convient de recourir à la transformée de Fourier, car dans l'espace de Fourier les équations (2.23) et (2.24) sont des convolutions définies par

$$TF[I_{-\infty,x}^\alpha] = (ik)^\alpha \tilde{f}(k), \quad TF[I_{x,+\infty}^\alpha] = -(ik)^\alpha \tilde{f}(k). \quad (2.31)$$

Les dérivées $D_{a,x}^\alpha$ et $D_{x,a}^\alpha$ s'obtiennent aussi par les formules de Grünwald-Letnikov, qui font intervenir des différences finies d'ordre fractionnaire généralisant la définition de la dérivée d'ordre 1 faisant intervenir la limite du taux d'accroissement. Ces formules permettent de discrétiser ces opérateurs comme les développements limités dans le cadre de la dérivation d'ordre entier.

2.4.3 Les formules de Grünwald-Letnikov pour la dérivée fractionnaire

Comme il vient d'être dit, les formules de Grünwald-Letnikov pour représenter $D_{a,x}^\alpha$ et $D_{x,a}^\alpha$ 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. Les différences finies d'ordre α et de pas h d'une fonction f sont, pour $\alpha > 0$

$$(\Delta_h^\alpha f)(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - kh). \quad (2.32)$$

Le terme $\binom{\alpha}{\beta}$ est défini par

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

où Γ représente la fonction gamma d'Euler (Samko [97]). On peut aussi voir que $\Delta_h^\alpha f$ généralise les différences finies d'ordre entier. Considérons une fonction continue $f(x) \in C^n$ dérivable n -fois (f de classe C^n), la dérivée première de la fonction f est donnée par

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - f(x - h)}{h} \quad (2.33)$$

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

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(x) - f'(x - h)}{h} \\ f''(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - 2f(x - h) + f(x - 2h)}{h^2} \end{aligned} \quad (2.34)$$

En utilisant (2.33) et (2.34) nous obtenons

$$f'''(x) = \frac{d^3 f(x)}{dx^3} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - 3f(x - h) + 3f(x - 2h) - f(x - 3h)}{h^3} \quad (2.35)$$

et par récurrence on peut établir que

$$\begin{aligned} f^n(x) &= \frac{d^n f(x)}{dx^n} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^n} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n}{k} f(x - kh) \\ \binom{n}{k} &= \frac{n(n-1)\dots(n-k+1)}{k!} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Considérons

$$f_h^{(p)}(x) = \frac{1}{h^p} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{p}{k} f(x - kh), \quad (2.37)$$

une expression généralisant (2.33)-(2.36), où p est un entier arbitraire ; n est aussi un entier, comme ci-dessus, avec $p \leq n$ (pour plus de détails voir [105]) on a

$$\lim_{h \rightarrow 0} f_h^{(p)}(x) = f^{(p)}(x) = \frac{d^p f(x)}{dx^p} \quad (2.38)$$

L'expression (2.38) est pour la valeur de p positive. Considérons le cas où p prend des valeurs négatives. On pose :

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} p \\ k \end{bmatrix} &= \frac{p(p+1)\dots(p+k-1)}{k!} \\ \binom{-p}{k} &= \frac{-p(-p-1)\dots(-p-k+1)}{k!} = (-1)^k \begin{bmatrix} p \\ k \end{bmatrix} \end{aligned}$$

et en remplaçant p dans l'équation (2.38) par $-p$ on peut écrire

$$f_h^{(-p)}(x) = \frac{1}{h^{-p}} \sum_{k=0}^n \begin{bmatrix} p \\ k \end{bmatrix} f(x - kh) \quad (2.39)$$

où p est un nombre entier positif, [105]. Si p est fixé, alors $f_h^{(-p)}(x)$ tend vers une limite nulle quand $x \rightarrow 0$. Pour arriver à une limite non nulle, on suppose que $n \rightarrow \infty$ quand $x \rightarrow 0$. On peut prendre $h = \frac{x-a}{n}$, où a est une constante réelle, et on considère la valeur limite, soit finie ou infinie, de $f_h^{(-p)}(x)$, que l'on notera comme suit :

$$\lim_{h \rightarrow 0} f_h^{(-p)}(x) = {}_a D_x^{-p} f(x) = I_{a,x}^p f(x) \quad \text{avec } nh = x - a$$

Ce qui permet, d'après tout calcul fait, d'aboutir à :

$$\begin{aligned} D_{a,x}^{-p} f(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} h^p \sum_{k=0}^n \begin{bmatrix} p \\ k \end{bmatrix} f(x - kh) = \frac{1}{(p-1)!} \int_a^x (x-\tau)^{p-1} f(\tau) d\tau \\ &= I_{a,x}^p f(x) \end{aligned} \quad (2.40)$$

On peut prouver par récurrence [105] que si l'expression (2.40), de droite, est vérifiée au rang p alors elle est aussi vérifiée pour $p+1$. De même on peut aussi montrer qu'elle est une représentation d'une intégrale répétée p -fois qui permet d'aboutir au résultat suivant :

$$D_{a,x}^p f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-p} \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{p}{k} f(x - kh) \quad (2.41)$$

qui représente la dérivée d'ordre m si $p = m$ et l'intégrale si $p = -m$. Cette observation entraîne naturellement l'idée d'une généralisation des notions de différentiation et d'intégration en imposant à p d'être un nombre réel, ou même complexe. On se restreindra ici aux valeurs réelles de p . Ainsi sans rentrer dans les détails mathématiques :

L'intégrale donne :

$$I_{a,x}^p f(x) = D_{a,x}^{-p} f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} h^p \sum_{k=0}^n \binom{p}{k} f(x - kh) = \frac{1}{(p)!} \int_a^x (x - \tau)^{p-1} f(\tau) d\tau \quad (2.42)$$

Si la dérivée $f'(x)$ est continue dans $[a, b]$, alors en intégrant par parties on pourra écrire sous la forme

$$I_{a,x}^p f(x) = \frac{f(a)(x-a)^p}{\Gamma(p+1)} + \frac{1}{\Gamma(p+1)} \int_a^x (x-\tau)^p f'(\tau) d\tau \quad (2.43)$$

et si la fonction $f(x)$ est de classe C^{m+1} , alors

$$I_{a,x}^p f(x) = D_{a,x}^{-p} f(x) = \sum_{k=0}^m \frac{f^{(k)}(a)(x-a)^{p+k}}{\Gamma(p+k+1)} = \frac{1}{\Gamma(p+k+1)} \int_a^x (x-\tau)^{p+m} f^{(m+1)}(\tau) d\tau \quad (2.44)$$

La dérivée donne :

$$D_{a,x}^p f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-p} \sum_{k=0}^m (-1)^k \binom{p}{k} f(x - kh) = \lim_{h \rightarrow 0} f_h^p(x) \quad (2.45)$$

pour $p > 0$.

$$D_{a,x}^p f(x) = \sum_{k=0}^m \frac{f^{(k)}(a)(x-a)^{-p+k}}{\Gamma(-p+k+1)} + \frac{1}{\Gamma(-p+m+1)} \int_a^x (x-\tau)^{m-p} f^{(m+1)}(\tau) d\tau \quad (2.46)$$

La formule (2.46) est obtenue sous l'hypothèse que les dérivées $f^{(k)}(x)$, ($k = 1, 2, \dots, m+1$) sont continues dans l'intervalle fermé $[a, x]$ et que m est un nombre entier vérifiant la condition $m > p - 1$. La plus petite valeur possible de m est déterminée par l'inégalité : $m < p < m + 1$.

Passons maintenant au cas d'un exposant α non entier : la limite quand $h \rightarrow 0^+$ de $h^{-\alpha} \Delta_h^\alpha f(x)$ détermine un opérateur permettant de calculer l'inverse à gauche de $I_{-\infty,x}^\alpha$. Avant de préciser ce point, remarquons qu'il signifie que cette limite représente une définition de la dérivée d'ordre α , non pas moins mais plus générale que la formule de Rieman-Liouville, car elle s'applique à toutes les fonctions f pouvant elles mêmes s'écrire $f(x) = I_{-\infty,x}^\alpha \varphi$. Ceci est établi par le théorème suivant [97] :

Théorème 4 : Soit f définie dans $L^p(\mathbb{R})$ où $1 < p < \infty$ avec $f(x) = I_{-\infty,x}^\alpha \varphi$, φ définie dans $L^p(\mathbb{R})$ avec $1 \leq p \leq \infty$. Alors $\varphi(x) = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\Delta_h^\alpha f(x)}{h^\alpha}$, la limite

devant être entendue au sens de $L^p(\mathbb{R})$. Ce résultat s'applique à des fonctions f définies dans des intervalles finis en les prolongeant par 0. Ainsi on obtient

$$\Delta_h^\alpha f(x) = \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{x-a}{h} \rfloor} (-1)^j \binom{\alpha}{j} f(x - jh) \quad \text{pour } x > a$$

En se restreignant au cas $a = 0$ on obtient l'approximation de "Grünwald-Letnikov" de la dérivée d'ordre α sur l'intervalle $[0, x]$

$$D_{0,x}^\alpha f(x) = h^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{x}{h} \rfloor} (-1)^j \binom{\alpha}{j} f(x - jh) + \epsilon(h) \quad (2.47)$$

L'erreur $\epsilon(h)$ est d'ordre $0(h)$ lorsque le prolongement de f par 0 pour les arguments négatifs est dérivable jusqu'à l'ordre $[\alpha] + 3$ (ce qui implique évidemment $f(0) = 0^+$). Cependant le théorème ci-dessus établit l'approximation dès que f s'écrit $I_{-\infty,x}^\alpha \varphi$. La fonction f n'a pas besoin pour cela de s'annuler en 0^+ .

Nous avons vu que les dérivées fractionnaires $D_{a,x}^\alpha$ et $D_{x,a}^\alpha$ s'obtiennent en composant des intégrations d'ordre fractionnaire et des dérivations d'ordre entier, ces opérateurs ne commutent pas. En faisant agir dans un ordre différent les opérateurs présents dans la formule (2.25), on obtient un nouvel opérateur différent de $D_{a,x}^\alpha$, ces divers opérateurs sont utiles dans plusieurs domaines de physique. Nous serons conduits à l'évoquer plus tard.

2.4.4 La dérivée de Caputo

La définition de Caputo peut être écrite comme :

$$\partial_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(m - \alpha)} \int_0^t (t - u)^{m-\alpha-1} f^{(m)}(u) du = I_{0,t}^{m-\alpha} \left(\left(\frac{d}{dt} \right)^m f \right)(t) \quad (2.48)$$

avec $m - 1 < \alpha < m$.

On obtient ainsi un opérateur différent de la dérivée de Riemann-Liouville (2.25)-(2.26). En effet, les opérateurs $I_{a,x}^\alpha$ et $\frac{d}{dx}$ ne commutent pas ! Cependant on passe facilement de ∂_t^α à $D_{0,x}^\alpha$ en ajoutant une combinaison de termes liés uniquement aux conditions initiales.

Cet opérateur est différent de $D_{0,t}^\alpha$, comme nous allons le voir. Il a été introduit [21] pour des problèmes de mécanique dans lesquels il était indispensable. Il apparaît en particulier dans des problèmes liés à la viscoplasticité.

La différence entre la dérivée de Caputo et celle de Riemann-Liouville est liée aux valeurs en 0^+ de la fonction f et de ses dérivées d'ordre entier. Si on

dénote la dérivée de Caputo par ∂_t^α et par D_t^α la dérivée de Rieman-Liouville, entre l'une et l'autre [44][45], on peut établir la relation suivante :

$$\partial_t^\alpha = D_t^\alpha f(t) - \sum_{k=0}^{m-1} f^{(k)}(0+) \frac{t^{k-\alpha}}{\Gamma(k+1-\alpha)}$$

La soustraction du polynôme de Taylor de degré $m-1$ à $t=0+$ implique une régularisation de la dérivée à l'origine. Cette dérivée a la propriété d'être zéro quand la fonction est constante. Sa transformée de Laplace s'exprime par

$$\mathcal{L}[\partial_t^\alpha f(t)] = s^\alpha \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{m-1} s^{\alpha-1-k} f^{(k)}(0+) \quad (2.49)$$

2.4.5 La dérivée de Riesz-Feller

La dérivée de Riesz-Feller est définie à l'aide de sa transformée de Fourier

$$TF[\theta \nabla_x^\beta \phi(x)] = -|k|^\beta e^{i(\text{sign}k)\frac{\theta\pi}{2}} \tilde{\phi}(k) \quad (2.50)$$

Cette dérivée est importante parce que son symbole est le logarithme de la fonction caractéristique d'une loi α -stable (pour $\beta \in (0, 2]$), en accord avec la paramétrisation de Feller. Cet opérateur $\theta \nabla_x^\beta$ est défini par

$$\theta \nabla_x^\beta \phi(x) = -\frac{1}{2 \cos(\frac{\beta\pi}{2})} [D_{-\infty, x}^\beta \phi(x) - D_{x, +\infty}^\beta \phi(x)] \quad (2.51)$$

2.5 Fonction 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 Mittag-Leffler [79][80].

2.5.1 Définition

Les fonctions de Mittag-Leffler sont définies comme suit [31][32][33]

$$\mathbf{E}_\alpha(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}. \quad (2.52)$$

Avec $\alpha = 1$ on reconnaît l'exponentielle qui est un cas très particulier des fonctions de Mittag-Leffler à 1 paramètre notées \mathbf{E}_α . Ces dernières font elles mêmes partie de l'ensemble plus général des fonctions de Mittag-Leffler $\mathbf{E}_{\alpha, \beta}$ à

deux paramètres car on a $\mathbf{E}_\alpha = \mathbf{E}_{\alpha,1}$. La fonction de Mittag-Leffler à deux paramètres a été introduite par Argawal [2]. Elle est définie par le développement en série [31][32][33] qui suit

$$\mathbf{E}_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}, \quad (\alpha > 0, \beta > 0). \quad (2.53)$$

pour ($\beta = 1$) on retrouve bien la relation (2.52) avec

$$\mathbf{E}_{\alpha,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} = \mathbf{E}_\alpha(z), \quad (2.54)$$

Pour les équations différentielles d'ordre non entier, la fonction de Mittag-Leffler joue un rôle analogue à celui de la fonction exponentielle dans le cas des dérivées d'ordre entier. Ceci se voit facilement à l'aide de la transformation de Laplace.

2.5.2 Transformée de Laplace

La transformée de Laplace de la fonction de Mittag-Leffler à deux paramètres peut s'écrire

$$\int_0^{\infty} e^{-st} t^{\beta-1} \mathbf{E}_{\alpha,\beta}(\pm at^\alpha) dt = \frac{s^{\alpha-\beta}}{(s^\alpha \pm a)} \quad (2.55)$$

Dans cette relation générale, on déduit la transformée de Laplace de $\mathbf{E}_\alpha(-at^\alpha)$ qui s'écrit :

$$\frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + a} = \frac{1}{as^{1-\alpha} + s} \quad (2.56)$$

2.5.3 Equations différentielles vérifiées par les fonctions de Mittag-Leffler

Comme le symbole de Laplace de l'opérateur $D_{0,t}^\alpha$ est s^α et que $\mathbf{E}_\alpha(0) = 1$, on voit immédiatement que $\mathbf{E}_\alpha(-at^\alpha)$ est solution de l'équation différentielle ordinaire

$$aD_{0,t}^{1-\alpha} \mathbf{E}_\alpha(-at^\alpha) + \partial_t \mathbf{E}_\alpha(-at^\alpha) = 0 \quad (2.57)$$

qui donne la relation bien connue

$$a\mathbf{E}_1(-at) + \partial_t \mathbf{E}_1(-at) = 0 \quad (2.58)$$

dans le cas de l'exponentielle.

A cause de la relation (2.57) les fonctions du type de Mittag-Leffler $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ jouent un rôle important pour les équations aux dérivées partielles mettant en jeu des dérivées temporelles d'ordre fractionnaire. Elles interviennent en particulier lorsqu'on développe les solutions de certaines e.d.p généralisant l'équation de la diffusion, en utilisant les fonctions propres du second membre [29]. Elles interviennent donc en particulier dans la méthode de séparation de variables. D'autre part les fonctions propres du second membre d'une e.d.p d'évolution jouent un rôle essentiel dans la solution de problèmes non linéaires, puisqu'on s'en sert souvent pour développer les solutions de ces derniers [37][39][29]. Pour cette raison, les fonctions $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ jouent pour les e.d.p fractionnaires en temps le rôle que les exponentielles jouent pour les e.d.p non linéaires incluant des dérivées temporelles d'ordre entier.

2.5.4 Représentation graphique

Pour $0 < \alpha \leq 1$ la fonction $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ ressemble à l'exponentielle "étirée" $e^{-\Lambda t^\alpha}$ au voisinage de 0, et à la puissance $\frac{1}{\Lambda t^\alpha \Gamma(1-\alpha)}$ au voisinage de $+\infty$. C'est de plus une fonction strictement positive décroissante, comme le représente la figure 2.13

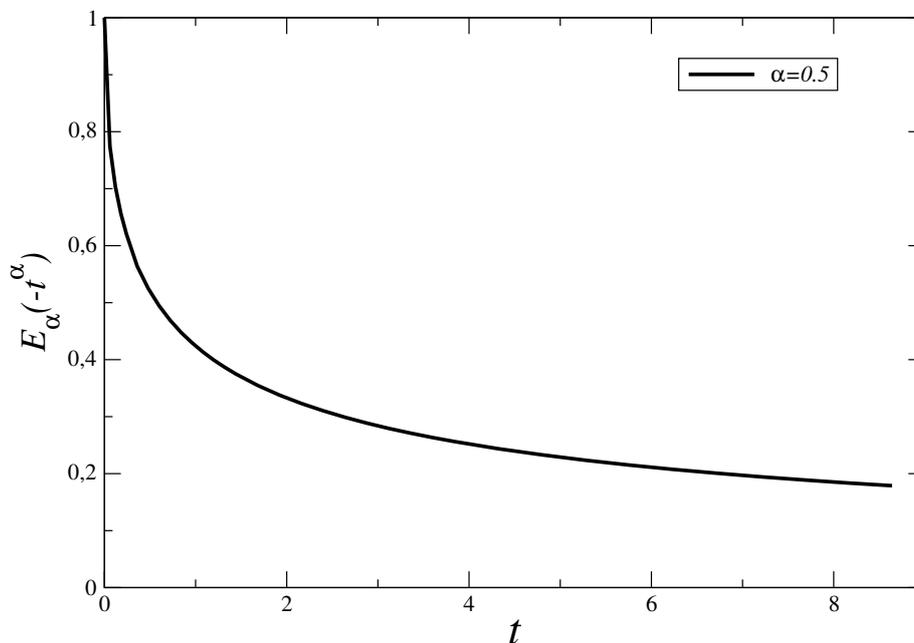


FIGURE 2.13 – Courbe de la fonction de Mittag-Leffler $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ pour $\Lambda = 1$ et $\alpha = 0.5$

Pour calculer numériquement les fonctions $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ on peut utiliser la série (2.52) lorsque l'argument est petit. Sinon, il vaut mieux utiliser des formules intégrales issues de l'inversion de la transformée de Laplace en modifiant le contour d'intégration [94]. On peut aussi remarquer que la relation (2.56) implique que $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$ n'est autre que $(Id + \Lambda I^\alpha)^{-1}(1)$. Plus loin, au chapitre III nous décrivons une méthode pour discrétiser l'opérateur $(Id + \Lambda I^\alpha)^{-1}$. On peut donc aussi calculer numériquement ainsi la fonction $\mathbf{E}_\alpha(-\Lambda t^\alpha)$.

2.6 Conclusion

Ce chapitre a rappelé la notion de variable aléatoire normale ou α -stable. Ces lois sont impliquées dans l'étude de nombreux phénomènes physiques et dans l'interprétation de nombreuses données. Ceci est dû au fait que les lois α -stables jouent un rôle aussi important que la loi normale. Comme elle, elles régissent la répartition de toutes les variables aléatoires obtenues en ajoutant un grand nombre de variables identiquement distribuées, sous certaines conditions. Les définitions des dérivées et intégrales fractionnaires ont aussi été rappelées. La loi normale est intimement liée à l'équation d'advection dispersion. Les lois α -stables sont associées à la vaste classe d'équations aux dérivées partielles incluant des dérivées temporelles d'ordre fractionnaire. C'est la conséquence du Théorème de la Limite Centrale Généralisé. La définition des fonctions de Mittag-Leffler qui jouent un rôle important dans la théorie du calcul fractionnaire a été rappelée.

Chapitre 3

Modélisation de la diffusion anormale

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la formulation mathématique du modèle que nous avons mis en oeuvre dans le cadre de cette thèse. D'une manière générale, les modèles de transport de masse dans les milieux poreux visent à comprendre et à reproduire la dynamique de la dispersion d'un soluté au sein de ces milieux. Dans le cadre des thématiques du laboratoire EMMAH concernant les transferts de solutés dans le sol, qui est en général un milieu poreux insaturé, un des objectifs finalisés de notre travail concerne la possibilité de prédiction de l'évolution d'un contaminant dans un tel milieu. Ceci nécessite le choix et la mise en oeuvre de modèles capables de fournir une interprétation cohérente des mesures en reproduisant les caractéristiques principales des observations. Comme il a été dit dans le premier chapitre de ce mémoire, aussi bien en laboratoire qu'en site naturel, une des propriétés principales du phénomène de transport de soluté dans les milieux poreux naturels, souvent mise en évidence expérimentalement, est le comportement non gaussien de la courbe de percée du traceur (qui représente la concentration du contaminant dans l'environnement). En particulier, un grand nombre d'observations rapportent un écart à la loi de Fick, matérialisé par une asymétrie marquée et par une traînée importante. Ces traînées peuvent traduire l'arrivée anticipée d'une fraction du panache de contaminant et l'arrivée tardive d'une autre fraction.

Les interprétations avancées pour expliquer les longues traînées parfois observées s'appuient sur les propriétés intrinsèques de l'un ou l'autre des régimes supposés, et il y a peu de généralités à ce sujet. La difficulté d'avoir une connaissance complète des propriétés du milieu poreux conduit à le caractériser souvent de milieu hétérogène ou complexe. Cette hétérogénéité se trouvant à toutes les échelles et de manière variée, elle influence fortement le déplacement des par-

ticules et rend la migration sensible à ce qu'une moindre perturbation à petite échelle modifie les comportements à grande échelle.

Dans la littérature, il est largement admis que la dynamique de transport dans un milieu possédant la propriété d'hétérogénéité peut être régie par une loi de diffusion anormale [75]. Dans ce contexte, Metzler et Klafter [75] ont introduit l'e.d.p appelée "Time Fractional Fokker Planck Equation" (TFFPE) qui est une extension de l'équation de Fokker-Planck classique. Des équations avec à la fois des dérivées fractionnaires en espace et en temps ont été proposées par Benson et al [76][77] comme par exemple le modèle "Space Fractional Fokker Planck Equation" (SFFPE).

Une autre approche déjà ancienne du transport dans les milieux poreux repose sur l'idée qu'à un instant donné, une fraction (inconnue) de la population de traceur est immobile et ne participe à la dynamique des déplacements qu'à un temps ultérieur. Cette idée très naturelle a donné lieu au modèle MIM [100] qui sépare la population de traceur en deux phases Mobile et Immobile. Ce modèle a permis de reproduire et de mieux comprendre les asymétries de nombreuses observations [41]. Néanmoins, le modèle MIM reste incapable de représenter certaines observations dans lesquelles les comportements des traînées semblent suivre des lois temporelles en inverse d'une puissance du temps $t^{-\gamma}$ (Haggerty et Gorelik [50] et Haggerty et al [49]). En particulier, c'est le cas d'observations en milieux poreux fortement insaturés. Le modèle que nous allons mettre en oeuvre constitue la version fractionnaire du modèle MIM, qui généralise ce dernier et possède des solutions se comportant aux grands temps comme des puissances.

En effet, le modèle MIM fractionnaire vise à reproduire les comportements asymptotiques de la densité de probabilité de contaminants se comportant en loi de puissance du temps. L'équation de Fokker Planck fractionnaire appelée (FFPE) "Fractional Fokker Planck Equation" permet aussi de reproduire le comportement asymptotique de la densité de probabilité des contaminants se comportant comme une loi de puissance. De plus, elle est le sujet d'une littérature abondante. Cette équation de Fokker-Planck contient un paramètre de moins que le modèle MIM fractal, ce qui est intéressant, mais le degré de sophistication d'un modèle dépend aussi du nombre des paramètres. Le modèle MIM fractionnaire pour des temps courts est semblable au modèle d'advection dispersion (ADE) alors qu'aux grands temps il présente les mêmes comportements asymptotiques que l'équation de Fokker-Planck fractionnaire. Pour cette raison il correspond mieux que cette dernière à de nombreuses données, c'est pourquoi il a retenu notre attention.

Tout comme dans le cas du mouvement Brownien évoqué dans le chapitre précédent, le modèle MIM fractionnaire est la limite hydrodynamique d'un modèle de marche aléatoire dans lequel chaque particule effectue une marche au hasard marquée par des temps d'arrêt aléatoires qui modélisent la présence dans le milieu poreux de zones de stagnation. Un tel modèle de marche aléatoire est dit subordonné en temps. Plus précisément, pour chaque marcheur, le temps passé à bouger (ou encore le temps opérationnel) est différent du temps physique t . Ce phénomène fait partie de ce qu'on appelle la sous-diffusion ce qui est un terme général, puisqu'on l'utilise pour le transport chaque fois qu'un second moment n'évolue pas proportionnellement au temps.

En effet, pour bien comprendre les mécanismes fondamentaux mis en jeu dans le phénomène de transport, il convient de se placer à trois niveaux d'échelle :

- Echelle microscopique : à cette échelle, appelée aussi échelle de la particule, le phénomène de transport est modélisé par des marches aléatoires et dans la limite hydrodynamique, comme il y a une correspondance entre les phénomènes à l'échelle microscopique et les phénomènes à l'échelle macroscopique, la marche aléatoire tend vers la loi de transport macroscopique. Les modèles de diffusion normale correspondent à des marches aléatoires accumulant des sauts gaussiens régulièrement espacés dans le temps.
- Echelle macroscopique ou les colonnes du laboratoire : à cette échelle le phénomène de transport est modélisé aussi bien par un processus stochastique que par des équations aux dérivées partielles, représentant l'évolution de sa densité. Ces e.d.p peuvent faire apparaître des opérateurs de dérivation et d'intégration d'ordre entier comme d'ordre fractionnaire, ainsi que des variables et des paramètres représentatifs des grandeurs moyennes au sein du milieu poreux. Ces modèles ont pour vocation d'être appliqués aussi à des échelles plus grandes, comme celles du terrain. Les modèles de diffusion normale donnent à cette échelle le mouvement Brownien et l'équation d'advection dispersion.
- Echelle du terrain : cette échelle est plus grande que les deux autres. Lorsqu'on fait l'extension de l'approche macroscopique au milieu naturel, par exemple le sol, on se heurte à de sérieuses limitations. Le sol n'est jamais homogène et dans l'environnement naturel le caractère aléatoire des conditions aux limites renforce l'aspect stochastique des processus en jeu qu'il faut prendre compte pour adapter le modèle à cette échelle.

On peut donc noter qu'un passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique permet d'établir que ces deux modèles sont liés de manière très étroite,

puisque l'e.d.p régit l'évolution de la densité du processus stochastique auquel elle correspond. Cette étape de démonstration permettant de faire le passage à la limite hydrodynamique sera succinctement reprise, mais le lecteur intéressé aux détails peut consulter la référence [84]. Il est aussi question dans ce chapitre de la résolution des ces équations. La solution analytique et la solution numérique sont les deux méthodes de résolution de ces équations mais la première étant difficile voir impossible dans certains cas, la deuxième reste la meilleure possibilité pour avoir accès aux solutions des équations de manière générale. Après avoir présenté en détail ce modèle MIM, nous passerons aux modèles fractionnaires.

3.2 Le modèle MIM classique

Après avoir rappelé le principe du MIM, nous indiquerons une méthode de simulation numérique.

3.2.1 Principe du MIM

A l'origine, le modèle MIM décrit dans ce paragraphe a été développé par Coats et Smith [24] pour le génie pétrolier, puis adapté aux sols par Van Genuchten et Wierenga [109] et par bien d'autres parmi lesquels Gaudet et al.[41] qui ont étudié les milieux poreux insaturés. L'idée de départ est qu'il existe dans un milieu poreux des pores en cul de sac, donc des zones d'eau stagnante. Comme on l'a dit plus haut, cette idée revient à considérer qu'une fraction de la population de contaminant 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. Sous d'autres présentations, une variante du modèle MIM, le modèle à double milieu, consiste à rapporter ce concept de contaminants mobiles et immobiles aux propriétés du milieu poreux en considérant le milieu poreux comme la superposition de deux continua de porosité et de comportement différent : 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_i les densités de probabilité correspon-

dantes, on a alors

$$P = P_m + P_i \quad (3.1)$$

Une autre implication du concept MIM est la nécessité de modéliser le passage de l'état immobile à l'état mobile. Dans le cadre du modèle MIM classique, ceci est fait en considérant une cinétique du premier ordre entre les populations mobiles et immobiles. Compte tenu de l'équation (3.1) et du fait que la fraction mobile de la population de contaminant est animé d'une dynamique d'advection dispersion, le modèle MIM classique peut se formuler de la manière suivante :

$$\begin{cases} \partial_t P_m + \partial_t P_i = \partial_x(D\partial_x(DP_m - vP_m)) + r \\ \partial_t P_i = \omega(KP_m - P_i) \end{cases} \quad (3.2)$$

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 dans la cinétique considérée. Ceci permet aussi d'écrire une relation entre les densités de probabilités P_m et P_i des populations mobiles et immobiles sous la forme

$$P_m = K\omega \exp(-\omega t) * P_i \quad (3.3)$$

$$P = (Id + \exp(-\omega t) * K\omega)P_m$$

où $(*)$ désigne un opérateur de convolution. Comme il s'applique à des fonctions causales, on parle de convolution "de Laplace" car dans ce cas cette convolution se traduit par la multiplication des transformées de Laplace. A partir des équations (3.1) et (3.3), on peut donner au modèle MIM une forme proche du modèle ADE (1.3) donné dans le premier chapitre.

$$\partial_t P = \partial_x(D\partial_x \mathcal{H}P - v\mathcal{H}P) + r. \quad (3.4)$$

L'opérateur \mathcal{H} est dans ce cas,

$$\mathcal{H} = (Id + K\omega \cdot \exp(-\omega t)*)^{-1} \quad (3.5)$$

où Id est l'opérateur identité.

3.2.2 Simulation numérique du modèle MIM

Pour simuler numériquement la solution de l'équation (3.4), on dispose de deux options. La première consiste à traiter le système (3.2), qui ne fait intervenir que des dérivées d'ordre entier (donc des opérateurs locaux) mais comporte

l'inconnue P_i en plus de l'inconnue P_m . On peut aussi discrétiser l'opérateur \mathcal{H} . L'approximation numérique de ce dernier est basée sur la méthode des trapèzes [27]. L'expression alors obtenue pour $e^{-\omega t} * g$ s'écrit :

$$\frac{1}{\omega^2 \Delta t} \left[g(N\Delta t) e^{-\omega \Delta t} (1 + \omega \Delta t e^{\omega \Delta t} - e^{\omega \Delta t}) + \sum_{m=1}^{N-1} e^{-\omega m \Delta t} g((N-m)\Delta t) \right. \\ \left. \times \left(\frac{e^{\omega^2 \Delta t} + e^{-\omega \Delta t} - 2}{\omega^2 \Delta t} \right) + g(0) \left(e^{-\omega N \Delta t} \frac{e^{\omega \Delta t} - \omega \Delta t - 1}{\omega^2} \right) \right].$$

Ensuite il faut inverser l'opérateur $g \mapsto g + e^{-\omega t} * g$. Pour cela on peut mettre en oeuvre la méthode exposée plus en détail au paragraphe 3.4.5. La version discrète de $\mathcal{H}f = (Id + K\omega \cdot \exp(-\omega t)*)^{-1} f$ est de la forme $\sum_{n=0}^N f((N-n)\Delta t) b_{n,N}$, où les poids s'obtiennent en inversant un opérateur linéaire, lui même construit avec les poids de la discrétisation $K\omega \cdot e^{-\omega t}$.

Les deux méthodes donnent de bons résultats. La première est plus simple et plus rapide. La seconde a pour seul intérêt le fait de s'inscrire dans le même cadre que celle que nous devons développer pour le MIM fractionnaire.

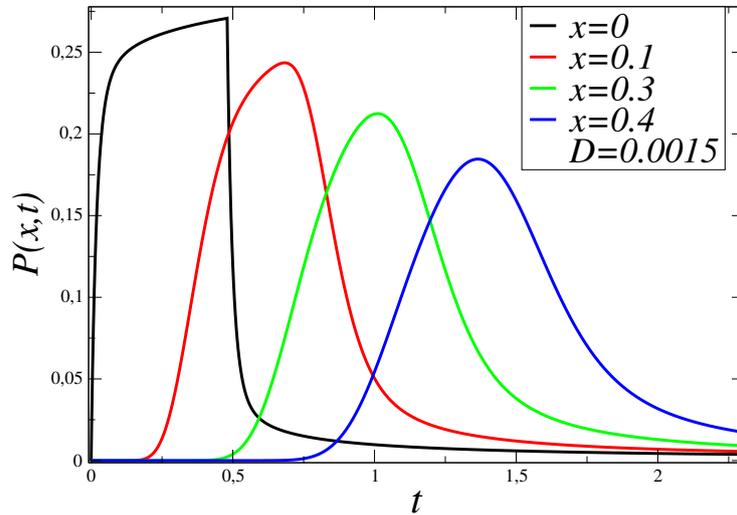


FIGURE 3.1 – Courbes de percée $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM donnés par l'équation (3.4) avec comme condition aux limites en $x = 0$ flux $R(t) = R_0$ pour $t < t_0$, $R(t) = 0$ pour $t > t_0$; on a pris $D = 0.01$, $v = 1$, $K = 1$ et $\omega = 10$

3.2.3 Allure des solutions du Modèle MIM

La figure 3.1 montre un exemple des profils temporels de densité de probabilité, appelés aussi courbes de percée (en anglais Break Through curve (btc)),

qu'on obtient à partir de la résolution du modèle MIM.

Elle met en avant la capacité du modèle MIM à reproduire les formes asymétriques des traînées. Le noyau exponentiel présent au second membre du MIM représente déjà des effets de mémoire. Cependant ils finissent par disparaître aux grands temps : ils disparaissent du comportement asymptotique. Ainsi, ce modèle ne peut pas représenter des traînées observées qui décroissent selon une loi inverse d'une puissance du temps jusqu'à des temps infinis. Un tel comportement est par contre prévu dans la version fractionnaire du modèle MIM qui fait l'objet de la section suivante.

3.3 Modèles fractionnaires

Dans un milieu poreux hétérogène les particules de fluide et de contaminant sont contraintes de suivre le chemin complexe de l'espace poral. Ce chemin, suivant la géométrie du milieu poreux peut présenter des pores sans issue ou de grands pores. Dans les grands pores, il peut y avoir des chemins préférentiels capables d'emporter la particule plus loin et plus vite, c'est à dire que la particule parcourra en moyenne plus de chemin que dans le cas normal gouverné par la loi gaussienne : ce phénomène pourrait donner de la super-diffusion. Dans le milieu poreux, la dynamique des particules de contaminant peut aussi être dominée par la présence de pièges capables de les immobiliser très longtemps, c'est la sous-diffusion. Il est aussi possible que les deux processus, sous-diffusion et super-diffusion, coexistent et le déplacement de la particule dépendrait de cette coexistence. Nous n'abordons cependant pas cette dernière possibilité, et nous mettons l'accent sur les effets de mémoire correspondant à des retards aléatoires imposés aux particules de traceur quand elles sont piégées par des sites qui les retiennent pour des durées très différents. Auparavant, disons cependant quelques mots des équations fractionnaires en espace.

3.3.1 Modèle fractionnaire en espace

A partir du moment où les fluctuations d'un champ de vitesse complexe sont représentées par des déplacements aléatoires des particules de fluide et de traceur, il n'y a pas de raison pour que ces déplacements suivent une statistique gaussienne. L'addition d'un grand nombre de déplacements indépendants de norme nulle, identiquement distribués mais sans variance finie est correctement représentée par un processus stochastique prenant à l'instant t une valeur distribuée comme [56] $\sigma t^{\frac{1}{\alpha}} S_{\alpha}(1, \beta, 0)$. Ici, $S_{\alpha}(1, \beta, 0)$ est une variable aléatoire stable

d'exposant de stabilité α et de paramètre d'asymétrie β . Cette notation a été définie au paragraphe 2.2.5. La densité P d'un tel processus vérifie

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = (\lambda_+(\beta)D_{-\infty, x}^\alpha + \lambda_-(\beta)D_{x, +\infty}^\alpha)P(x, t) - v\frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \quad (3.6)$$

où $\lambda_+(\beta)$ et $\lambda_-(\beta)$ dépendent du coefficient d'asymétrie β de $S_\alpha(1, \beta, 0)$. Lorsque cette loi est symétrique, c'est à dire pour $\beta = 0$ ses coefficients sont égaux. Dans ce cas particulièrement simple la transformée de Laplace Fourier des solutions fondamentales de (3.6) est donnée par

$$\tilde{P}(k, s) = \frac{1}{s + ivk + \lambda_\alpha |k|^\alpha}, \quad (3.7)$$

L'équation (3.6) a été étudiée par de nombreux auteurs, cités dans la thèse [82] où est détaillé un schéma de différences finies approprié. On doit tout à fait s'attendre à ce que des dérivées fractionnaires en espace puissent intervenir dans la dispersion au sein des milieux complexes. Cependant l'objectif principal de la présente thèse concerne les équations fractionnaires en temps. La plus célèbre d'entre elle est l'équation de Fokker-Planck fractionnaire

3.3.2 L'équation de Fokker-Planck fractionnaire

Le mouvement Brownien en présence d'un champ de force extérieure est régi par l'équation de Fokker-Planck classique évoquée au chapitre II. Dans un milieu non-homogène où la diffusion est anormale ce modèle classique de Fokker-Planck se révèle inopérant. Pour décrire le transport anormal en présence d'un champ de force extérieure, Metzler et Klafter [75] ont introduit la version fractionnaire en temps de l'équation de Fokker-Planck (TFFPE, "time-fractional Fokker-Planck").

$$\partial_t P = {}_0D_{0,t}^{1-\gamma}(\partial_x F(x) + D_\alpha \frac{1}{2} \partial_x^2)P(x, t) \quad (3.8)$$

où ${}_0D_{0,t}^{1-\gamma}$ est la dérivée fractionnaire de Riemann-Liouville. De plus, D_α est 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 (3.8) permet de modéliser la diffusion anormale dans un milieu poreux complexe qui impose des contraintes faisant apparaître une corrélation temporelle à toutes les échelles.

3.3.3 Le modèle MIM fractionnaire en temps

Une version fractionnaire du modèle MIM, le MIM fractal, a été proposée par Schumer [8] pour tenir compte de données de terrain qui font apparaître des comportements incompatibles non seulement avec l'ADE mais aussi avec le MIM et avec l'équation de Fokker-Planck fractionnaire ci-dessus. Certains auteurs avaient remarqué que des données avec des puissances sont mieux décrites en introduisant des fonctions mémoires comme dans (3.3) mais avec une puissance à la place de l'exponentielle. Le modèle MIM fractal peut s'écrire sous la forme de l'équation (3.4), mais l'opérateur \mathcal{H} s'écrit cette fois-ci sous la forme

$$\mathcal{H} = (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1} \quad (3.9)$$

où Λ est un facteur pouvant tenir compte de la probabilité pour une particule de contaminant d'être piégée. Nous allons montrer comment (3.9) s'introduit dans l'équation d'évolution.

3.3.3.a Mise en forme mathématique du modèle MIM fractionnaire

Rappelons que (1.3) représente l'évolution de la densité de probabilité d'une population de particules se déplaçant suivant un mouvement Brownien dans un champ de vitesse moyenne v . Ce mouvement Brownien peut être approché en faisant effectuer aux particules une marche aléatoire faite d'une suite de sauts instantanés régulièrement répartis dans le temps et d'amplitudes distribuées suivant la loi de Gauss. Dans le même ordre d'idée, nous montrerons aussi que le MIM fractionnaire exprime à l'échelle macroscopique la densité d'une population de particules effectuant une marche aléatoire caractérisée par des sauts comme ci-dessus, mais séparés par des déplacements convectifs et des immobilisations de durée aléatoire. Ces durées seront de plus supposées distribuées selon une loi stable pour fixer les idées. On pourrait en fait supposer n'importe quelle loi pourvu que sa densité se comporte comme une puissance du temps, aux grands temps. Comme dans le cas de MIM original, les particules peuvent, à chaque instant, être en phase mobile ou en phase immobile.

Nous supposons donc que les trajectoires des particules sont des réalisations d'un processus aléatoire $x(t)$. Alors la probabilité de trouver une particule donnée entre $x - \frac{dx}{2}$ et $x + \frac{dx}{2}$ à l'instant t est $P(x, t)dx$: la densité de probabilité de la variable aléatoire $X(t)$ est $P(x, t)$. Si on demande, en plus, à la particule d'être mobile (ou immobile) à l'instant t , on fait intervenir P_m ou P_i . Au

lieu de s'intéresser à une particule donnée, on peut s'intéresser à l'ensemble de particules et à la moyenne du nombre de particules entre $x - \frac{dx}{2}$ et $x + \frac{dx}{2}$ divisée par le nombre total : c'est encore $P(x, t)dx$. C'est plus commode de penser à une particule donnée pour les raisonnements. Par contre les mesures de concentrations correspondent au second point de vue.

Nous allons utiliser le premier pour étudier une marche aléatoire présentant sur son histogramme des "ailes" ou des traînées faisant apparaître des puissances. Nous allons montrer que l'équation aux dérivées partielles qui régit le flux des particules en mouvement contient un opérateur fractionnaire. Pour cela, nous allons partir d'un ensemble de particules effectuant une marche au hasard formée d'une succession de déplacements avec une échelle de temps τ et une échelle de longueur l . Nous supposons que cette marche aléatoire tend vers un processus stochastique quand l et τ tendent vers 0. C'est ce qu'on appelle passer à la limite hydrodynamique. Notre objectif est de déterminer l'e.d.p qui régit l'évolution de la densité $P(x, t)$ de ce processus limite. Nous y parviendrons après avoir établi une relation entre P_m et P_i .

Ce passage à la limite revient à adopter des unités de longueur et de temps grandes devant l et τ . Plus précisément, à petite échelle, nous supposons que chaque particule de contaminant effectue une succession de déplacements, tous associés à une échelle de temps τ . Le nième est la somme d'un déplacement égal à $v\tau$ (v étant la vitesse d'advection, ou vitesse de pore) et d'un saut gaussien lN_n dont la longueur lN_n est distribuée comme lN . De plus les N_n sont indépendants. Ici l est une longueur caractéristique des sauts, tandis que N représente une loi normale centrée réduite, de densité ϕ . Donc la densité ϕ_l de lN vérifie la relation :

$$\phi_l(y) = \frac{1}{l}\phi\left(\frac{y}{l}\right), \quad (3.10)$$

puisque la probabilité pour qu'un saut ait une amplitude lX entre x et $x + dx$ est

$$\mathcal{P}\left(\frac{x}{l} < X < \frac{x + dx}{l}\right) = \phi\left(\frac{x}{l}\right)\frac{dx}{l} = \frac{dx}{l}\phi\left(\frac{x}{l}\right). \quad (3.11)$$

Ce modèle de déplacements est en tout point identique à celui qu'on utiliserait dans une marche au hasard représentant la diffusion normale, et tendant vers le mouvement Brownien pour $\tau \rightarrow 0$.

Dans le cas de la diffusion normale, ces déplacements sont séparés par des durées identiques égales à l'échelle de temps τ comme sur la figure 3.2. Le

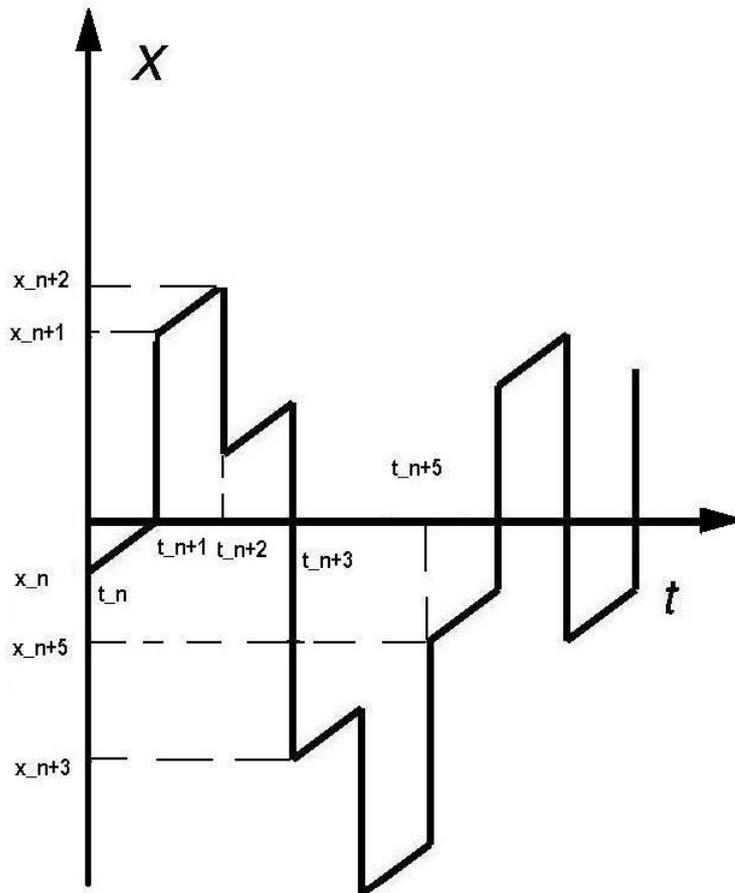


FIGURE 3.2 – Représentation de quelques étapes de marche aléatoire approchant le mouvement Brownien avec une vitesse moyenne uniforme

modèle MIM fractionnaire correspond au contraire à une situation dans laquelle le n ème saut (effectué à la fin d'une étape de durée τ , dévolue à la convection) est suivi par un temps d'arrêt, comme si la particule tombait dans un piège. Ceci est illustré par la figure 3.3. De plus elle peut y rester pour une durée aléatoire $W_n(\Lambda\tau)^{\frac{1}{\gamma}}$, que W_n étant une variable aléatoire indépendante de toutes les autres c'est à dire des $W_{n'}$ et de tous les N_m , et distribuée selon une loi de Lévy d'exposant γ avec $0 < \gamma < 1$. Pour être précis on a besoin de donner sa transformée de Laplace, qui est e^{-s^γ} . La densité ψ de W_n se comporte comme $t^{-1-\gamma}$. La probabilité pour que W_n soit supérieure à t joue un rôle important et s'écrit :

$$\mathcal{P}(W > t) = \int_t^\infty \psi(\theta) d\theta \equiv \Psi(t) \quad (3.12)$$

on en déduit

$$\mathcal{P}((\tau)^{\frac{1}{\gamma}}W > t) = \Psi\left(\frac{t}{\Lambda\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) = \int_t^\infty \frac{1}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}} \psi\left(\frac{t'}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) dt' \equiv \Psi_{\Lambda,\tau}(t) \quad (3.13)$$

Cette fonction que nous notons $\Psi_{\Lambda,\tau}(t)$, est appelée probabilité de survie.

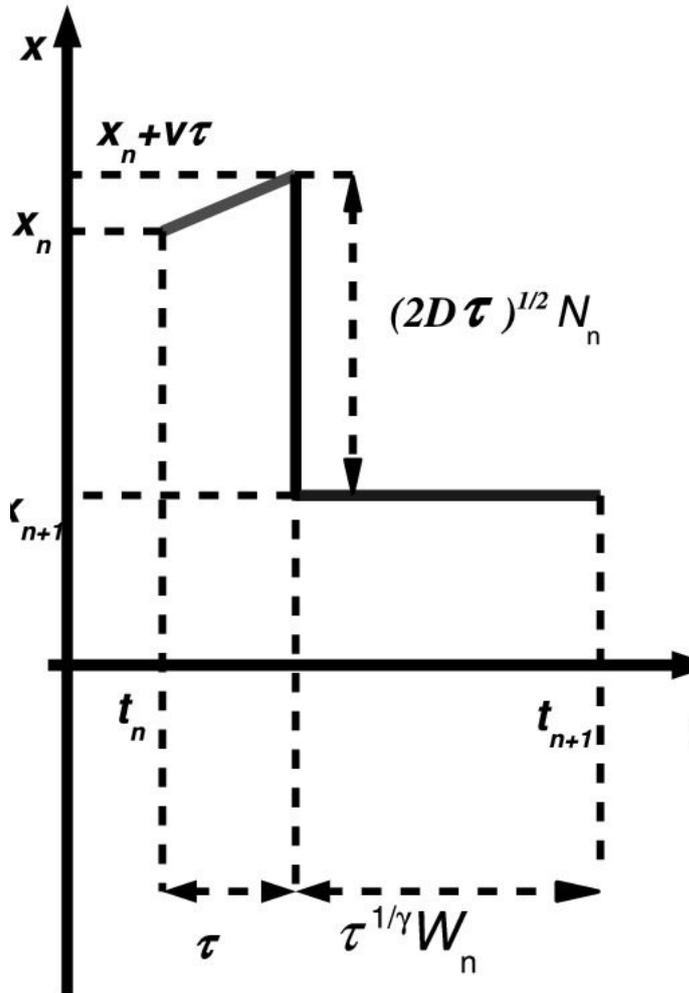


FIGURE 3.3 – Représentation d'une étape d'une marche aléatoire combinant des sauts instantanés, de l'advection et des immobilisations et approchant le fMIM.

3.3.3.b Densités mobiles et immobiles

Suivons une particule donnée au cours de cette marche au hasard, et partie de l'origine à l'instant $t = 0$ et notons $P_m^\tau(x, t)$ et $P_i^\tau(x, t)$ les densités donnant la probabilité de la trouver mobile ou immobile au voisinage de x .

Nous allons établir des relations entre $P_m^\tau(x, t)$ et $P_i^\tau(x, t)$, les densités de particules à l'échelle microscopique, c'est à dire à celle de la marche au hasard. Puis, nous passerons à la limite hydrodynamique en faisant tendre τ vers 0.

Nous admettrons qu'alors $P_m^\tau(x, t)$, $P_i^\tau(x, t)$ et $P^\tau = P_m^\tau + P_i^\tau$ ont pour limites P_m, P_i et P .

Pendant une phase mobile plusieurs scénarios sont envisageables. On peut supposer que la particule effectue un déplacement chaque τ , durant l'intervalle de temps $[t - \tau, t]$, le saut peut avoir lieu au debut, en plein temps de mobilité, ou à la fin de cette période, distribué uniformément dans cet intervalle. On peut supposer aussi que le saut n'est pas instantané. Et la fin du déplacement ne dépend pas de ces scénarios ni affecté par la phase immobile les densités de particules à l'échelle macroscopique. Toutes ces possibilités convergent vers une même limite lorsque $\tau, l \rightarrow 0$. Pour des raisons de simplicité, on suppose que la particule effectue des sauts instantanés pendant l'intervalle de temps τ qui a lieu à la fin de chaque période de mobilité [84].

Dans le but d'établir une relation entre les densités de probabilité $P_m^\tau(x, t)$ et $P_i^\tau(x, t)$, nous faisons intervenir deux grandeurs auxiliaires :

- p_j , la densité de probabilité de juste arriver à l'issue d'un saut en la position x à l'instant t
- p_m , la densité de probabilité d'être juste libérée au point x à l'instant t .

Nous reproduisons (sous forme simplifiée) la démarche de [84] conduisant à la relation (3.8) et à l'expression du flux de particules au point x . Sauf juste après son injection dans le système, une particule a deux alternatives en x à t si elle est mobile : elle peut terminer la mobilité à $t - t'$ avec $0 < t' < t$ sans être immobilisée ou elle peut être immobilisée puis relâchée à une certaine distance vt' de x . Ces deux alternatives sont suivies par une étape de convection qui prend fin lorsque la particule est à t . La densité de probabilité pour que notre particule soit mobile au voisinage de x s'écrit :

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

En ajoutant le terme source $r(x, t) = \delta(x)\delta(t)$

$$P_m^\tau(x, t) = \int_0^\tau \mathcal{T}_{t'}^{(t)} \mathcal{T}_{vt'}^{(x)} [p_m + r](x, t) dt' \quad (3.14)$$

où $\mathcal{T}_{t'}^{(t)}$ et $\mathcal{T}_{vt'}^{(x)}$ sont respectivement des opérateurs de translation en temps et en espace (leur amplitude est lue en indice).

La densité de probabilité pour que notre particule soit immobile au voisinage de x s'écrit :

$$P_i^\tau(x, t) = \int_0^t p_j(x, t) \Psi\left(\frac{t - t'}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) dt' \quad (3.15)$$

L'expression de p_j est

$$p_j(x, t) = \int_y p_m(x - y - v\tau, t - \tau) \phi_l(y) dy \quad (3.16)$$

parce qu'un saut se terminant en x et ayant pour amplitude y est forcément parti de $x - y$. De même une expression de p_m est

$$p_m(x, t) = \int_0^t p_j(x, t - t') \frac{1}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}} \psi\left(\frac{t'}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) dt' \quad (3.17)$$

parce qu'une étape mobile commençant à l'instant t suit une étape immobile, et que si cette dernière a eu pour durée t' , elle a forcément débuté à l'instant $t - t'$.

La densité P_i^τ est par conséquent donnée par une convolution

$$P_i^\tau(x, t) = \Psi\left(\frac{t - t'}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) * (\mathcal{T}_{v\tau}^{(x)} \mathcal{T}_\tau^{(t)} [p_m + r] \star \phi_l)(x, t) \quad (3.18)$$

où $*$ et \star désignent respectivement la convolution de deux fonctions causales (c'est à dire l'intégrale porte sur $[0, t]$) et la convolution tout court (avec une intégrale portant sur tout \mathbb{R} entier).

Pour $t > \tau$, on peut écrire

$$\frac{P_m^\tau(x, t)}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mathcal{T}_{t'}^{(t)} \mathcal{T}_{vt'}^{(x)} p_m dt' \quad (3.19)$$

où apparaît une moyenne. Nous réalisons ainsi en quelque sorte une approximation de $\mathcal{T}_{t'}^{(t)} \mathcal{T}_{vt'}^{(x)} p_m$ sur l'intervalle τ . Ainsi, on montre [84] que p_m peut être approchée par $\frac{P_m^\tau(x, t)}{\tau}$ dans l'espace $L^p((0, T), \mathcal{X})$:

$$\mathcal{T}_\tau^{(t)} \mathcal{T}_{v\tau}^{(x)} p_m(x, t) \simeq \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mathcal{T}_\tau^{(t)} \mathcal{T}_{v\tau}^{(x)} p_m(x, t) dt' \quad (3.20)$$

On a toutefois pas besoin de cette approximation pour écrire

$$P_i^\tau(x, t) = \int_0^t \Psi\left(\frac{t - t'}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) \phi_l \star \left[\frac{P_m(x, t)}{\tau} + \int_0^\tau [\mathcal{T}_{v\tau}^{(x)} \mathcal{T}_\tau^{(t)} - \mathcal{T}_{vt'}^{(x)} \mathcal{T}_{t'}^{(t)}] p_m(x, t) dt' \right] \quad (3.21)$$

Dans cette relation apparaît l'opérateur $R^{l, \tau}$ défini par

$$R^{l, \tau} g = \frac{1}{\tau} \times \Psi\left(\frac{t - t'}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}}\right) * \phi_l \star g.$$

L'équation (3.21) s'écrit alors

$$P_i^\tau(x, t) = R^{l, \tau} P_m^\tau(x, t) + \int_0^\tau (\mathcal{T}_{v\tau}^{(x)} \mathcal{T}_\tau^{(t)} - \mathcal{T}_{vt'}^{(x)} \mathcal{T}_{t'}^{(t)}) p_m(x, t) dt' \quad (3.22)$$

Le second terme du second membre tend vers 0 quand τ tend vers 0, d'après [84]. Dans cette référence, on montre aussi que $R^{l,\tau} P_m^\tau(x, t)$ tend vers $\Lambda P_m^\tau(x, t)$ quand τ tend vers 0. C'est parce que $\tau^{-1} \Psi_{\Lambda, \gamma}$ se décompose selon

$$\tau^{-1} \Psi_\gamma = \Lambda \frac{t^{-\gamma}}{\Gamma(1-\gamma)} + \tau^{\frac{1}{\gamma}-1} \left(\frac{1}{\tau^{\frac{1}{\gamma}}} \mathcal{K}\left(\frac{t}{\tau}\right) \right) \quad (3.23)$$

où la fonction \mathcal{K} est intégrable. On démontre dans [84] que pour cette raison le second terme de (3.23) est le noyau d'une convolution qui tend vers 0 lorsque τ tend vers 0. Il ne reste alors plus que le premier terme, qui est exactement Λ multiplié par le noyau de l'intégrale fractionnaire $I_{0,t}^{1-\gamma}$ définie par la relation (2.23). On obtient ainsi à la limite quand $\tau \rightarrow 0$ la relation suivante

$$P_i(x, t) = \frac{\Lambda}{\Gamma(1-\gamma)} t'^{-\gamma} * P_m(x, t) = \Lambda \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t t'^{-\gamma} P_m(x, t-t') dt' \quad (3.24)$$

soit

$$P_i(x, t) = \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma} P_m(x, t) \quad (3.25)$$

Cette relation permet de relier $P(x, t)$ à $P_m(x, t)$ puisque la probabilité pour une particule d'être en x à t s'écrit :

$$P = P_i + P_m \quad \text{donc}$$

$$P(x, t) = (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma}) P_m.$$

Or, on montre dans [70] que l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})$ est inversible dans des espaces appropriés. La relation (3.9) annoncée plus haut est donc démontrée :

$$P_m(x, t) = (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1} P(x, t)$$

Pour aboutir à une équation d'évolution pour la densité P , il reste à déterminer le flux de particules en un point.

3.3.3.c Flux de traceurs et équations

On démontre de [84] que ce flux s'obtient en appliquant la loi de Fick à la densité mobile P_m , à condition de plus que les échelles de longueur l et de temps τ vérifient la relation $l^2 = 2D\tau$, D représentant un coefficient de diffusion, ou plutôt ici une dispersion. Cette loi de Fick s'écrit

$$Flux(x, t) = -(\nabla D - v) P_m = -(\nabla D - v) (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1} P(x, t) \quad (3.26)$$

Elle est démontrée en détail dans [84] en partant du bilan de marcheurs traversant x vers la droite ou vers la gauche, dans le cadre de la marche au hasard. Ensuite on fait tendre τ vers 0. Compte tenu de cette expression sur les flux, la conservation de la masse présente dans $[x - \frac{dx}{2}, x + \frac{dx}{2}]$ implique

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x (\partial_x D (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1} P(x, t) - v (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1} P(x, t)) + r \quad (3.27)$$

Cette équation (3.27) modélise l'évolution de la densité de contaminant dans un milieu poreux dans lequel on suppose que des sites d'adsorption imposent des immobilisations aléatoires. De plus, les particules peuvent être immobilisées pour des durées longues. La présence d'une loi de puissance implique que l'histoire passée de chaque particule de contaminant est oubliée très lentement dans le temps plus l'exposant γ est petit, la probabilité pour qu'une étape immobile dure longtemps augmentent, et finalement plus la mémoire est longue.

Dans l'équation (3.27), r représente un terme source et Λ a été choisi comme un simple facteur d'échelle pour dilater arbitrairement l'ensemble des durées des immobilisations. Nous aurions tout aussi bien pu incorporer dans ce paramètre la probabilité pour une particule d'être piégée lorsqu'il termine un saut. Dans [84] on traite le cas où cette probabilité dépend de x . Le paramètre γ est un paramètre relatif à l'hétérogénéité (statistique) des variables aléatoires distribuant les durées des arrêts successifs. Il peut être lié à l'hétérogénéité du milieu poreux considéré, ou à un mécanisme plus complexe, comme c'est peut être le cas dans les milieux non saturés. Le paramètre γ varie entre 0 et 1. L'opérateur $I_{0,t}^{1-\gamma}$ représente une intégrale fractionnaire d'ordre $(1 - \gamma)$ suivant la définition (2.23), et dans laquelle la borne inférieure est prise égale à zéro ($a = 0$).

L'équation (3.27) peut être mise sous plusieurs formes, équivalentes lorsque les paramètres (D, v, Λ) sont indépendants à la fois de x et de t . En vertu de (3.25), on voit immédiatement que (3.27) équivaut à

$$\partial_t P_m(x, t) + \Lambda D_{0,t}^\gamma P_m = \partial_x (\partial_x D P_m - v P_m) + r \quad (3.28)$$

où intervient la dérivée de Riemann-Liouville d'ordre γ .

Une autre forme du modèle MIM fractionnaire, équivalente aussi quand les paramètres D et v sont constants, est

$$\partial_t P(x, t) + \Lambda \partial_t^\gamma P(x, t) = \partial_x (\partial_x D P(x, t) - v P(x, t)) + (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma}) r \quad (3.29)$$

L'opérateur ∂_t^γ est la dérivée de Caputo définie par l'équation (2.48). Rappelons ici que lorsque le paramètre γ devient égal à 1, nous retrouvons une

dérivée temporelle ordinaire. Si de plus, nous fixons $\Lambda = 0$, alors nous retrouvons le modèle ADE avec un terme source ce qui est normal puisque la marche au hasard ci-dessous correspond alors à l'équation d'advection diffusion. Cette dernière équation est un cas particulier de (3.29) ou (3.30), et pas un modèle fondamentalement différent.

Comme la convolution de noyau $\omega e^{-\omega t}$ est une approximation de l'identité lorsque ω est grand, l'équation (3.29) pour $\gamma = 1$ a la même structure que la limite (3.2) lorsque $\omega \rightarrow \infty$.

Sous sa forme (3.27) au (3.29) le MIM fractal ressemble à l'équation de Fokker-Planck fractionnaire, (FFPE), Barkai [4], plus connue

$$\partial_t P(x, t) = \partial_x^2 D_\alpha D_{0,t}^{1-\gamma} P(x, t) - \partial_x (v D_{0,t}^{1-\gamma} P(x, t)) + r \quad (3.30)$$

et évoquée au paragraphe 3.3.2, où D_α est un paramètre qui n'a pas tout à fait la dimension de D , mais celle de $\frac{L^2}{T^\gamma}$. Les solutions de ces deux équations ont le même comportement asymptotique en $t^{-\gamma-1}$ lorsque $t \rightarrow \infty$, d'après Schumer [8] du moins, si $r = \delta(t)$. Ce comportement asymptotique est illustré en coordonnées logarithmiques par figure 3.9. Elles diffèrent cependant aux temps courts ou aux temps intermédiaires. Aux temps courts, les solutions du fMIM ressemblent à celle de l'équation d'advection dispersion (ADE). D'après cette référence, il faut attendre des temps de l'ordre $(\frac{3}{\Lambda})^{\frac{1}{1-\gamma}}$ pour que les solutions de ces équations se ressemblent.

Signalons encore qu'une des difficultés que l'on rencontre quand on étudie le phénomène de transport de contaminants réside dans la recherche des solutions analytiques des équations aux dérivées partielles incluant des opérateurs non locaux qui le gouvernent. Les solutions analytiques sont limitées à des classes de conditions initiales et de conditions aux limites. Les méthodes numériques restent donc le seul moyen général pour décrire les solutions du fMIM. Avant de décrire des méthodes fiables pour représenter numériquement les solutions de fMIM, nous présentons un exemple simple qui donne une expression analytique des solutions de fMIM dans un cas particulier de conditions initiales et aux limites. Ce modèle permet de tester l'efficacité du schéma numérique décrit par la suite.

3.3.3.d Les solutions du modèle MIM

Exemple F_3

Solution analytique : Soient $C(x, 0) = e^{\frac{v}{2D}x} \sin(\pi x)$ une distribution initiale et $C(0, t) = C(1, t) = 0$ les conditions aux limites. L'évolution de $C(x, t)$ est régie

par (3.29). Les solutions analytiques s'obtiennent par la méthode de séparation de variables appliquée à cette équation. On obtient par cette méthode la solution exacte égale à

$$P(x, t) = e^{\frac{v}{2D}x} \frac{\sin(\pi x)}{\pi} \int_0^\infty e^{-tr} \frac{\mathbb{P} \Lambda r^{\gamma-1} \sin(\gamma\pi)}{(\mathbb{P} + \mathbf{r})^2 + \Lambda^2 \mathbf{r}^{2\gamma} - 2(\mathbb{P} + \mathbf{r}) \Lambda r^\gamma \cos(\gamma\pi)} \quad (3.31)$$

où \mathbb{P} est une constante. Si $v = 0$ on a

$$P(x, t) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi} \int_0^\infty e^{-tr} \frac{\mathbb{P} \Lambda r^{\gamma-1} \sin(\gamma\pi)}{(\mathbb{P} + \mathbf{r})^2 + \Lambda^2 \mathbf{r}^{2\gamma} - 2(\mathbb{P} + \mathbf{r}) \Lambda r^\gamma \cos(\gamma\pi)} \quad (3.32)$$

Cette solution exacte, comparée à la solution de la version discrétisée de (3.29) (vérifiant les mêmes conditions initiales et aux limites) est représentée sur la figure 3.4.

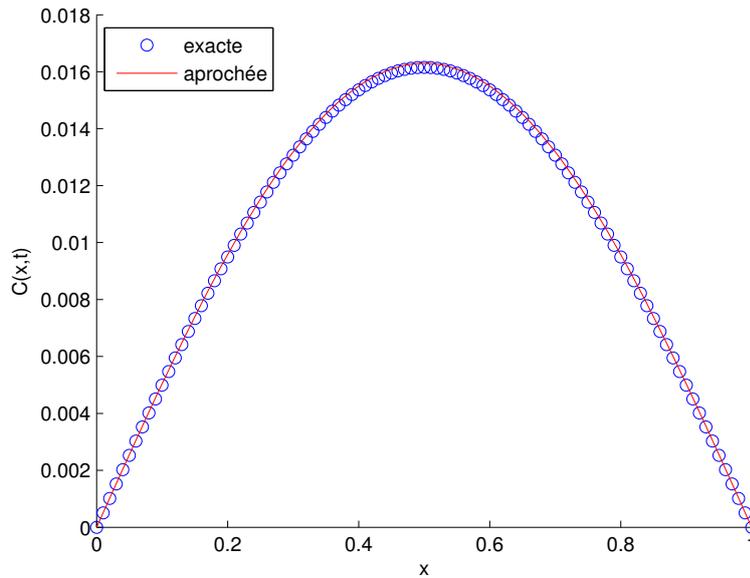


FIGURE 3.4 – Profil de $C(x, t)$ lorsque $v = 0$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.5$; conditions aux limites $C(0, t) = C(1, t) = 0$

Exemple plus appliqué dans le cas d'un flux imposé en 0

Le milieu poreux considéré est une colonne de laboratoire de longueur L auquel on a appliqué un flux $R(0, t)$ en un endroit donné. La densité de traceur dans la colonne est une fonction $P(x, t)$ de l'abscisse x avec $0 < x < L$. Si on veut la relier à la concentration $C(x, t)$, on a $P(x, t) = C(x, t)\theta$ où θ représente la portion de l'espace poral occupée par le solvant. Soit $F(x, t)$ le flux de particules qui traverse la colonne à l'abscisse x . La dispersion dans le milieu est

exprimée par l'équation (3.27) qui généralise la loi de Fick, modifiée à cause du comportement de flux (3.26)

$$F(x, t) = (D\nabla - v)(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1}P(x, t),$$

L'équation (3.26) donne un flux de la densité $P(x, t)$ par l'intermédiaire de l'opérateur $(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\lambda})^{-1}$. La source d'alimentation est un créneau utilisé souvent dans des expériences en laboratoire. Cela consiste à injecter dans la colonne à un endroit fixé pendant un temps bien limité un flux constant de particules de contaminant.

Dans ces conditions, l'obtention d'une solution exacte est quasiment impossible. Nous faisons recours à des méthodes numériques pour résoudre ce problème, bien que ceci demande des efforts de calculs importants. Nous verrons plus loin que la marche au hasard qui nous a permis de démontrer la relation (3.21) entre P_m et P , et de déterminer le flux de particules, permet aussi de simuler l'équation (3.29) et de vérifier la qualité de sa discrétisation. Passons à la discrétisation des opérateurs fractionnaires et d'ordre entier en appliquant les définitions données au chapitre II.

3.4 Principe de la solution numérique des diverses formulations du fMIM

Une partie de notre travail consiste à mettre en oeuvre des outils numériques fondés sur les différences finies pour résoudre (3.27) ou (3.29). Une étape importante est la discrétisation des opérateurs fractionnaires présents dans les équations. Selon la formulation choisie, on doit discrétiser la dérivée de Caputo ou celle de Riemann-Liouville, ou l'opérateur $\mathcal{H} = (Id + \Lambda I_{0,1}^{1-\gamma})^{-1}$.

Il faut d'autre part combiner ceci avec la discrétisation des dérivées spatiales.

3.4.1 La dérivée de Caputo ∂_t^γ

Pour $0 < \gamma < 1$ sa définition est

$$\partial_t^\gamma f(x, t) = I_{0,t}^{1-\gamma} \partial_t f(x, t)$$

D'après Diethelm [27], une approximation d'ordre $2 - \gamma$ de $\partial_t^\gamma f(x, t = n\Delta t)$ est

$$\frac{\Delta t^{-\gamma}}{\Gamma(2 - \gamma)} \sum_{i=0}^n a_{i,n} f(x, (n - i)\Delta t - (n - i)\Delta t f(x, 0+))$$

avec

$$\begin{aligned}
a_{0,n} &= 1 \\
a_{i,n} &= (n+i)^{1-\gamma} - 2i^{1-\gamma} + (n-i)^{1-\gamma} \quad \text{pour } 0 < i < n \\
a_{n,n} &= (1-\gamma)n^{-\gamma} - n^{1-\gamma} + (n-i)^{1-\gamma}
\end{aligned}$$

3.4.2 La dérivée de Riemann-Liouville

Elle peut être discrétisée en utilisant l'approximation de Grünwald-Letnikov

$$(D_{0,t}^\gamma u) = \sum_{k=0}^m A_p(\gamma, k) u((m-k)\Delta t) \quad (3.33)$$

pour $t = m\Delta t$, et A_p représente le poids.

3.4.3 Discrétisation de $\mathcal{H} = (Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1}$

Après une brève description de la discrétisation de \mathcal{H} nous détaillons la méthode semi-implicite utilisée pour discrétiser (3.29).

3.4.4 L'opérateur \mathcal{H}

L'opérateur \mathcal{H} s'obtient en inversant $(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})$, et ce dernier présente la structure d'une convolution. L'inversion reviendra à celle d'une matrice triangulaire. Il faut d'abord discrétiser l'intégrale fractionnaire $I_{0,t}^{1-\gamma}$ elle-même. Pour $I_{0,t}^{1-\gamma} f(x, N\Delta t)$, on dispose de l'approximation

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta t^{-\gamma}}{\Gamma(2-\gamma)} &\left(\sum_{i=0}^{N-1} W_n(f(x, (N-n)\Delta t) + W'_N f(x, 0)) \right) \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} W_n f(x, (N-n)\Delta t) + W'_N f(x, 0)
\end{aligned} \quad (3.34)$$

avec

$$\begin{aligned}
W_0 &= 1 \\
W_n &= (n+1)^{1+\alpha} - 2n^{1+\alpha} + (n-1)^{1+\alpha} \\
\text{et } W'_N &= (\alpha+1)N^\alpha - N^{\alpha+1} + (N-1)^{\alpha+1}
\end{aligned}$$

qui est d'ordre deux, voir Diethelm [27]. 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 $I_{0,t}^\gamma$. La qualité de cette approximation est vérifiée comme le montrent les figures 3.5 et 3.6 ci-dessous. La solution exacte est donnée par la formule suivante :

$$I_{0,t}^\gamma f(x,t) = \frac{\Gamma(1+\alpha)}{\Gamma(\gamma+\alpha+1)} t^{\alpha+\gamma} \quad (3.35)$$

Pour $f(t) = t^\alpha$ avec $\alpha = 0.5$ on a

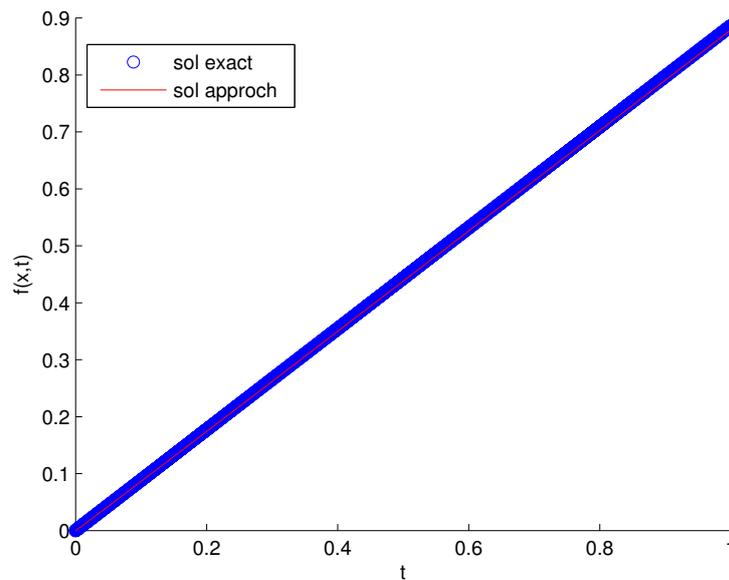


FIGURE 3.5 – La solution approchée et la solution exacte sont en accord, $\gamma = 0.5$, $\alpha = 0.5$

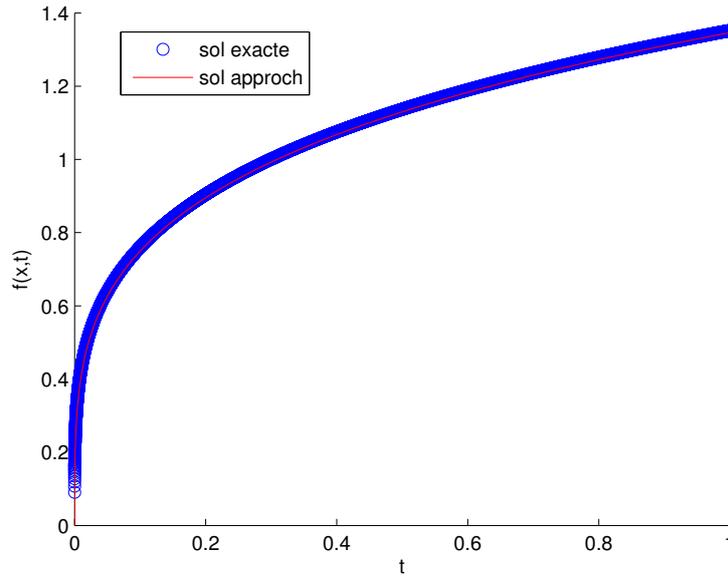


FIGURE 3.6 – La solution approchée et exacte sont en accord, $\gamma = 0.5$, $\alpha = 0.25$

3.4.5 L'inversion de \mathcal{H}

L'image $(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1}g(t)$ n'est autre que la fonction f vérifiant

$$(Id + \Lambda I_{0,t}^{1-\gamma})^{-1}f(t) = g(t) \quad \forall t > 0.$$

Ceci s'écrit

$$(1 - W_0)f(N\Delta t) + \sum_{n=1}^{N-1} W_n f((N-n)\Delta t) + W'_N f(0) = g(N\Delta t) \quad \forall N > 0$$

$$\text{donc on a } f(N\Delta t) = \sum_{n=0}^{N-1} B_n g((N-1)\Delta t) + B'_N g(0),$$

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 :

$$\begin{aligned} Y_0 &= W_0 Z_0 \\ &\vdots \\ Y_n &= \sum_{j=0}^n W_j Z_{n-j} \quad \text{pour } n < N. \\ &\vdots \\ Y_N &= \sum_{j=0}^{N-1} W_j Z_{n-j} + W'_N Z_0 \end{aligned}$$

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

$$\sum_{k=0}^N \mathcal{B}_{i,k}^N \mathcal{W}_{k,i}^N = 1 \quad \text{s'écrit tout simplement} \quad \mathcal{B}_0 W_0 = 1$$

Chaque relation

$$\sum_{k=0}^n \mathcal{B}_{0,k}^N \mathcal{W}_{k,n}^N = 0 \quad \text{avec} \quad 1 \leq n < N$$

s'écrit

$$B_0 W_n + \dots + B_n W_0 = 0$$

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 $\sum_{k=0}^N \mathcal{B}_{0,k}^N \mathcal{W}_{k,N}^N = 0$ qui s'écrit

$$B_0 W_N' + B_1 W_{N-1}^1 + \dots + B_{N-1} W_1 + B_N W_0 = 0.$$

C'est facile à programmer, et le calcul est rapide. Quand on incrémente N , pour passer d'un pas de temps au suivant, les B_n pour $n < N$ ne changent pas on doit seulement réactualiser B_N qui, au pas $N + 1$ devra vérifier

$$B_0 W_N + B_1 W_{N-1} + \dots + B_{N-1} W_1 + B_N W_0 = 0.$$

Cet opérateur \mathcal{W} intervient aussi hors du cadre des équations aux dérivées partielles (edp), en relation avec des processus stochastiques pour déterminer leurs moments. Il permet aussi un calcul rapide et précis des fonctions de Mittag-Leffler définies au paragraphe 2.5. Les opérateurs fractionnaires sont non-locaux, et leur approximation fait apparaître une somme portant sur tout le passé du système.

Il faut aussi discrétiser les dérivées spatiales, et éviter les instabilités. Pour cela nous utilisons un schéma semi-implicite, c'est à dire que pour passer des temps $0, \dots, n\Delta t$ au temps $(n + 1)\Delta t$ nous écrivons un système d'équations pour le champ au temps $(n + 1)\Delta t$ (que nous devons déterminer à partir de ce qui a été calculé jusqu'au temps $n\Delta t$). Nous devons donc déterminer le vecteur des $P(i\Delta x, (N + 1)\Delta t)$. Pour cela nous devons résoudre le système linéaire dont il est solution. Il fait intervenir une matrice, et le second membre dépend des données et du passé. Mettons en oeuvre cette méthode semi-implicite dans le cadre de la formulation (3.29).

3.4.6 Schéma semi-implicite permettant de résoudre le fMIM

A partir des poids B_n ainsi représentant l'opérateur \mathcal{W} , un schéma semi-implicite permet de passer des

$$P_i^N = P(i\Delta x, N\Delta t), i = 0 \cdots N_{sp} - 1 \quad \text{aux} \quad P_i^{N+1} = P(i\Delta x, (N+1)\Delta t)$$

selon

$$\begin{aligned} \frac{P_i^{N+1} - P_i^N}{\Delta t} &= \sum_{j=0}^N B_j \frac{(DP_{i+1}^{N+1-j}) - (2DP_i^{N+1-j}) - (DP_{i-1}^{N+1-j})}{\Delta x^2} \\ &\quad - \sum_{j=0}^N B_j \frac{(vP_{i+1}^{N+1-j}) - (DP_{i-1}^{N+1-j})}{2\Delta x} + r_i^{N+1} \end{aligned} \quad (3.36)$$

En regroupant au premier membre tous les termes qui correspondent au temps $N+1$, et en plaçant au second membre tous les centres, on obtient pour les vecteurs P_i^N et P_i^{N+1} de $\mathbb{R}^{N_{sp}}$

$$Mp^{N+1} = \sum_{j=0}^N A_j p^{N+1-j}. \quad (3.37)$$

Le vecteur P^N de $\mathbb{R}^{N_{sp}}$ représente $(P_0^N \dots P_{N_{sp}-1}^N)$, M et A_j sont des matrices $N_{sp} \times N_{sp}$. Le calcul de DP en $(i+1)\Delta x$, $i\Delta x$ ou $(i-1)\Delta x$ et le calcul de vP en $(i+1)\Delta x$ ou $(i-1)\Delta x$, signalé par des notations $(DP)_i$ ou $(vP)_{i-1}$ dans (3.36), permet d'inclure des paramètres D ou v dépendant de x . La prise en compte d'un paramètre Λ dépendant de x dans le calcul des W_n et W'_n a aussi été effectuée sans difficulté à l'aide de tableaux à double entrée pour représenter W et W' .

3.4.7 Conditions aux limites

Les conditions aux limites appliquées en $x=0$ et en $x=1$ sont éventuellement prises en compte dans la première et la dernière ligne des matrices M et A . Des conditions aux limites absorbantes (imposant $P=0$) n'ont aucun effet sur l'écriture de ces matrices, il en va autrement pour une condition imposant par exemple un flux $\partial_x(DP) - vP$ nul en $x=0$. Une telle condition ($x=0$) peut être de la forme $D\frac{P_1 - P_{-1}}{2\Delta x} - (vP)_0$ où on a choisi une approximation d'ordre deux pour la dérivée. Cette relation permet d'exprimer P_{-1} en fonction de P_1 et P_0 , et de le reporter dans l'équation (3.36) écrite pour $i=0$. Cette solution est bien préférable au choix d'une approximation d'ordre inférieur, comme le montrent les figures ci-après 3.7 et 3.8 donnant les différents profils de densité de probabilité et la figure 3.10 donnant les comparaisons entre des histogrammes des marches au hasard et les solutions du modèle MIM fractal.

3.4.8 Allure des profils spatiaux et des courbes de percée

Pour vérifier la qualité des simulations des solutions de (3.29), nous avons comparé avec des approximations fondées sur des marches au hasard, décrites au paragraphe 3.3.3. On observe un très bon accord, qui se dégrade quand la diffusivité D diminue beaucoup : la diffusion numérique est alors visible, comme l'indique la figure 3.10. Toutes les figures de ce chapitre ont été obtenues avec un flux constant imposé en $x = 0$ pendant la même durée.

L'effet du paramètre γ est illustré par les figures 3.7-3.8. Le comportement asymptotique n'a pas été représenté, et on s'est attaché à des effets visibles beaucoup plus tôt. Ces effets concernent l'épaisseur des traînées et la forme du pic, plus pointu lorsque γ est petit. La figure 3.13 montre des instantanés obtenus à des instants fixés, pour diverses valeurs du paramètre γ , qui est le seul qu'on ait fait varier. On observe que les profils spatiaux s'étalent plus lorsque γ diminue. On observe aussi qu'en diminuant γ on ne retarde pas la progression de tout le contaminant : on l'étale dans l'espace et les profils spatiaux correspondant aux petites valeurs de γ vont même un peu plus loin que les autres, au début. Les figures 3.7-3.8 montrent l'effet de γ sur les traînées : quand ce paramètre est seul à varier, on épaissit la traînée en diminuant γ . Cependant, on diminuerait aussi les traînées en diminuant Λ . Les courbes de percée représentées sur les figures 3.14, 3.15 et 3.16 montrent que la valeur de γ a peu d'effet sur la montée de ces courbes.

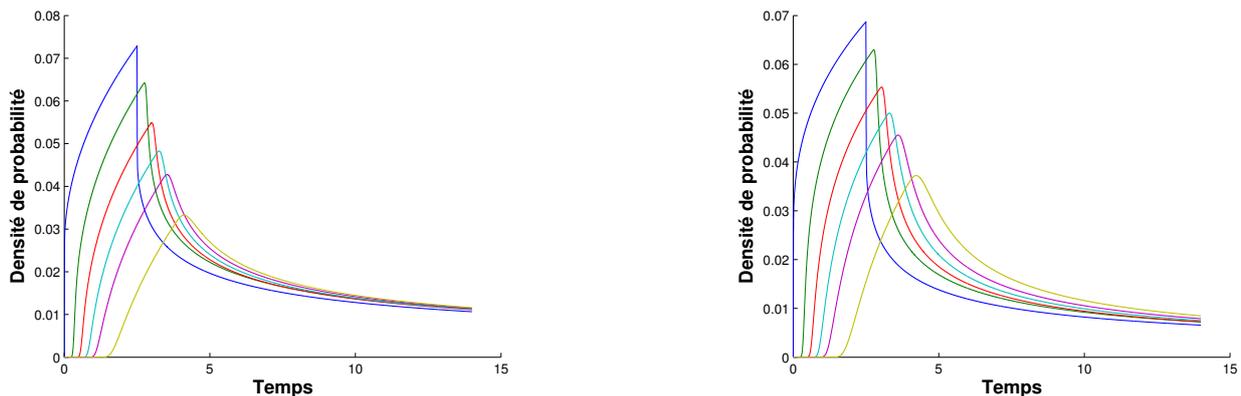


FIGURE 3.7 – Profils temporels $P(x,t)$ des courbes de percée solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) avec $D = 0.001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.6$; $D = 0.001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.5$ pour différentes positions.

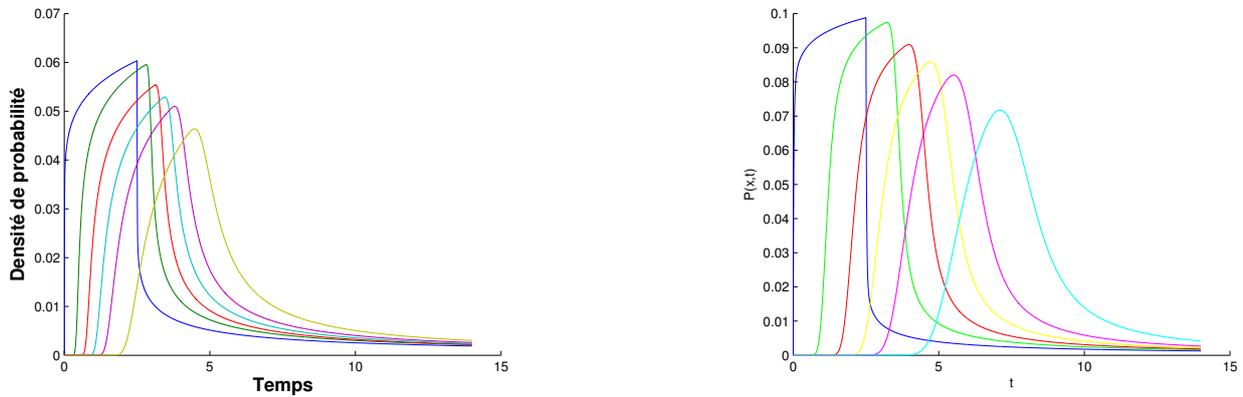


FIGURE 3.8 – Profils temporels $P(x,t)$ des courbes de percée solutions du modèle MIM fractal donnés par l'équation (3.29) avec $D = 0.001$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.9$; $D = 0.001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.8$ pour différentes positions.

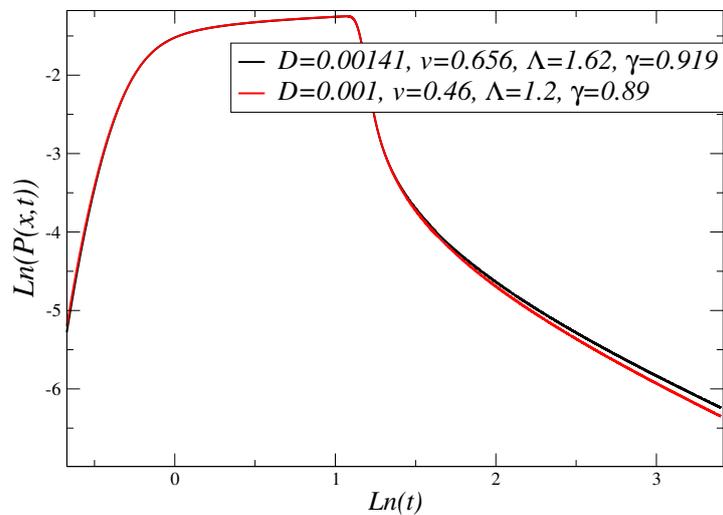


FIGURE 3.9 – Courbes de percée en coordonnées logarithmiques, montrant le comportement asymptotique de 2 jeux de paramètres donnant des profils, excepté aux grands temps.

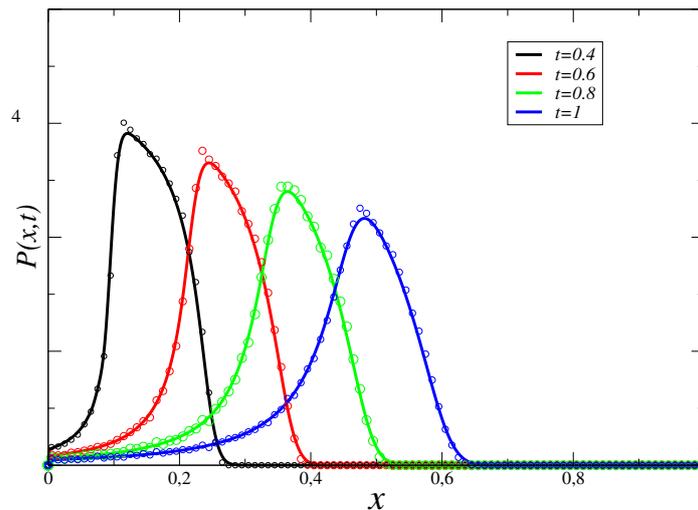


FIGURE 3.10 – Instantanés $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM-fractionnaire en temps donnés par l'équation (3.29) comparés à la Marche aléatoire (3.38) avec $D = 0.00001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.9$

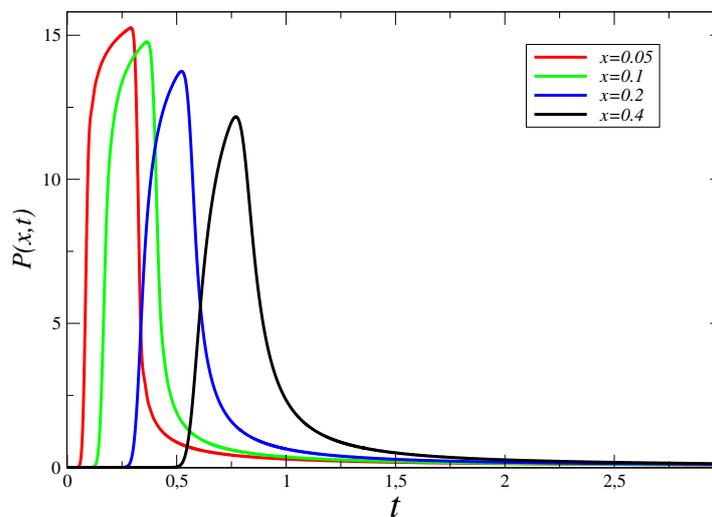


FIGURE 3.11 – Profils temporels $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) avec $D = 0.00001$, $v = 1$, $\Lambda = 1$, $\gamma = 0.9$

3.5 Modèle de marche aléatoire subordonnée en temps

En effet l'équation (3.29) régit l'évolution de la densité d'un processus stochastique qui est la limite hydrodynamique des marches au hasard. A chaque instant, l'histogramme qu'on en déduit réalise une approximation de la solution

$P(x, t)$ de (3.29). Après un bref rappel du principe de ces marches au hasard, nous indiquerons comment nous les avons mises en oeuvre numériquement et nous présenterons la comparaison de leurs histogrammes avec la simulation de (3.29).

3.5.1 Principe des Marches au hasard

Nous avons vu au début du paragraphe 3.3.3 que l'équation (3.29) représente l'évolution de la densité d'un nuage de particules effectuant la marche au hasard suivante, dans la limite (hydrodynamique) où $\tau \rightarrow 0$. Un grand nombre de particules effectue des étapes successives, elles mêmes décomposées en sous étapes consacrées à la convection (à la vitesse v) et à la dispersion, dans ce cas il n'y a pas d'immobilité. Dans le cas du mouvement Brownien, dont la densité vérifie (3.29), l'étape de rang n fait ainsi passer une particule de la position X_n à l'instant t_n , en passant d'abord par $x_n + v\tau$ à $t_n + \tau$ (sous étape convective). Ensuite, cette particule subit un déplacement instantané, d'amplitude lN_n où $l = \sqrt{(2D\tau)}$ alors que N_n représente une variable aléatoire gaussienne centrée normalisée.

Pour donner aux particules la possibilité de s'immobiliser comme on déduit du paragraphe 3.3.3, on peut leur imposer d'attendre au point $x_{n+1} = x_n + v\tau + lN$ à partir de l'instant t_{n+1} pour une durée aléatoire $(\lambda\tau)^{\frac{1}{\gamma}}W_n$ où W_n est une variable aléatoire à valeurs positives, suivant une loi de Lévy d'exposant γ compris entre $0 < \gamma < 1$.

Une étape de la marche au hasard ainsi obtenue est représentée par la figure 3.3. La figure 3.12 illustre des trajectoires plus complètes obtenues pour plusieurs valeurs de γ : les durées d'immobilisation, plus longues lorsque γ diminue, retardant les particules.

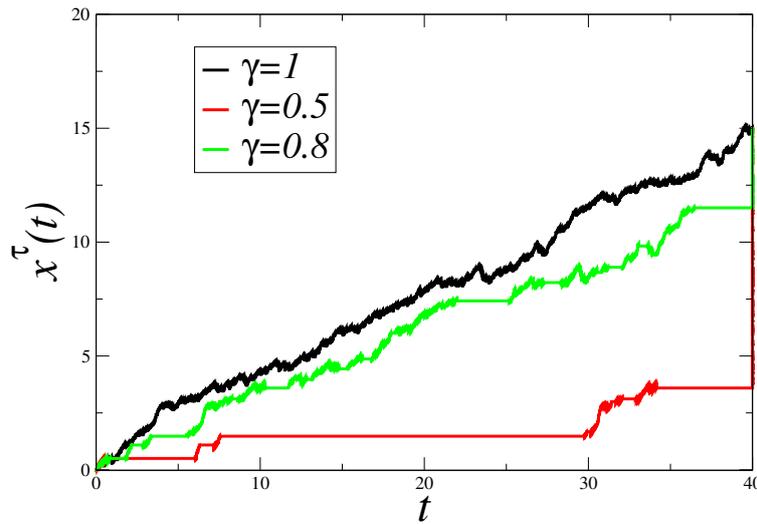


FIGURE 3.12 – Trajectoires des marches au hasard définies par (3.38). Les trajectoires ont été obtenues avec les mêmes déplacements lN_n

Cette marche au hasard a des trajectoires linéaires par morceaux, joignant les (x_n, t_n) aux $(x_{n+1}, t_n + \tau)$ puis à (x_{n+1}, t_{n+1}) selon les équations suivantes :

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + v\tau + lN_n \\ t_{n+1} &= t_n + \tau + (\Lambda\tau)^{\frac{1}{\gamma}}W_n \end{aligned} \quad (3.38)$$

où l'on pose $l = \sqrt{2D\tau}$: D est la diffusivité. Définir la variable W_n en disant qu'elle prend des valeurs positives et suit la loi stable d'exposant γ suffit à la déterminer. La figure 3.3 représente un petit morceau d'une trajectoire, en fait une étape constituée de la marche au hasard. Nous avons vu au paragraphe 3.3.3 que lorsque $\tau \rightarrow 0$ les densités de marcheurs mobiles et immobiles tendent vers des limites P_m et $P - P_m$, la densité P vérifiant elle-même l'équation (3.29). Cette référence démontre aussi que le fait d'avoir imposé une sous étape de convection (déplacement $v\tau$) suivie d'un saut dispersif puis d'une immobilisation, dans cet ordre, n'a pas d'importance. On obtient la même limite en changeant l'ordre de ces étapes, ou en répartissant le déplacement dispersif sur toute la durée τ dévolue aux déplacements.

Des marches au hasard dont la densité vérifie le modèle MIM existent aussi. Elle ne font pas intervenir de passage à la limite hydrodynamique mais ne sont pas pour autant faciles à mettre en oeuvre. Elles ont aussi des trajectoires linéaires par morceaux, joignant les points (x_n, t_n) , $(x_n + vM_n + N_n = x_{n+1}, t_n + M_n)$, $(x_{n+1}, t_n + M_n + T_n = t_{n+1})$. Dans ce cas les M_n et les T_n représentent des durées de pas mobiles et immobiles, les M_n étant distribués selon une loi

exponentielle de moyenne $\frac{1}{K\omega}$ alors que les T_n sont distribués aussi selon une loi exponentielle, mais de moyenne $\frac{1}{\omega}$ [11].

3.5.2 Principe de la Simulation des Marches au hasard

Le mouvement d'un grand nombre de particules est simulé sur la base de (3.38) au moyen de tirages, effectués numériquement, de nombres aléatoires, ou plutôt pseudo-aléatoires représentant les N_n et les W_n . On a besoin d'un suivi précis de l'ensemble des particules à chaque instant, selon le pas de temps τ par exemple. 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 (disons à l'instant θ). Ensuite on la déplace de $v\tau + lN_n$ 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 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 variable aléatoire 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. Nous avons utilisé l'instruction "rand" de C++.

Le très bon accord entre les densités calculées à partir d'histogrammes de telles marches au hasard et les solutions de (3.29), représentées sur la figure 3.13 ci-dessous, permet de contrôler la qualité de discrétisation de cette dernière. C'est particulièrement utile lorsque les paramètres D , v et Λ sont autorisés à dépendre de x , ou de t , car alors on ne dispose plus de solutions exactes pour vérifier les résultats des simulations.

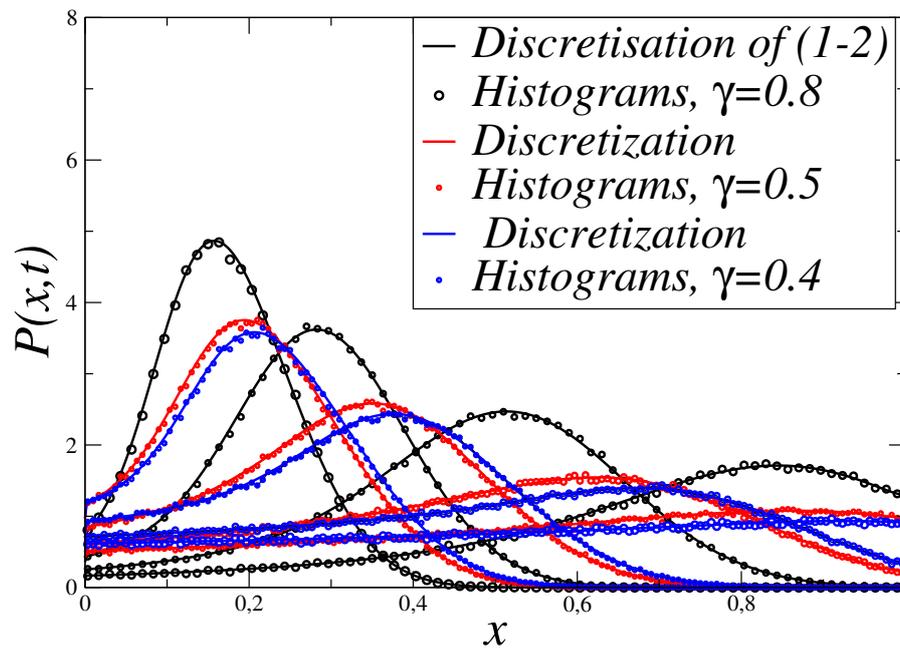


FIGURE 3.13 – Profils $P(x,t)$ des solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) comparés à la Marche aléatoire (3.38)

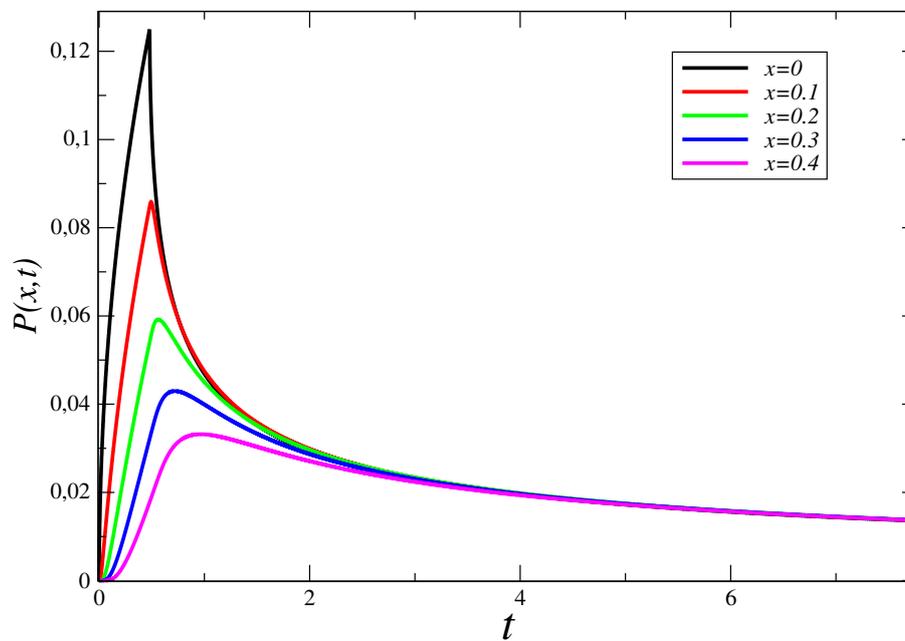
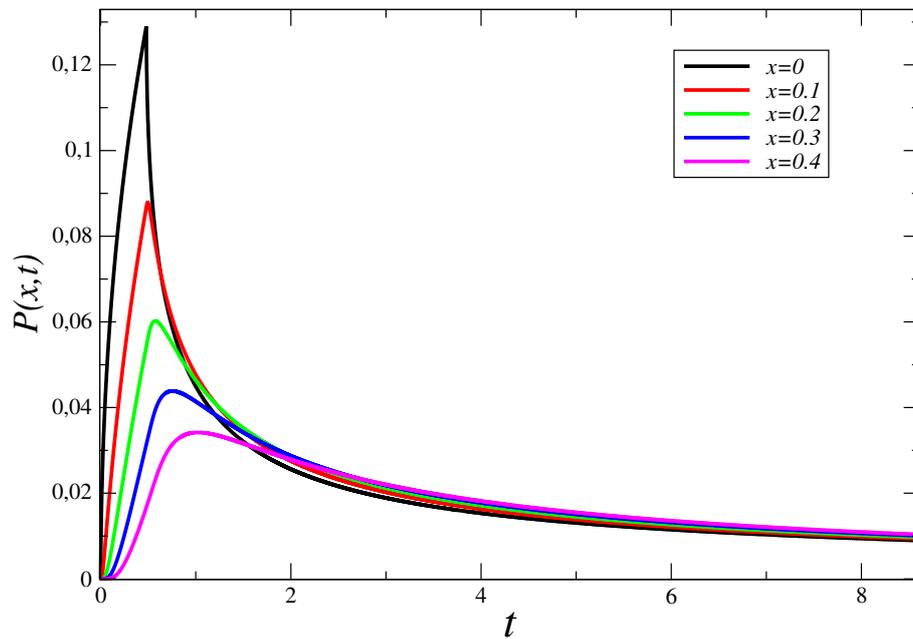
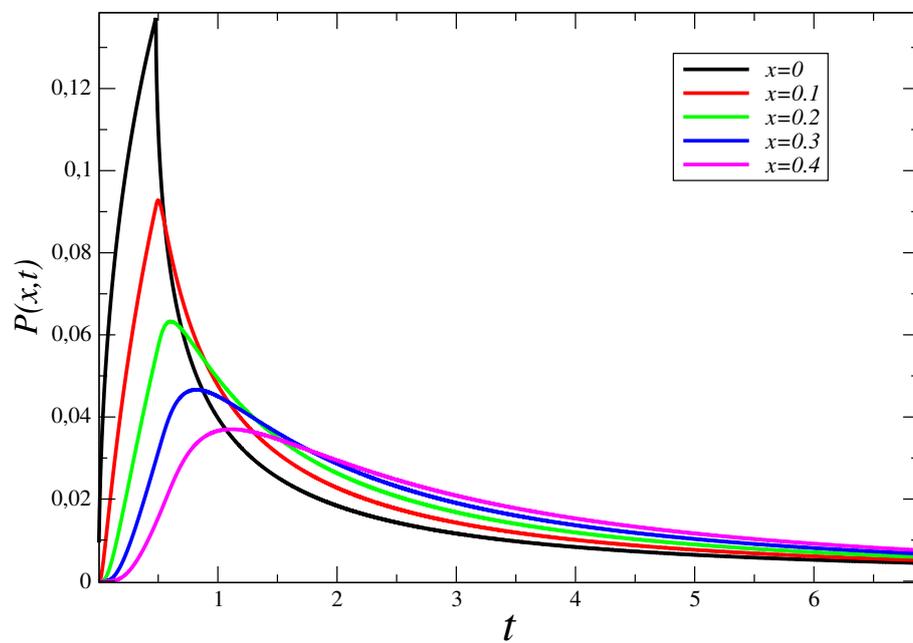


FIGURE 3.14 – Courbes de percée correspondant à $D = 0.1$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1.2$, et $\gamma = 0.5$

FIGURE 3.15 – Courbes de percée correspondant à $D = 0.1$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1.2$, et $\gamma = 0.6$ FIGURE 3.16 – Courbes de percée correspondant à $D = 0.1$, $v = 0.5$, $\Lambda = 1.2$, et $\gamma = 0.8$

3.6 Conclusion

Différents modèles de transport de masse ont été abordés dans ce chapitre, à savoir, le MIM classique, l'équation de Fokker-Planck fractionnaire (très rapidement) et le modèle MIM fractal de façon plus approfondie. Ces modèles permettent non seulement de représenter les observations de transport anormal et comprendre les écarts à la loi gaussienne dans des milieux poreux mais devraient permettre aussi de faire de prédictions, bien sur selon les contextes.

La démonstration du lien entre des marches au hasard et le modèle MIM fractal a été esquissée. Ce lien permet d'utiliser les marches au hasard comme outil de simulation numérique des solutions de cette équation aux dérivées partielles. Ceci permet en particulier de vérifier que le choix des pas d'espace et de temps assure une précision convenable dans la discrétisation de l'équation (3.29). De plus, les marches au hasard permettent de simuler d'autres observables que $P(x, t)$, comme par exemple celles liées à la statistique des déplacements effectués par les particules de traceur pendant un intervalle de temps donné. Mais ceci sort du cadre de cette thèse. Ces outils de simulation numérique devraient permettre de prédire, par exemple, le futur d'une expérience de dispersion à partir de premières observations. Mais pour cela, il nous faut disposer des paramètres (D, v, λ, γ) qui interviennent dans le modèle MIM fractal. Il faut donc disposer d'une méthode d'inversion, permettant de les estimer sur la base des premières données. Ceci est l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 4

Inversion du modèle MIM fractionnaire. Détermination des paramètres du modèle à partir de données

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons décrit un modèle de diffusion anormale et présenté quelques outils de simulation, c'est-à-dire que nous avons mis en forme le problème direct. Pour résoudre le problème direct, il faut disposer des paramètres du modèle, à savoir (D, v, Λ, γ) dans le cas de fMIM (ou (D, v, K, ω) dans le cas du MIM classique). Et on détermine l'évolution de la concentration $C(x, t)$ ou de la densité de probabilité $P(x, t)$ en tout point dans le milieu considéré. On parle alors de la simulation du phénomène de transport dans le milieu poreux. En d'autres termes, on peut simuler le transport dans un milieu poreux donné avec un modèle, à condition de disposer des valeurs des paramètres associés. Il faut noter que compte tenu du caractère "théorique" de ces paramètres, il est en général difficile, peut être même illusoire, d'espérer les obtenir directement à partir de mesures faites sur le milieu. Néanmoins, les concentrations et donc les densités de probabilité qui sont les sorties du modèle de transport restent mesurables à partir des expériences en laboratoire et en site naturel. En pratique, confronter un modèle avec des expériences nécessite de trouver les paramètres du modèle à partir de ces données expérimentales. Ensuite, il reste à vérifier que la solution du problème direct qui correspond à ces valeurs estimées de paramètres, représente convenablement les données. Si tel est le cas, on a vraiment deviné les bons paramètres.

Le chapitre III a présenté les propriétés des solutions du problème direct, ainsi que des méthodes pour les approcher. Le présent chapitre a pour objet

le problème inverse. Nous supposons donc que les densités de probabilité des particules de contaminant sont données à partir de résultats expérimentaux, et nous cherchons à retrouver les paramètres du modèle qui leur correspondent.

Quel que soit la méthode utilisée pour cela, il faut un critère quantitatif pour décider si un jeu de paramètres correspond ou non à un jeu de données. Le critère que nous choisissons est une fonction "objectif" mesurant l'écart entre les données et la densité de traceur calculée à partir du modèle et d'un jeu de paramètres à tester. Nous allons proposer une méthode, fondée sur des transformations intégrales appliquées directement aux données, et qui produit un ensemble \mathcal{C} de paramètres. Elle est inspirée de la méthode des moments temporels, employée [108] pour inverser le modèle MIM classique. Nous insisterons par conséquent sur l'élément qui correspond au minimum de la fonction objectif dans cet ensemble \mathcal{C} . La résolution du problème direct joue un rôle essentiel dans la seconde étape de cette démarche, puisqu'elle est la base du calcul de la fonction objectif.

Dans le présent chapitre, nous allons définir les transformations intégrales que nous comptons utiliser, et préciser le lien qui les unit aux paramètres de transport dans le cadre du fMIM, après avoir rappelé une méthode utilisée dans le même esprit pour le MIM. Ensuite, nous l'appliquerons à des données "synthétiques" calculées en résolvant le problème direct à partir de paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ choisis arbitrairement. Cette étape a tout d'abord pour but d'illustrer notre démarche. Elle vise à préciser des circonstances dans lesquelles elle donne de moins bons résultats. Nous passerons enfin à de " vraies données".

4.2 Rappel d'une méthode utilisant des moments temporels dans le cadre du MIM

Plusieurs auteurs ont utilisé les moments des courbes de percée pour déterminer les paramètres d'un modèle de transport à partir d'expériences [50]. Plusieurs travaux ont décrit cette démarche, le cas des modèles ADE et MIM classique [26][46][50][90][92][108][109]. La méthode consiste à établir à partir de la transformée de Laplace de l'équation de transport des relations qui lient les paramètres du modèle aux moments temporels des courbes de percée. On en déduit un système d'équations algébriques dont la solution conduit aux valeurs des paramètres du modèle [90].

Pour obtenir ce système, nous supposons qu'en un certain nombre de points d'un milieu poreux unidimensionnel, l'évolution temporelle de la densité de probabilité $P(x_n, t)$ est connue. On est dans cette situation à la suite d'une série de mesures au cours d'une expérience en colonne de laboratoire où des particules de contaminant ont été préalablement injectées, pourvu que la concentration ait été mesurée tout au long de l'expérience, en quelques sections droites (de position x_i). Pour chacun de ces x_i , nous pouvons calculer la transformée de Laplace de la densité de probabilité correspondante avec la formule

$$\tilde{P}(x_i, s) = \int_0^{\infty} P^*(x_i, t) e^{-st} dt$$

où $P^*(x_i, t)$ est la densité mesurée. Par ailleurs, pour un domaine semi-infini $x \in [0, +\infty[$, on montre que la transformée de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ du modèle de transport (3.2) [108][109] peut s'écrire sous la forme

$$\tilde{P}(x, s) = \frac{\tilde{R}(s)}{s} e^{-xf(s)} f(s), \quad (4.1)$$

où f représente une fonction qui contient les paramètres v , D , K et ω du modèle.

D'autre part, les moments temporels $m_n = \int_0^{+\infty} t^n P(x, t) dt$, lorsqu'ils sont finis, dont les dérivées de la transformée de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ calculées en la valeur $s = 0+$ de la variable de Laplace. Il se trouve que cette transformée de Laplace est dérivable en $s = 0$, dans le cadre des modèles ADE et MIM classique.

Or, lorsque la transformée de Laplace de $P^*(x_i, t)$ est dérivable en $0+$, on a

$$m_n(x) = (-1)^n \frac{d^n}{ds^n} \tilde{P}(x, s) |_{s=0}. \quad (4.2)$$

Donc les dérivées (en $s = 0+$) de $\tilde{P}(x, s)$ sont liées aux dérivées $\frac{d^n}{ds^n} f |_{s=0}$ de la fonction f de (4.1) par des relations spécifiques au modèle, et qui font intervenir les paramètres. Pour le MIM classique, différents auteurs [41][59][92][108][109] ont utilisé avec succès cette approche pour estimer les paramètres (v, D, K, ω) .

En ce qui concerne le modèle MIM fractionnaire, la transformée de Laplace de ses solutions n'a plus ni limite finie ni a fortiori de dérivée finie en $s = 0+$. En d'autres termes, les moments ne sont plus finis. On peut cependant les remplacer par d'autres transformées intégrales des profils temporels de concentration ou de densité, et suivre une démarche analogue pour déterminer les paramètres du transport. Ces transformées intégrales sont en quelque sorte des moments tronqués, et finis. Nous allons montrer le lien qui les unit aux paramètres, sur la base de relations identiques à (4.1) et (4.2).

4.3 Méthode des moments temporels tronqués pour le modèle MIM fractionnaire

Dans le cadre de chacun des deux modèles (fMIM ou MIM), les dérivées de la transformée de Laplace des profils peuvent être déterminées directement à partir de ces derniers.

4.3.1 Moments temporels tronqués

Pour une solution $P(x, t)$ du modèle MIM fractionnaire (3.27) les intégrales notées m_n divergent à cause du comportement asymptotique en $\Lambda t^{-1-\gamma}$ de $P(x, t)$ décrit au paragraphe 3.3.3. Cependant, dans le cas du MIM classique comme dans celui de MIM fractionnaire, on obtient des intégrales convergentes en remplaçant $P(x, t)$ par $P(x, t)e^{-st}$ pour $s > 0$.

En partant de cette constatation, pour chaque valeur fixée de x et chaque $s > 0$, nous définissons le moment temporel tronqué d'ordre $n \geq 0$ par :

$$M_n(x, s) = \int_0^{+\infty} e^{-st} t^n P(x, t) dt. \quad (4.3)$$

Avec (4.3), nous considérons ainsi à la place du moment proprement dit, le moment d'ordre n de la fonction $P(x, t)$ tronquée par l'exponentielle e^{-st} . Pour $n = 0$, $M_0(x, s)$ n'est autre que la transformée de Laplace de $P(x, t)$, elle même

$$\tilde{P}(x, s) = \int_0^{+\infty} e^{-st} P(x, t) dt.$$

Par ailleurs, la convergence des intégrales ainsi obtenues par (4.3) est assurée par le fait que la fonction $P(x, t)$ est dominée asymptotiquement par l'exponentielle. De plus, dans ce cas, les moments tronqués $M_n(x, s)$ vérifient la relation suivante, similaire à (4.2)

$$M_n(x, s) = (-1)^n \frac{d^n}{ds^n} \tilde{P}(x, s). \quad (4.4)$$

L'ensemble des deux relations (4.3) et (4.4) montre que la donnée de la densité de probabilité $P(x, t)$ en fonction de t (qu'on peut obtenir expérimentalement à partir d'une courbe de percée $C(x, t)$ et de la teneur en eau θ) permet de calculer les moments tronqués $M_n(x, s)$ par intégration numérique de (4.3). On a ainsi accès directement aux dérivées $\frac{d^n}{ds^n} \tilde{P}(x, s)$, sans effectuer de dérivation numérique : on ne fera que des intégrations, c'est à dire des opérations régularisantes.

Cette démarche laisse espérer une certaine robustesse de l'implémentation numérique de notre méthode. De plus, pour chacun des deux modèles MIM

(MIM classique, ou fMIM), $\tilde{P}(x, s)$ a une expression relativement simple dans un milieu semi-infini. De plus, ses dérivées par rapport à s s'expriment sous la forme de fonctions assez bien connues de s et des paramètres du modèle. Ces fonctions s'expriment cependant différemment selon qu'on envisage l'une ou l'autre des deux versions du MIM. A l'instar de ce qui a été dit plus haut pour le modèle MIM classique et compte tenu de (4.4), ceci permet de relier les moments tronqués $M_n(x, s)$ aux paramètres du modèle, en vue de déterminer ces derniers. Dans la section suivante, nous établissons l'expression de $\tilde{P}(x, s)$ en fonction des paramètres en insistant sur le MIM fractionnaire.

4.3.2 Transformée de Laplace de $P(x, t)$ en milieu semi-infini pour les deux versions du modèle MIM

Il s'agit donc d'établir l'expression de la transformée de Laplace $\tilde{P}(x, s)$ d'une solution du fMIM pour représenter l'injection d'un traceur à l'entrée d'un milieu, dans le cadre de la première équation du système (3.2) qui s'applique à chacun des deux modèles MIM classique ou fractionnaire, on peut utiliser un terme source $r(x, t) = \delta(x)R(t)$. On peut aussi, de manière équivalente, remplacer le terme source par 0 et imposer en $x = 0$ un flux de traceurs égal à $R(t)$. En vertu de (3.26), ce flux

$$[-(\partial_x(DP_m) + vP_m)]_{x=0}. \quad (4.5)$$

On écrit la transformée de Laplace $\tilde{P}_m(x, s)$ de $P_m(x, t)$ de l'équation du modèle MIM fractionnaire (3.29) décrite dans le chapitre précédent. Nous obtenons la forme suivante :

$$D\partial_{x^2}\tilde{P}_m(x, s) - v\partial_x\tilde{P}_m(x, s) - s(1 + \tilde{\mathcal{M}}(s)) = 0. \quad (4.6)$$

La fonction $\tilde{\mathcal{M}}(s)$ est le symbole (en variables de Laplace) de l'opérateur qui détermine P_i à partir de P_m . Nous avons vu au chapitre précédent que cet opérateur est une convolution.

La solution $\tilde{P}_m(x, s)$ vérifie l'équation différentielle ordinaire (4.6) en $x > 0$, ainsi que la condition à la limite ($x = 0+$)

$$[-\partial_x(D\tilde{P}_m(x, s)) + v\tilde{P}_m(x, s)]_{x=0} = \tilde{R}(s).$$

Chaque solution de (4.6) est une combinaison linéaire de $e^{x\lambda_{\pm}(s)}$, avec

$$\lambda_{\pm}(s) = \frac{v}{2D} \pm \frac{\sqrt{\Delta}(s)}{2D}$$

et

$$\Delta(s) = v^2 + 4D(s + \mathcal{M}(s)).$$

Les solutions bornées dans un milieu semi-infini ($x \in \mathbb{R}^+$) ont une composante sur $e^{x\lambda_+(s)}$ qui est nulle, et sont donc de la forme

$$\tilde{P}_m(x, s) = \mathcal{A}e^{-f(s)x} \quad (4.7)$$

avec

$$\mathcal{A} = \frac{\tilde{R}(s)}{D\lambda_+(s)}. \quad (4.8)$$

On trouve ainsi l'équation (4.1) énoncée au paragraphe 4.2. Dans le cadre de chacune des deux versions du MIM la fonction $f(s)$ s'écrit :

$$f(s) = \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \frac{s(1 + \tilde{\mathcal{M}}(s))}{D}} - \frac{v}{2D}. \quad (4.9)$$

Pour le MIM fractionnaire, $\tilde{\mathcal{M}}(s) = \Lambda s^{1-\gamma}$ représente le symbole (en variable de Laplace) de l'intégrale fractionnaire $\Lambda I_{0,+}^{1-\gamma}$. Dans le cas du MIM classique c'est $\tilde{\mathcal{M}}(s) = \frac{K\omega}{\omega+s}$. Pour les deux modèles, les dérivées de f sont liées aux $M_n(x, s)$, donc à partir d'une expérience permettant de calculer ces derniers on peut déterminer les paramètres du transport. Ceux-ci, sont (D, v, Λ, γ) dans le cas du MIM fractionnaire et (D, v, K, ω) dans celui du MIM classique. Les liens entre les $M_n(x, s)$ et les dérivées de f sont d'autre part les mêmes pour les deux modèles. Par contre, une fois que les dérivées de $f(s)$ auront été calculées, l'extraction des paramètres prendra des formes différentes selon le modèle.

4.3.3 Lien entre $M_n(x, s)$ et les dérivées de f

Cette relation prend une forme particulièrement simple si l'on dispose de deux profils $P(x_1, t)$ et $P(x_2, t)$ enregistrés en deux points d'un milieu unidimensionnel. La relation (4.1) implique en effet

$$-(x_1 - x_2)f(s) = \ln \frac{\tilde{P}(x_2, s)}{\tilde{P}(x_1, s)}. \quad (4.10)$$

On en déduit le lien entre les dérivées de f et les $M_n(x, s)$ en remarquant que $M_0(x, s) = \tilde{P}(x, s)$ et que

$$\partial_s \ln \tilde{P}(x, s) = \frac{\partial_s \ln \tilde{P}(x, s)}{\tilde{P}(x, s)} = -\frac{M_1(x, s)}{M_0(x, s)}.$$

On a ainsi par de dérivations successives,

$$\partial_{s^2}^2 \ln \tilde{P}(x, s) = + \frac{\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s)}{\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s)} - \frac{(\partial_{s^2}^2 \ln \tilde{P}(x, s))^2}{\tilde{P}^2(x, s)} = \frac{M_2(x, s)}{M_0(x, s)} - \frac{M_1^2(x, s)}{M_0^2(x, s)}$$

$$\begin{aligned} \partial_{s^3}^3 \ln \tilde{P}(x, s) &= \frac{\partial_{s^3}^3 \tilde{P}(x, s)}{\tilde{P}(x, s)} - \frac{3(\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s))}{\tilde{P}^2(x, s)} \\ &\quad - \frac{\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s) 2(\partial_s \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s))^3}{\tilde{P}^2(x, s) \tilde{P}^3(x, s)} \\ &= \frac{M_3(x, s)}{M_0(x, s)} - \frac{M_2 M_1(x, s)}{M_0^2(x, s)} + \frac{M_1^3(x, s)}{M_0^3(x, s)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_{s^4}^4 \ln \tilde{P}(x, s) &= \frac{\partial_{s^4}^4 \tilde{P}(x, s)}{\tilde{P}(x, s)} - \frac{4(\partial_{s^3}^3 \tilde{P}(x, s) \partial_s \tilde{P}(x, s))}{\tilde{P}^2(x, s)} \\ &\quad - \frac{3(\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s))}{\tilde{P}^2(x, s)} + \frac{12(\partial_{s^2}^2 \tilde{P}(x, s) (\partial_s \tilde{P}(x, s))^2)}{\tilde{P}^3(x, s)} - \frac{6(\partial_s \tilde{P}(x, s))^4}{\tilde{P}^4(x, s)} \\ &= \frac{M_4(x, s)}{M_0(x, s)} - 4 \frac{M_3 M_1(x, s)}{M_0^2(x, s)} + 3 \left(\frac{M_2(x, s)}{M_0(x, s)} \right)^2 + 12 \frac{M_2 M_1^2(x, s)}{M_0^3(x, s)} - 6 \left(\frac{M_1^2(x, s)}{M_0(x, s)} \right)^4 \end{aligned}$$

On en déduit que

$$x \frac{df}{ds}(s) = \frac{M_1}{M_0}(x, s) - \frac{M_1}{M_0}(0, s) \quad (4.11a)$$

$$x \frac{d^2 f}{ds^2}(s) = - \left(\frac{M_2}{M_0}(x, s) - \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^2(x, s) + \frac{M_2}{M_0}(0, s) - \left(\frac{M_1}{M_0}(0, s) \right)^2 \right) \quad (4.11b)$$

$$x \frac{d^3 f}{ds^3}(s) = \left(\frac{M_3}{M_0} + 3 \frac{M_2 M_1}{M_0^2} + 2 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^3 \right)(x, s) - \left(\frac{M_3}{M_0} - 3 \frac{M_2 M_1}{M_0^2} + 2 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^3 \right)(0, s) \quad (4.11c)$$

$$\begin{aligned} x \frac{d^4 f}{ds^4}(s) &= - \left(\frac{M_4}{M_0} - 4 \frac{M_3 M_1}{M_0^2} - 3 \left(\frac{M_2}{M_0} \right)^2 + 12 \frac{M_2 M_1^2}{M_0^3} - 6 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^4 \right)(x, s) \\ &\quad + \left(\frac{M_4}{M_0} - 4 \frac{M_3 M_1}{M_0^2} - 3 \left(\frac{M_2}{M_0} \right)^2 + 12 \frac{M_2 M_1^2}{M_0^3} - 6 \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^4 \right)(0, s) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Ces relations permettent de déterminer les dérivées $\frac{d^n f}{ds^n}$ de la fonction f , de manière exacte dans un milieu semi-infini. Dans un milieu fini ces relations sont seulement approchées

Il reste à en déduire les paramètres, compte tenu des expressions donnant ces dérivées en fonction de s . Ces dérivées font intervenir la fonction \mathcal{M} , qui

n'a pas la même forme selon la version du MIM à laquelle on s'adresse. Il n'est donc pas étonnant de devoir traiter à part le cas du MIM et le cas de fMIM pour cette étape.

4.3.4 Extraction des paramètres

Nous allons expliciter ce lien pour chacun de ces deux modèles.

4.3.4.a Cas du MIM fractionnaire

Compte tenu du fait que

$$X(s) = \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \frac{s + \Lambda s^\gamma}{D}} \quad \text{et} \quad f(s) \quad (4.13)$$

ont les mêmes dérivées, on en déduit que dans un milieu semi-infini

$$\frac{df}{ds}(s)X(s) = \frac{1}{2D} + \frac{\Lambda\gamma s^{\gamma-1}}{2D} \quad (4.14a)$$

$$\frac{d^2f}{ds^2}(s)X(s) + \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) = \frac{\Lambda\gamma(\gamma-1)s^{\gamma-2}}{2D} \quad (4.14b)$$

$$\frac{d^3f}{ds^3}(s)X(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s) = \frac{\Lambda\gamma(\gamma-1)(\gamma-2)s^{\gamma-3}}{2D} \quad (4.14c)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^4f}{ds^4}(s)X(s) + 4\frac{df}{ds}(s)\frac{d^3f}{ds^3}(s) + 3\left(\frac{d^2f}{ds^2}\right)^2(s) = \\ \frac{\Lambda\gamma(\gamma-1)(\gamma-2)(\gamma-3)s^{\gamma-4}}{2D}. \end{aligned} \quad (4.14d)$$

On voit immédiatement que les relations (4.14) impliquent

$$\frac{\gamma-2}{s} = \frac{d^3f}{ds^3}(s)X(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s)X(s) + \left(\frac{d^3f}{ds^3}\right)^2(s) \quad (4.15)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\gamma-3}{s} = \frac{d^4f}{ds^4}(s)X(s) + 4\frac{df}{ds}(s)\frac{d^3f}{ds^3}(s) \\ + 3\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)\frac{d^3f}{ds^3}(s)X(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2f}{ds^2}(s) \end{aligned} \quad (4.16)$$

et que γ disparaît de la différence. On en déduit

$$\mathbf{a}(s)X^2(s) + \mathbf{b}(s)X(s) + \mathbf{c}(s) = 0 \quad (4.17)$$

avec

$$\mathbf{a}(s) = \left(\frac{d^3 f}{ds^3}\right)^2(s) - \frac{d^2 f}{ds^2}(s) \frac{d^4 f}{ds^4}(s) - \frac{\frac{d^2 f}{ds^2}(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s)}{s} \quad (4.18)$$

$$\mathbf{b}(s) = 2 \frac{df}{ds}(s) \frac{d^2 f}{ds^2}(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s) - \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) \frac{d^4 f}{ds^4}(s) - 3 \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) - \frac{\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s) + 3 \frac{df}{ds}(s) \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s)}{s} \quad (4.19)$$

$$\mathbf{c}(s) = 6 \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) - \left(\frac{df}{ds}\right)^3(s) \frac{d^2 f}{ds^2}(s) s^{-1} = 0 \quad (4.20)$$

qui permet de déterminer $X(s)$. Ensuite on déduit γ de (4.15) et on obtient $\frac{1}{2D}$ et $\frac{1}{2D}$ en résolvant le système linéaire (4.14a)-(4.14b).

4.3.4.b Extraction des paramètres dans le cas du MIM classique

En posant cette fois-ci $X(s) = \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + \frac{1}{D}\left(s + \frac{Ks}{1+\Omega s}\right)}$ et $\Omega = \frac{1}{\omega}$, on a

$$\frac{df}{ds}(s)X(s) = \frac{1}{2D} \left(1 + \frac{K}{(1 + \Omega s)^2}\right) \quad (4.21a)$$

$$\frac{d^2 f}{ds^2}(s)X(s) + \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s) = -\frac{K\Omega}{D(1 + \Omega s)^3} \quad (4.21b)$$

$$\frac{d^3 f}{ds^3}(s)X(s) + 3 \frac{df}{ds}(s) \frac{d^2 f}{ds^2}(s) = 3 \frac{K\Omega^2}{D(1 + \Omega s)^4} \quad (4.21c)$$

$$\frac{d^4 f}{ds^4}(s)X(s) + 4 \frac{df}{ds}(s) \frac{d^3 f}{ds^3}(s) + 3 \left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) = -12 \frac{K\Omega^3}{D(1 + \Omega s)^5} \quad (4.21d)$$

qui impliquent tout d'abord

$$\mathbf{a}'(s)X^2(s) + \mathbf{b}'(s)X(s) + \mathbf{c}'(s) = 0 \quad (4.22)$$

avec

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}'(s) &= \left(4\left(\frac{d^3 f}{ds^3}\right)^2(s) - 3\frac{d^2 f}{ds^2}(s)\frac{d^4 f}{ds^4}(s) \right) \\
\mathbf{b}'(s) &= \left(12\frac{df}{ds}(s)\frac{d^2 f}{ds^2}(s)\frac{d^3 f}{ds^3}(s) - 3\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)\frac{d^4 f}{ds^4}(s) - 9\left(\frac{df^2}{ds^2}\right)^3(s) \right) \\
\mathbf{c}'(s) &= 27\left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)\left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s) - 12\left(\frac{df}{ds}\right)^3(s)\frac{d^3 f}{ds^3}(s) = 0
\end{aligned}$$

qu'on déduit de (4.21b)-(4.21c). Ensuite on obtient Ω par

$$\Omega + s = -3 \frac{X(s)\frac{d^2 f}{ds^2}(s) + \left(\frac{df}{ds}\right)^2(s)}{X(s)\frac{d^3 f}{ds^3}(s) + 3\frac{df}{ds}(s)\left(\frac{d^2 f}{ds^2}\right)^2(s)} \quad (4.23)$$

puis $\frac{1}{D}$ et $\frac{K}{D}$ qu'on déduit de (4.21a et 4.21b).

4.3.5 Procédure pour estimer les paramètres du MIM ou fMIM à partir de 2 courbes de concentration

Pour chacun de ces deux modèles, la fonction f est liée aux 4 paramètres (D, v, Λ, γ) ou (D, v, K, ω) . On la détermine exactement dans un milieu semi-infini, seulement de manière approchée dans un milieu fini. Ensuite, les paramètres peuvent être déterminés en optimisant la distance entre le graphe approché de f et celui de la fonction $s \mapsto \sqrt{\left(\frac{v}{2D}\right) + \tilde{\mathcal{M}}} - \frac{v}{2D}$. Une autre façon de procéder utilise les dérivées de f (ou leurs approximations) pour les valeurs de s (sauf en 0), mais elle a cependant pour inconvénient d'aboutir à plusieurs estimations.

4.3.8.a Choix d'une méthode

Une estimation convenable pour minimiser l'erreur consisterait à trouver le minimum de la norme de l'écart entre les valeurs mesurées et les valeurs estimées de la fonction f sous la forme :

$$\mathcal{E} = \sum_{i=1}^4 \int_{s_{min}}^{s_{max}} \left(\frac{d^n f(s)}{ds^n} - f^{(n)} \right)^2(s) dt$$

où la fonction $\frac{d^n f(s)}{ds^n}$ a été déterminée numériquement à partir des courbes de percée et des relations (4.11) et (4.12), tandis que les fonctions $f^{(n)}$ sont calculées à partir des paramètres estimés, et des relations (4.14) dans le cas du fMIM, (4.21) dans le cas du MIM.

En appliquant cette méthode à des données numériques (et pas d'origine expérimentale) nous avons constaté que le choix de s_{min} et s_{max} influence

son résultat. Un intervalle trop petit donne une estimation pour les paramètres, cependant elle peut s'avérer très différente des "vrais" paramètres, surtout lorsque $\frac{v^2}{D}$ est grand. Ceci s'explique d'après l'allure que prend la fonction $s \mapsto \sqrt{\frac{v}{2D} + \mathcal{M}(s)} - \frac{v}{2D}$ dans ces conditions : on a $F(s) = \frac{v}{2D}(\sqrt{1 + \frac{4D}{v^2}\mathcal{M}(s)} - 1)$ avec $\frac{4D}{v^2}\mathcal{M}(s) = \frac{4D}{v^2}(s + \frac{\omega s}{1+\omega s})$ dans le cas du MIM et $\frac{4D}{v^2}\mathcal{M}(s) = \frac{4D}{v^2}(s + \frac{Ks}{1+Ks^\gamma})$ dans le cas du fMIM. Dans ces deux cas la fonction F se "raidit" et se rapproche d'une forme droite lorsque $\frac{4D}{v^2}$ devient petit, et l'estimation des paramètres devient plus difficile.

Le lien entre les $M_n(x, s)$ et les dérivées de f , elles mêmes liées aux paramètres du MIM, permet au contraire de traiter chaque valeur de s séparément. On n'a pas besoin de se restreindre a priori à un sous intervalle de \mathbb{R}^+ . On devra par contre ensuite trier les nombreuses estimations que produit cette démarche. A priori, pour des profils correspondant à des solutions exactes du MIM, dans un milieu vraiment semi-infini, on s'attend à ce que toutes les valeurs de s conduisent à une même estimation des paramètres du transport. Il n'en est rien : on obtient toute une courbe d'estimations. Pour l'équation de Fokker-Planck fractionnaire avec $v = 0$ (et seulement deux paramètres à estimer) Lukashchuk [63] a rencontré la même difficulté, dans un contexte différent et sur la base d'essais d'inversion réalisés à partir de solutions analytiques.

Nous avons préféré la seconde solution (celle qui utilise les $M_n(x_i, s)$) parce qu'elle n'implique pas de choisir a priori de travailler avec un sous ensemble de valeurs de s . Le choix de la meilleure estimation est fait a posteriori, sur la base d'un traitement exhaustif des informations disponibles. Pour chaque s dans \mathbb{R}^+ , nous allons ainsi déterminer les $\frac{d^n f}{ds^n}(s)$ à partir des moments tronqués. La solution de (4.17) dans le cas de MIM fractionnaire conduira à une estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ des paramètres. Dans le cas du MIM classique la solution de (4.22) conduira à une estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, K^{(e)}, \omega^{(e)})(s)$. Il faudra ensuite choisir la meilleure de ces estimations.

Précisons le détail de la mise en oeuvre de ce programme dans le cas du MIM fractionnaire.

4.3.5.b Procédure de mise en oeuvre de la méthode des moments tronqués

Supposons disposer de données $P^*(x, t)$ recueillies dans un milieu où le transport de soluté correspond au modèle MIM fractionnel, avec des paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ uniformes. Cependant nous ne connaissons pas ces $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$, et nous souhaitons les déterminer. Pour cela nous appliquerons successivement

les étapes suivantes. Pour chaque $s > 0$:

- Les dérivées $\frac{df^n}{ds^n}(s)$ sont obtenues à partir des moments tronqués en x_1 et x_2 , eux mêmes déterminés à partir des $P^*(x, t)$ par intégration numérique.
- Pour chaque $s > 0$ tel que l'équation du second degré (4.17) ait une solution positive conduisant à (γ, D, Λ) dans $]0, 1] \times \mathbb{R}$, on obtient $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ à l'aide de (4.14) et (4.15). Reste à déterminer parmi les $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$, qui forment une courbe \mathcal{C} de \mathbb{R} , la meilleure estimation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$.
- Pour cela, on résoud (4.6) sur la base de paramètres égaux à $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ et de la donnée d'entrée $R(t)$: on obtient la solution $P_{(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)}(x, t)$ de (4.6). Il reste à la comparer avec les données $P^*(x_i, t)$. Pour cela on peut utiliser la norme $L^2([0, T])$ en chacun des x_i en posant $\|u\|^2 = \sum_{i=1}^2 \|u(x_i, t)\|_{L^2[0, T]}^2$, et définir une erreur relative E selon $E = \|P^* - P\|/\|P^*\|$.

La valeur s_m de s correspondant au minimum de E sur \mathcal{C} donne pour $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ l'estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ qui permet le mieux de reproduire les données sur la base de notre méthode. Cette procédure et ce critère objectif ont été appliqués à des données numériques afin de tester cette démarche.

4.3.6 Expérience numérique

Nous l'avons tout d'abord appliquée à des solutions de l'équation (3.29) obtenues numériquement et correspondant à un intervalle de temps plutôt long. Ensuite nous avons examiné ce que deviennent les estimations lorsqu'on les applique à des profils perturbés de diverses façons.

La procédure ci-dessus a été appliquée à des solutions $P^*(x, t)$ de (4.6) pour $x \in [0, 1]$, correspondant à des paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ arbitrairement fixés. La condition $\frac{\partial P^*}{\partial x}(x, t) = 0$ a été imposée en sortie, le flux $\rho_0 1_{[0, t_0]}(t)$ a été imposé à l'entrée, et les moments ont été déterminés en approchant \mathbb{R}^+ par $[0, 30t_0]$. La procédure a d'abord été appliquée aux $P^*(x, t)$ elles mêmes, ensuite ces solutions ont été modifiées afin de simuler diverses erreurs de mesure et leurs conséquences.

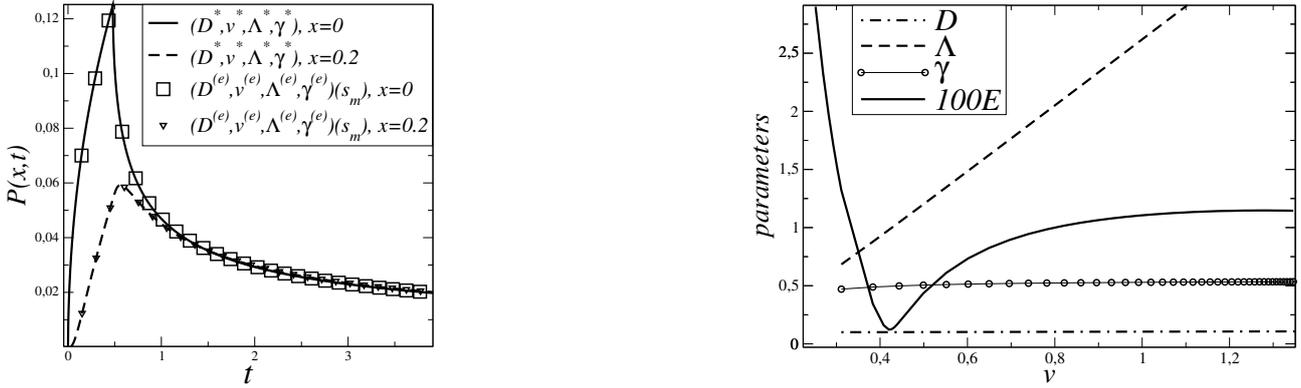


FIGURE 4.1 – Paramètres estimés et profils temporels qui en sont issus. A gauche, les courbes représentées par des lignes correspondent à $P^*(x_i, t)$ pour des paramètres initiaux $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$. A droite : paramètres estimés $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$ à partir des profils temporels $P^*(x_i, t)$ représentés à gauche par des courbes. A gauche, les symboles représentent les profils temporels calculés à partir des estimations associées au minimum de E . De plus, les positions des profils utilisés pour l'estimation sont $x = 0$ et $x = 0.2$.

4.3.6.a Mise en oeuvre numérique de l'estimation sans ajout de bruit

Chaque test pratiqué sur les profils temporels $P^*(x, t)$ avec un nombre de Peclet $\frac{v^*}{D^*}$ plus grand que 1 donne un résultat sous forme de paramètres $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ avec $s \in \mathbb{R}^+$. Pour des nombres de Peclet $\frac{v^*}{D^*} \geq 5$ avec $\gamma^* \leq 0,97$, un sous ensemble de \mathcal{C} montre des valeurs de l'erreur relative E inférieures à $5/100$, et même à $1/100$ pour le point $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$. Bien que les profils $P_{(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)}$ ne puissent être distingués des $P^*(x, t)$ sur les figures 4.1 et 4.2, les paramètres estimés $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ réalisent une approximation plus ou moins précise des "vrais" paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Plus précisément, au cours de nombreux essais avec $\gamma^* \leq 0.8$, nous avons obtenu les paramètres γ, v, Λ et D avec une précision relative de $2/100, 5/100, 13/100, 15/100$ respectivement, comme l'indique la table 4.1.

Les valeurs de γ^* supérieures à 0.8 rendent en général les choses plus difficiles. On peut le voir avec l'exemple illustré par la figure 4.2. Signalons que les figures 4.1 et 4.2 montrent des profils bien différents : dans le premier cas, le signal reste intense sur toute la durée de l'observation. Dans le second cas, il est rapidement très faible. La première situation donne une courbe $(s, \gamma^{(e)}(s))$ très proche de (s, γ^*) . Lorsque le signal est faible aux grands temps, au contraire, on obtient des estimations $\gamma^{(e)}(s)$ pouvant être proches de 0 et loin de γ^* . Avec des données "synthétiques" le minimum de E est marqué et ces valeurs sont immédiatement

D^*	v^*	Λ^*	γ	E_m	$\frac{D^{(e)}(s_m) - D^*}{D^*}$	$\frac{v^{(e)}(s_m) - v^*}{v^*}$	$\frac{\Lambda^{(e)}(s_m) - \Lambda^*}{\Lambda^*}$	$\frac{\gamma^{(e)}(s_m) - \gamma^*}{\gamma^*}$
0.1	0.5	1.2	0.5	3/1000	< 1/100	10/100	15/100	< 1/100
0.1	0.5	1.2	0.6	1/1000	4/100	5/100	5/100	< 1/100
10^{-3}	0.46	0.89	0.4	1.5/1000	1/100	1/100	1/100	2/100
10^{-3}	0.46	0.84	0.5	9/1000	< 1/100	< 2/100	2/100	2/100
10^{-3}	1	1	0.4	10/1000	2/100	1/100	1/100	2/100
10^{-3}	0.46	0.84	0.91	7/1000	7/100	5/100	5/100	< 1/100
10^{-3}	0.46	0.84	0.65	6/1000	1/100	3/100	6/100	2/100
0.1	0.5	1	0.9	16/1000	17/100	14/100	30/100	2/100

TABLE 4.1 – Minimum E_m de E et erreurs relatives sur l'estimation des paramètres, à partir de données numériques.

disqualifiées.

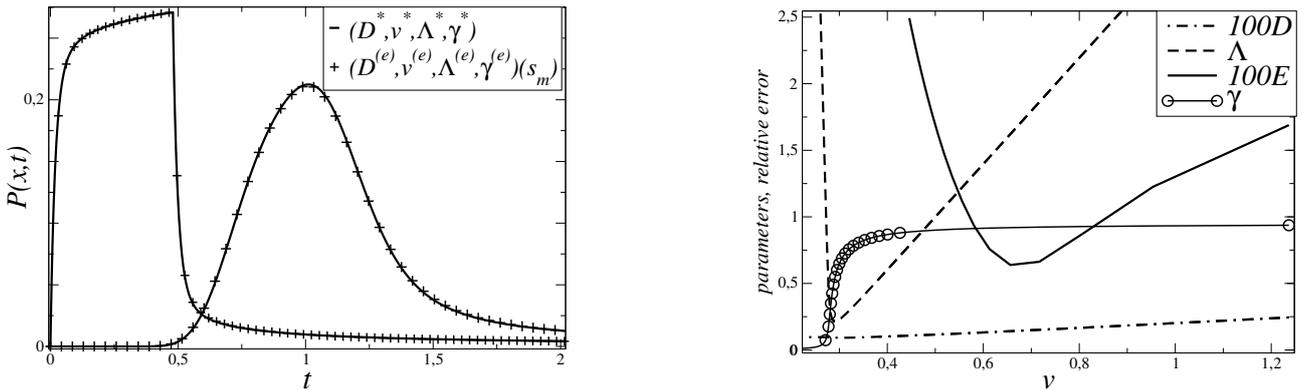


FIGURE 4.2 – Les paramètres initiaux $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.001, 0.46, 0.84, 0.89)$. A gauche, les profils temporels correspondant $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ et $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$. A droite, paramètres estimés et erreur relative de E .

Il se trouve que de nombreux quadruplets (D, v, Λ, γ) donnent presque les mêmes profils sur des intervalles de temps finis. Dans le cas de l'exemple représenté sur la figure 4.2, de nombreuses estimations donnent des profils impossibles à distinguer à l'oeil nu, aux temps finis. Cependant ces différentes estimations montrent des valeurs de $\gamma^{(e)}(s)$ suffisamment différentes pour correspondre à des comportements asymptotiques visiblement différents (mais les différences ne sont pas énormes). Les profils représentés par la figure 3.9 du chapitre 3 pour illustrer le comportement asymptotique des solutions du MIM fractionnaire, correspondent l'un aux paramètres $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$, l'autre aux paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ de la figure 4.2. La méthode exposée ici ne permet

donc pas, à elle seule, d'estimer les paramètres avec une grande précision. Pour améliorer cette précision, nous l'utilisons comme point de départ d'une méthode d'optimisation qui détermine un chemin (dans l'espace des paramètres) à l'aide du calcul du gradient de E^2 sur le principe de l'état adjoint [71][88][104]. Cette autre méthode a besoin d'une première estimation pour atteindre une grande efficacité. En l'absence d'un point de départ relativement proche des "vrais" paramètres, elle peut ne donner aucun résultat. Par contre, lorsqu'elle fonctionne dans les conditions de la présente expérience numérique, en partant de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ elle trouve $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$ avec une erreur relative inférieure à 1/100.

Afin de faciliter l'interprétation de données expérimentales, nous avons étudié ce que devient notre méthode d'inversion lorsque les erreurs de mesure polluent les données. Pour cela, nous avons tout d'abord ajouté un bruit blanc gaussien aux $P^*(x, t)$. Ensuite nous avons examiné ce que deviennent les estimations lorsqu'on est obligé de tronquer les données parce que le bruit devient comparable au signal.

4.3.6.b Mise en oeuvre numérique de l'estimation avec ajout du bruit

Nous testons ici notre méthode avec des données fabriquées à partir des profils temporels $P^*(x, t)$, utilisés au paragraphe précédent.

Pour évaluer comment le bruit dégrade l'estimation des paramètres, nous avons ajouté à chaque $P^*(x, t)$ des réalisations aléatoires indépendantes de ηB où B représente un bruit blanc gaussien de variance $\sigma = 10^{-5}$. Ici η est un coefficient que nous faisons varier pour simuler des bruits d'amplitudes variées. Pour un bruit d'amplitude faible (comparée aux données), notre méthode donne des résultats qui n'ont pas beaucoup changé. Les figures 4.3 et 4.4 montrent qu'on commence à observer des changements significatifs lorsque le rapport signal sur bruit descend aux environs de 10. Avec un bruit de niveau constant, ceci se produit lorsque le signal faiblit, c'est à dire au niveau de la traînée des courbes de percée. Pour l'exemple de la figure 4.1 ceci se produit avec $\eta = 100$ mais dans le cas de la figure 4.2 qui montre des traînées plus faibles ceci se produit beaucoup plus tôt avec des valeurs de η beaucoup plus faibles. Ce bruit réalisant un rapport signal sur bruit de 10 transforme la courbe \mathcal{C} en plusieurs petites courbes qui se chevauchent les unes des autres, comme l'illustre la figure 4.4.

Cette analyse cesse d'être pertinente avec des profils montrant des traînées moins épaisses, comme ceux représentés sur la figure 4.2. Pour ces profils, le

signal devient comparable au bruit de mesure pour des valeurs de η beaucoup petites.

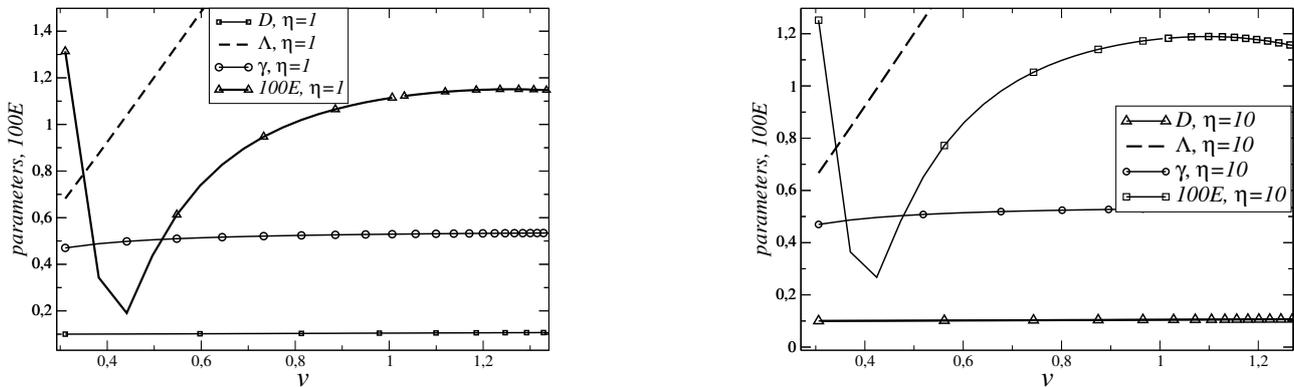


FIGURE 4.3 – Effet d'un bruit gaussien artificiel d'amplitude très faible devant le signal. Les vrais paramètres sont $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$ et l'estimation a été effectuée en ajoutant ηB à P^* , avec $\eta = 1$ à gauche et $\eta = 10$ à droite. Les paramètres estimés et les valeurs de E diffèrent peu de ce que montre la partie droite de la figure.

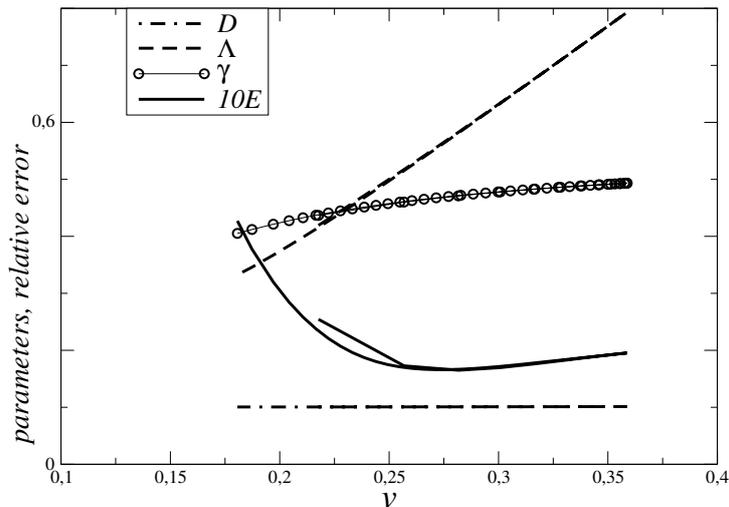


FIGURE 4.4 – Effet d'un bruit gaussien artificiel réalisant un rapport signal sur bruit de l'ordre de 10 (avec $\eta = 100$) pour de "vrais" paramètres égaux à $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.1, 0.5, 1.2, 0.5)$. L'allure générale de la courbe \mathcal{C} ressemble encore à ce qu'on obtient sans bruit. Cependant, les estimations des 4 paramètres couvrent des plages réduites qui ne contiennent pas toutes les vraies valeurs. La courbe \mathcal{C} est en quelque sorte repliée en plusieurs courbes plus petites qui se recouvrent partiellement. Ceci se voit nettement sur la représentation de l'erreur E . On voit aussi que Λ est représenté par au moins deux traits superposés, comme D et γ .

4.3.7 Mise en oeuvre numérique avec des données tronquées

Souvent, le bruit n'est pas gaussien, souvent aussi son amplitude est vite comparable aux données, comme dans l'exemple qui vient d'être évoqué. Ceci

correspond à des profils montrant un pic assez net, séparé de la traînée, alors que celle-ci est difficile à utiliser justement parce qu'elle correspond à un signal faible. C'est le cas pour des profils comme ceux des figures 4.2 et 4.5, qui, de ce point de vue, sont bien différents de celui de la figure 4.1.

Pour avoir une idée de ce qu'on peut espérer de données tronquées environ à deux fois la largeur du pic, nous avons appliqué notre méthode d'inversion à $1_{[0,t_c]}P^*(x_i, t)$ au lieu de $P^*(x_i, t)$. Avec $t_c = 6$ (pour $t_0 = 0.48$) (voir figure 4.6) nous avons obtenu pour la courbe \mathcal{C} une allure très voisine de celles correspondant aux plus grandes valeurs.

Cependant le minimum de E est peu net, bien qu'il donne une estimation $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ proche de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. En tronquant les données un peu plus tôt, on obtient encore une estimation précise (voir figure 4.7). Cependant elle est portée par une branche beaucoup plus petite. En tronquant les données encore plus tôt, cette branche disparaît et est remplacée par une nouvelle, avec des valeurs de γ supérieures à 1. Le minimum de E est réalisé par une autre branche, portant des valeurs négatives de Λ , mais γ^* est très mal estimé. Cependant, les valeurs de $(D^{(e)}(s), v^{(e)}(s))$ varient très peu tant que E n'est pas trop loin de son minimum, ce qui fait que D^* et v^* sont assez bien estimés.

En faisant partir de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ un processus d'optimisation, on améliore considérablement l'estimation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Avec de vraies données expérimentales, on est souvent conduit à les tronquer comme nous venons de le faire.

4.3.8 Application à des données expérimentales

Nous avons appliqué cette méthode à des courbes de percée issues d'une expérience de traçage en milieu poreux insaturé.

4.3.8.a Principe de l'expérience

Les données ont été recueillies dans une colonne de sable insaturé soumise à des conditions stationnaires, en termes de vitesse de Darcy et de teneur en eau. Après injection de traceur, des courbes de percée ont été enregistrées en plusieurs sections droites de la colonne, par spectrographie X . Cette technique de mesure, utilisant deux longueurs d'onde différentes, permet de mesurer la teneur en eau et la concentration en traceur. On utilise pour cela la loi de Beer Lambert qui lie l'atténuation du faisceau de rayon X et la concentration. Ces

longueurs d'onde ont été choisies en adéquation avec la nature du sable, du matériau constituant la colonne, et du traceur. Les données obtenues à l'entrée de la colonne et un peu plus loin sont représentées par des symboles sur la figure 4.7.

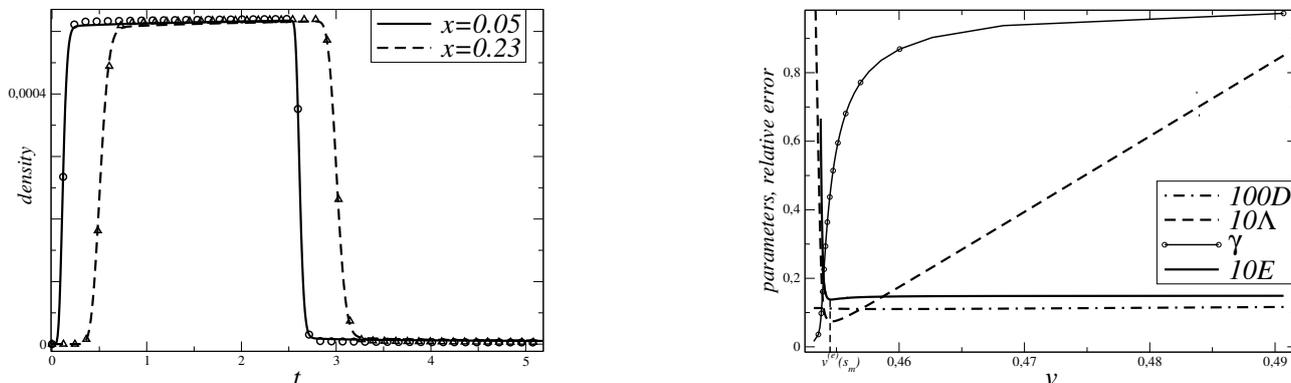


FIGURE 4.5 – Estimation des paramètres, appliqués à des données numériques tronquées à $t = t_c$. A gauche : solution du MIM fractionnaire obtenu pour $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*) = (0.001, 0.46, 0.01, 0.4)$ (lignes), ainsi que $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})$ (symboles). A droite : paramètres estimés à partir de $1_{[0, t_c]}(t)$, et valeurs de E pour $t_c = 6$, c'est à dire un peu plus que la durée du pic représentée à gauche.

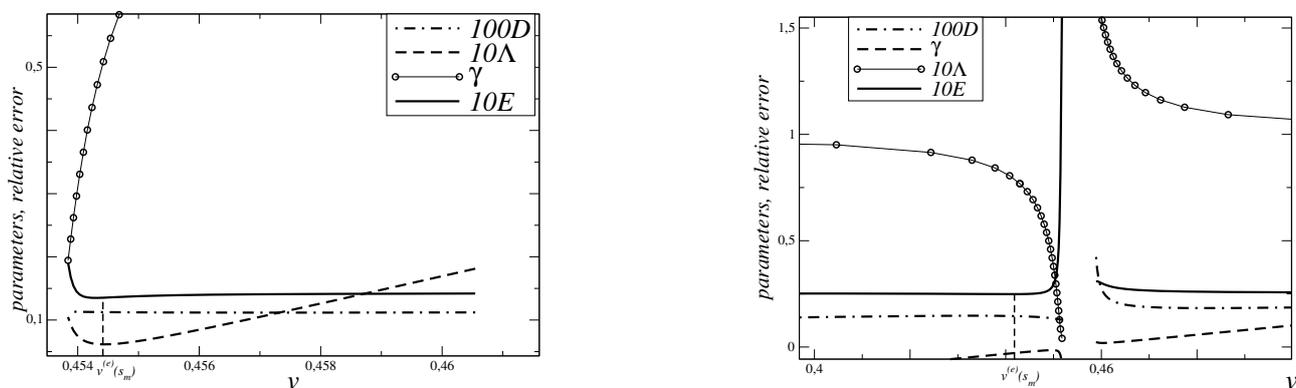


FIGURE 4.6 – Paramètres estimés à partir des données de la figure (précédente) en les tronquant à $t_c = 5$ à gauche, à $t_c = 4$ à droite. A gauche, $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s_m)$ représente encore une approximation de $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. A droite, avec une troncature plus sévère, seul $(D^{(e)}, v^{(e)})(s_m)$ approche (D^*, v^*) , $(\gamma^{(e)})(s_m) = 0.42$ correspond à une erreur relative de $10/100$, et $(\Lambda^{(e)})(s_m)$ est négatif.

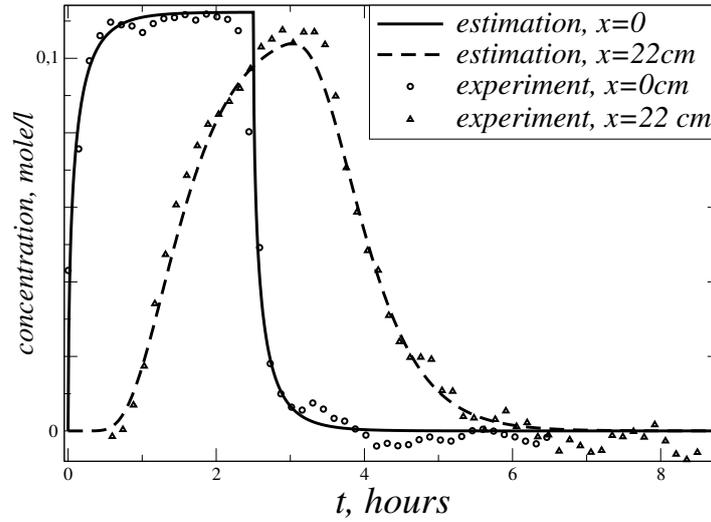


FIGURE 4.7 – Solutions du modèle (3.29) correspondant aux paramètres estimés à partir des courbes de percée expérimentales. Les traits représentent ces solutions, les données correspondent aux symboles

4.3.8.b Estimation des paramètres du transport

La densité P de traceur est liée à la concentration C par la relation $P(x, t) = \theta C(x, t)$, où $\theta(x)$ représente la teneur en eau de la section droite d'abscisse x . Ceci permet de déterminer les profils $P^*(x_i, t)$ avec $i = 1, 2$ à partir desquels on estime les paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Or, les mesures de la concentration font apparaître des valeurs négatives, forcément liées aux erreurs de mesure. Nous les avons remplacées par la valeur "zéro". De plus, leur apparition dans la traînée indique que le niveau de bruit devient comparable au signal et qu'il convient de tronquer ces données comme au paragraphe 4.3.7. On prend pour t_c le plus petit instant correspondant à une valeur négative de la concentration, dans la traînée. En effet, les valeurs négatives apparaissent aussi pour $x = 22\text{cm}$, un peu avant l'arrivée du pic de concentration. La méthode d'inversion, appliquée aux données représentées sur la figure 4.7 donne deux ensembles d'estimations, avec des valeurs de $\gamma^{(e)}(s)$ inférieures ou non à 1. Le premier ensemble correspond à des erreurs relatives trop importantes (environ 0.5), donc on l'écarte. D'autre part, toutes les estimations composant \mathcal{C} correspondent à de très petites valeurs de $\Lambda^{(e)}(s)$, positives ou non. Et le paragraphe 4.3.7 nous a montré que dans ce cas, la valeur de γ a très peu d'influence sur les profils de densité. Nous avons par conséquent calculé E sur la base de $(D^{(e)}(s), v^{(e)}(s), \Lambda^{(e)}(s), \min(1, \gamma^{(e)}(s)))$, pour obtenir des valeurs très

voisines, à partir d'un grand nombre d'estimations, donnant pour E un minimum égal 0.075 et très peu marqué. De plus, les estimations donnant des valeurs de E proches de ce minimum correspondent toutes à des $(D^{(e)}(s), v^{(e)}(s))$ presque égaux à $(25.05\text{cm}^2/h, 14.83\text{cm}/h)$. Les profils déterminés à partir de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \min(1, \gamma^{(e)}))(s_m)$ sont représentés par des lignes sur la figure 4.7. La vitesse de pore $v^{(e)}(s_m)$ ainsi déterminée est tout à fait compatible avec la vitesse de flux $V = 2.51\text{cm}/h$ mesurée dans l'expérience, compte tenu de l'hypothèse $V = \theta_m v$ communément appliquée [98], θ_m représentant la teneur en eau mobile. L'optimisation, appliquée en partant de $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, 0.5)(s_m)$ donne $D = 22.3\text{cm}^2/h, \Lambda = 8 \times 10^{-4}, v = 15.1\text{cm}/h, \gamma = 0.43$ avec la même valeur pour E [71]. Donc, à part pour le paramètre γ , la méthode des moments est assez compétitive.

4.4 Conclusion

La transformée de Laplace fournit des outils permettant d'inverser les équations différentielles fractionnaires sur la base de données représentant les profils temporels. Nous avons présenté pour le fMIM une méthode d'inversion qui devine les paramètres en utilisant une expression analytique du taux d'accroissement de $\ln \tilde{P}(x, s)$ par rapport à x , en fonction de s . Cependant, cette expression est exacte dans des conditions idéales seulement. La méthode d'inversion donne un ensemble de jeux de 4 paramètres à partir des données. En les introduisant dans la version discrète du fMIM on obtient une solution numérique dont l'écart avec ces données indique si les profils calculés numériquement à partir de ces paramètres représentent bien les données, ou non. Le minimum de cet écart représente un critère objectif pour choisir un jeu de paramètres parmi tous les résultats de l'inversion. Ce jeu estime les vrais paramètres d'une expérience numérique, mais avec une précision insuffisante lorsque γ est voisin de 1. La précision est par contre tout à fait convenable pour initialiser une méthode de gradient, qui est toujours plus performante pour trouver le paramètre γ .

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

Le MIM est un modèle très intéressant pour le transport de soluté en milieu poreux, parce que la matière solide donne aux particules de fluide, et de soluté, des occasions d'être arrêtées. Ceci équivaut à supposer que les mouvements des particules de fluide comme de traceur peuvent être décrits, à petite échelle, par des marches au hasard faites de déplacements aléatoires gaussiens, interrompus par des arrêts de durées aléatoires. La version classique du MIM suppose une cinétique d'ordre 1 pour les échanges entre les fractions mobiles et immobiles de soluté. Ceci équivaut à supposer des arrêts dont la durée possède une moyenne finie. Nous avons mis l'accent sur une version récente de MIM, qui suppose des arrêts dont la durée suit une statistique de Lévy, de moyenne infinie. Ceci équivaut à imposer que les échanges entre les fractions mobiles et immobiles sont régis par une convolution dont le noyau est une puissance. Une telle convolution n'est autre qu'une intégrale fractionnaire et ceci correspond à la version fractionnaire du MIM. L'équation d'advection dispersion, c'est à dire le mouvement Brownien combiné à l'advection, est un cas particulier de ce modèle. Comme dans ce cas particulier, le MIM fractionnel a deux grilles de lecture : une équation aux dérivées partielles et un processus stochastique. Nous avons tiré parti de cette dualité qui permet au moins d'être sûr de la qualité des approximations numériques utilisées, sous la forme de marche au hasard ou de discrétisation de l'e.d.p (équation aux dérivées partielles).

Ce point est important, dans la mesure où on s'adresse à des modèles innovants. L'aspect " modèle stochastique " est très riche car il permet d'accéder aux distributions des déplacements des particules entre deux instants donnés. Il permet aussi de décrire des statistiques plus complexes comme celles qui correspondent aux positions des particules en plusieurs instants. Ce point de vue devient important lorsqu'il s'agit d'interpréter une expérience de résonance magnétique nucléaire, par exemple. Dans ce travail, nous avons plutôt concentré toute notre

attention sur l'évolution de la densité de particules. Elle peut être entièrement décrite à l'aide de l'équation aux dérivées partielles d'ordre fractionnaire qu'on appelle MIM fractionnaire, et son interprétation en termes de processus de transport a essentiellement servi à contrôler les simulations. D'ailleurs la formulation en termes d'équation aux dérivées partielles est plus souple lorsqu'on doit représenter un milieu dont les paramètres du transport dépendent de la position, au lieu d'être à la fois uniformes et constants.

La discrétisation de l'e.d.p. fractionnaire a servi de base pour tester une méthode d'inversion du MIM fractionnaire. Cette méthode devine les 4 paramètres du modèle, à partir de deux courbes de percée. Sa précision n'est pas optimale, cependant elle est très appropriée pour servir de base à des méthodes qui se trouvent être plus précises, à condition d'être appliquées dans un voisinage des paramètres cherchés. De plus, la méthode proposée est justifiée lorsque les paramètres du transport sont à la fois uniformes et constants. Donc éventuellement, il faut veiller à ne l'appliquer que dans un sous domaine où ces conditions peuvent être réalisées.

Le modèle fractionnaire étudié a vocation à représenter le transport de traceurs pouvant être immobilisés, puis relâchés. Nous avons en vue les milieux poreux, à cause de la matrice solide. Cependant il est utilisé pour les écoulements dans des rivières à cause de la zone hyporheïque. On devrait ainsi pouvoir l'utiliser pour représenter des écoulements dans des géométries complexes [112], ou pour représenter éventuellement le mouvement d'organismes vivants dans un environnement plus général.

D'autre part les deux versions du modèle MIM supposent des déplacements dispersifs possédant une variance finie. Dans des milieux complexes, on doit s'attendre à ce que cette hypothèse ne soit pas toujours vérifiée. Il en est de même pour les déplacements d'insectes ou d'autres animaux dans l'environnement naturel.

Bibliographie

- [1] Adams, E. E., and Gelhar L. W. 1992. " Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer : 2. Spatial moments analysis ". Water Resour. Res., Vol.28, Num.12, P.3293-3307.
- [2] Argarwal, R.P. 1953. "A propos d'une note de M. Pierre Humbert. C. R. Académie des Sciences". 236 :2031 - 2032.
- [3] Bakhvalov, N. Panasenko, G. 1990. " Homogenization : averaging processes in periodic media ". Mathematics and its applications, vol.36.
- [4] Barkai, E. and Metzler, R. and Klafter, J. 2000. " From continuous time random walks to the fractional Fokker-Planck equation ". Physical Review E. vol.61, numb.1, P.132.
- [5] Becker, M. W., and Shapiro A. M. 2000. " Tracer transport in fractured crystalline rock : Evidence of nondiffusive breakthrough tailing ". Water Resources Research, Vol.36, Num.7, P.1677-1686.
- [6] Becker M. W. and Shapiro A. M. 2003. " Interpreting tracer breakthrough tailing from different forced-gradient tracer experiment configurations in fractured bedrock ". Water Resour.Res., Vol.39, Num.1, P.1024.
- [7] Becker-Kern, P., Meerschaert, M.M. and Scheffler, H.P. 2004. " Limit theorem for continuous-time random walks with two time scales ". Journal of applied probability, Vol.41, Numb.2, Applied Probability Trust, P.455-466.
- [8] Benson D. A., Schumer R. , Meerschaert M. M. , and Wheatcraft S. W. 2001. " Fractional dispersion, Lévy motion, and the MADE tracer tests ". Transp. Porous Media, 42(1/2), P.211-240.
- [9] Benson D.A., Wheatcraft M.S., Meerschaert M.M. 2000. " The fractional order governing equation of Lévy motion ". Water Resour. Res., Vol.36, Num.6, P.1413-1423.
- [10] Benson, D.A., S.W. Wheatcraft, and M.M. Meerschaert. 2000. " Application of a fractional advection-dispersion equation ". Water Resour. Res. 36 :1403-1412 .

-
- [11] Benson, D.A. and Meerschaert, M.M., 2009. " A simple and efficient random walk solution of multi-rate mobile/immobile mass transport equations ". *Advances in Water Resources.*, vol.32, numb.4, Elsevier, PP.532–539.
- [12] Berkowitz, B., and Scher H. 1997. " Anomalous transport in random fracture networks ". *Physical Review Letters*, Vol.79, Num.20.
- [13] Berkowitz, B., Cortis, A., Dentz, M. and Scher, H. 2006. " Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk ". *Reviews of Geophysics*, Vol.44, Numb.2, American Geophysical Union, p.RG2003.
- [14] Berkowitz, B., Cortis, A., Dentz, M. and Scher, H. 2006. "Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk" *Rev. Geophys.* Vol.44, Num.2.
- [15] Blanc, X. Le Bris C. and Lions P.-L., 2007. " Stochastic homogenization and random lattices ". *Journal de Mathematiques Pures et Appliques*, Vol. 88, Num. 1, p. 34-63.
- [16] Boano, F., Packman, J.P., Cortis, A., Revelli, R. and Ridolfi, C. 2007. " A continuous time random walk approach to the stream transport of solutes ". *Water Resources Research*, Vol.43, Num.10, P.10425.
- [17] Bromly, M. and Hinz, C. 2004. " Non-Fickian transport in homogeneous unsaturated repacked sand ". *Water Resour. Res.* Vol. 40, W07402.
- [18] Burns, E. 1996." Results of 2-dimensional sandbox experiments : Longitudinal dispersivity determination and seawater intrusion of coastal aquifers ". Master's thesis, Univ. of Nev., Reno.
- [19] Cadavid, AC and Lawrence, JK and Ruzmaikin, AA. 1999. "Anomalous diffusion of solar magnetic elements", *The Astrophysical Journal*, Vol.521, P.844.
- [20] Caputo, M. 1969. "Elasticité e Dissipazione". Zanichelli.
- [21] Caputo, M. 1967. " Linear Model of Dissipation whose Q is almost Frequency Independent-II ". *Geophysical. J. R. Astr. Soc.*, vol 13, Num.5, PP.529-539.
- [22] Chambers, J.M., Mallows, C.L. and Stuck, B.W. 1976. " A Method for simulating stable random variables ". *Journal of the American Statistical Association*, P.340-344.
- [23] Champ, D., W. Merrit and Young J. 1982. " Potential for the rapid transport of plutonium in groundwater as demonstrated by core column studies
-

- ". Scientific Basis for Radioactive Waste Management. Scientific Basis for Nuclear Waste Management V, Ed. North-Holland, P.745-754.
- [24] Coats, KH and Smith, BD. 1964. "Dead-End Pore Volume and Dispersion in Porous Media". Old SPE Journal., Vol.4, Num.1, P.73-84.
- [25] Cortis A. and Berkowitz B. 2004. " Anomalous transport in classical soil and sand columns ". Soil Sci. Soc. Am. J., Vol.68, p. 1539.
- [26] Das, B.S. and Kluitenberg, G.J. 1996. " Moment analysis to estimate degradation rate constants from leaching experiments ". Soil Science Society of America Journal, Vol.60, Num.6, P.1724–1731.
- [27] Diethelm, K., N. J. Ford, A. D. Freed, and Y. Luchko, 2005. " Algorithms for the fractional Calculus; A selection of numerical methods ". Comput. Methods Appl. Mech. Engy 184, P.743-773.
- [28] Deng Z. Q., De Lima J. , De Lima M. and Singh V. P. 2006. " A fractional dispersion model for overland solute transport ". Water Resour. Res., Vol.42, Num.3, P.03416
- [29] Dybiec, B. 2010. " Anomalous diffusion on finite intervals ". Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment, Vol.2010, P01011.
- [30] Eggleston, J., and Rojstaczer S. 1998 " Identification of large-scale hydraulic conductivity trends and the influence of trends on contaminant transport ". Water Resour. Res., Vol.34, Num.9, P.2155-2168.
- [31] Erdélyi, A. 1955. " Higher Transcendental Functions ". New York, vol.1.
- [32] Erdélyi, A. 1955. " Higher Transcendental Functions ". New York, volume 2.
- [33] Erdélyi, A. M 1955. " Higher Transcendental Functions ". New York, vol.3.
- [34] Fabrie, P. 1989 " Solutions fortes et majorations asymptotiques pour le modèle de Darcy Forchheimer en convection naturelle ". Ann. Fac. Sci. Toulouse Math.(5). Vol.10. P.7–26.
- [35] Feller, W. 1966. " An Introduction to probability theory and its applications ". Vol.II J Wiley and sons, New York.
- [36] Feller, W. 1971. "Introduction to Probability Theory and its Applications". IIj 2nd edition. Wileyj New York
- [37] Gafiychuk, V. and Datsko, B. and Meleshko, V. 2008. " Mathematical modeling of time fractional reaction–diffusion systems ". Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.220, Num.1, P.215-225.
-

-
- [38] Gafiychuk, V. and Datsko, B. 2008. " Stability analysis and limit cycle in fractional system with Brusselator nonlinearities ". *Physics Letters A*, Vol.372, Num.29, P.4902-4904.
- [39] Gafiychuk, V. and Datsko, B. 2008. " Inhomogeneous oscillatory solutions in fractional reaction–diffusion systems and their computer modeling ". *Applied Mathematics and Computation*, Vol.198, Num.1, P.251-260.
- [40] Garabedian, S.P., D.R. LeBlanc, L.W. Gelhar, and M.A. Celia, 1991. " Large-scale natural gradient tracer test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts 2. Analysis of spatial moments for a nonreactive tracer". *Water Resour. Res.* Vol.27, Num.5,, P.911-924.
- [41] Gaudet, J.P, Vachaud, H. and Wierenga, G. and others. 1977. " Solute Transfer, with Exchange between Mobile and Stagnant Water, through Unsaturated Sand1 ". *Soil Science Society of America Journal*, Vol.41, Num.4, P.665.
- [42] Gnedenko, B. V. 1954. " Cours teorii veroiatnostei ".publisher.Gostekhizdat
- [43] Goncalves, Eric. 2005. " Résolution Numérique, Discrétisation des EDP et EDO".
- [44] Gorenflo R. and Mainardi F. 2002. " Discrete random walk models for space-time fractional diffusion ". *Chemical physics* 284, 2002, pp 5216-541.
- [45] Gorenflo R. and Minardi F.2002. " Discrete random walk models for space-time fractional diffusion ".*Chemical physics*, Vol.284, pp 5216-541.
- [46] Govindarajou, R.S. et Das, B.S. 2007. " International Conference on Organic Agriculture and Food security"
- [47] Haggerty, R. S., McKenna S. A. and Meigs L. C. 2000. " On the late-time behavior of tracer test breakthrough curves ". *Water Resources Research*, Vol.36, Num.12, P.3467-3479
- [48] Haggerty, R. and Gorelick, S.M. 1995. " Multiple-rate mass transfert for modeling diffusion and surface reaction in media with pore-scale heterogeneity ". *Water Resources Research*, Vol.31, Numb.10, P.2383-2400.
- [49] Haggerty, D.A and al. 1999. " Phylogenetic characterization of novel transport protein families revealed by genome analyses ". *Biochim. Biophys. Acta*, Vol.1422, Num.1, P.1–56.
- [50] Harvey, C.F. and Gorelick, S.M. 1995. " Temporal moment-generating equations : Modeling transport and mass transfer in heterogeneous aquifers". *Water Resources Research*. Vol.31, Numb.8, P.1895–1911.
-

-
- [51] Harvey, C. F. and Gorelick S. M. 2000. " Rate-limited mass transfer or macrodispersion : Which dominates the plume evolution at the Macrodispersion Experiment (MADE) site " *Water Resour.Res.*, Vol.36, P.637-650.
- [52] Hilfer, E. 2000. "Applications of fractional calculus in physics". World Sci publishing, New York.
- [53] Huang G. H., Huang Q. Z. and Zhan H. B. 2006. "Evidence of one-dimensional scale-dependent fractional advection-dispersion ".*J. Contam. Hyd.*, Vol.85, P.53-71.
- [54] Kanter, M. 1975. "Stable Densities under Change of Scale and Total Variations Inequalities".*The Annals of Probability*, P. 697–707.
- [55] Kim, S., and M. L. Kavvas. 2006, "Generalized Fick's law and fractional ADE for pollutant transport in a river : detailed derivation". *Journal of Hydrologic Engineering*, Vol.11, Num.1, P.80-83.
- [56] Kolmogorov, A.N and Gnedenko, B.V. 1954. "Limit distributions for sum of independent random variables " . Addison-Wesley, Cambridge, Mass.
- [57] Krepsheva, N., Di Pietro, L. and Néel, M.C. 2007. " Enhanced Tracer Diffusion in Porous Media, with an Impermeable Boundary " . *Advances in Fractional calculus*, Springer, P.171–184.
- [58] Leij, F.J. and Dane, J.H. 1992. " Moment method applied to solute transport with binary and ternary exchange" *Soil. Sci. Soc. Am. J.* Vol.56, Num.3, P.667.
- [59] Leij, F.J. and Dane, J.H. 1992." Moment method applied to solute transport with binary and ternary exchange " . *Soil Science Society of America journal (USA)*
- [60] Levy, M. and B. Berkowitz B. 2003. " Measurement and analysis of non-Fickian dispersion in heterogeneous porous media " . *J. Contam. Hydr.*, Vol.64, P.203.
- [61] Lévy P. 1937. " Théorie de l'addition des variables aléatoires " . Gauthiers-Villars, Paris.
- [62] Lévy, P. and Borel, È. 1954. " Théorie de l'Addition des Variables Aléatoires " . Gauthier-Villars Paris, Vol.1.
- [63] Lukashchuk, S.Yu. 2011. " Estimation of parameters in fractional subdiffusion equations by the time integral characteristics method
- [64] Luc, Devroye 1986. "Non-Uniform Random Variate Generation", édité chez Springer, (luc.devroye.org/rnbookindex.htmlEn cache)
-

-
- [65] Mainardi, F. and Pagnini, G. 2008. " Mellin-Barnes integrals for stable distributions and their convolutions ". *Fract. Calc. Appl. Anal*, Vol.11, Nul.4, P.443–456
- [66] Magdziarz, M. Weron, A. and Klafter, J. 2008. " Equivalence of the fractional Fokker-Planck and subordinated Langevin equations : the case of a time-dependent force " *Phys. Rev. Lett.* **101**, Num.21, P.210601.
- [67] Mainardi, Francesco. 2011 "On the distinguished role of the Mittag-Leffler and Wright functions in fractional calculus", Via Irnerio 46, I-40126 Bologna, Italy , [http ://www.fracalmo.org](http://www.fracalmo.org).
- [68] Mainardi, F., Luchko, Yu, Pagnini, G. 2007." The fundamental solution of the space-time fractional diffusion equation ". Arxiv preprint [cond-mat/0702419](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0702419), Vol.4, Num.2, P.153-192.
- [69] Mandelbrot B. (1962). " Sur certains prix Spéculatifs : faits empiriques et modèle basé sur le processus stables additifs non-gaussiens de Paul Lévy ". *C.R. Académie des Sciences*, Vol.254. P.3968-3970.
- [70] Maryshev, B., Joelson, M. D. Lyubimov, T. Lyubimova, and Néel, M. C. 2009. " Non Fickian flux for advection-dispersion with immobile periods " *J. Phys. A : Math. Theor.* Vol.42, P.115001.
- [71] Maryshev, B. Cartalade, M. Néel, M.C. Soumis en 2012. " Adjoint state methode for fractional mobile-immobile model "
- [72] Meerschaert, M.M. and Tadjeran, C. 2004. "Finite difference approximations for fractional advection–dispersion flow equations". *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol.172, Num.1 p.65–77.
- [73] Meerschaert, M. M. and Scheffler, H. P. 2004. " Limit theorems for continuous-time random walks with infinite mean waiting times ". *J. Appl. Prob.* Vol.41, Num.3, P.623–638.
- [74] Meerschaert, M. M. and Scheffler, H. P. 2001. " Limit distributions for sum of independent random vectors : Heavy tails in theory and practice". *Wiley-Interscience*, Vol.321.
- [75] Metzler, R. and Klafter, J. 2000. " The random walk's guide to anomalous diffusion : a fractional dynamics approach " *Phys. Rep.* Vol.339, Num.1, P.1–77.
- [76] Metzler, R. and Barkai, E. and Klafter, J. 1999. "Anomalous diffusion and relaxation close to thermal equilibrium : A fractional Fokker-Planck equation approach", *Physical review letters*, Vol.82, Num.18, P.3563-3567.
-

- [77] Metzler, R. and Klafter, J. 2004 " The restaurant at the end of the random walk : recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics ". J. Phys. A : Math. Gen. Vol.37, P.R161-R208.
- [78] Miller, K.S. and Ross, B. 1993. " An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations ". John Wiley & Sons.
- [79] Mittag-Leffler, G.M. 1903. " Sur la nouvelle fonction $E_\alpha(x)$ ". C. R. Académie des Sciences. Paris, Vol.137, P.554-558.
- [80] Mittag-Leffler, G.M. 1905. "Sur la représentation analytique d'une branche uniforme d'une fonction homogène". Acta Mathematica, Vol.29, P.101-182.
- [81] Montroll E. W. and Weiss G. H. 1965."Random walks on lattices. II". J. Math. Phys. Vol.6, Num.2, p.167-181.
- [82] Nathalia, Krepysheva. 2005. "Transport anormale de traceurs passif en milieu poreux hétérogène équations farctions simulation numérique et conditions aux limites". Université d'Avignon (thèse).
- [83] Néel, M.C, Abdennadher, A. and Joelson, M. 2007. " Fractional Fick's Law : the direct way ". J. Phys. A :Mathematical and. Theoretical, Vol.40, P.8299-8314.
- [84] Néel. M. C., Zoia, A. and Joelson, M. 2009. " Mass transport subject to time-dependent flow with non-uniform sorption in porous media". Phys. Rev. E. Vol.80, Num.5, P.056301.
- [85] Nolan J.P. 1997. " Numerical approximation of stable densities and distribution functions ". New York : Marcel Dekker, c1985-c22000. Vol.13, Num.4, P. 759-774.
- [86] Nolan, J. P. " Stable Distributions - Models for Heavy Tailed Data ". Birkhauser. Boston, to appear (2012)
- [87] Oldham, K.B. and Spanier, J. 1974. " The Fractional Calculus : Theory and Applications of Differentiations and Integrations to arbitrary Order ". Vol.111. Academic Press. New York.
- [88] Ouloin,M. Néel, M.C. Joelson, M. Cartalade, A. 2011. " Inversion d'un modèle de dispersion avec effets de mémoire. Acte de 20è Congrès français de Mécanique Besançon 29 Août-2 Septembre 2011", P.2708-2713.
- [89] Pachepsky, Y., Timlin, D. and Benson, D. A. 2001. " Transport of water and solutes in soils as in fractal porous media ". SSSA SPECIAL PUBLICATION, Vol.56, P.51-75.
-

-
- [90] Pang, L. and Goltz, M. and Close, M. 2003. " Application of the method of temporal moments to interpret solute transport with sorption and degradation ". *Journal of contaminant hydrology*, Vol.60, Num.1-2, P.123–134.
- [91] Paradisi, P. et al. 2001. "The fractional Fick's law for non-local transport processes". *Statistical Mechanics and its Applications*, Vol.293, Num.1, P.130-142.
- [92] Parker, J.C. and Valocchi, A. 1986. " Constraints on the validity of equilibrium and first-order kinetic transport models in structured soils ". *Water Resour. Res.* Vol.22, Num.3, pp 399-407.
- [93] Penrose, W. Polzer, W. Essington, E. Nelson, D. and Orlandini, K. 1990. " Mobility of plutonium and americium through a shallow aquifer in a semiarid region ". *Environ. Sci. Technol*, Vol.24, Num.2, P.228-234.
- [94] Podlubny, I. 1997. "The Laplace transform method for linear differential equations of the fractional order ". Arxiv preprint [funct-an/9710005](https://arxiv.org/abs/funct-an/9710005),
- [95] Qianqian, Yang. Fawang, Liu, and Ian, Turner. 2009. " Stability and Convergence of an Effective Numerical Method for the Time-Space Fractional Fokker-Planck Equation with a Nonlinear Source Term", *International Journal of Differential Equations*, Vol.2010
- [96] Raven K.-S., K.-S. Novakowski et P. A. Lapcevic 1988. " Interpretation of field tracer tests of a single fracture using a transient solute storage model ". *Water Resources Research*, Vol.24, Num.12, pp.2019-2032.
- [97] Samko, S. G., Kilbas. A. A. and Marichev, O. I. 1993. " Fractional integrals and derivatives : theory and applications ". (Gordon and Breach, New York).
- [98] Sardin, M. and Schweich, D. and Leij, FJ and Van Genuchten, M.T. 1991. " Modeling the nonequilibrium transport of linearly interacting solutes in porous media : A review ". *Water Resour. Res.* Vol.27, Num.9, P.2287-2307.
- [99] Schneider, W.R. 1986. " Stable distributions : Fox function representation and generalization ". *Stochastic processes in classical and quantum systems*, Vol.262, P.497-511.
- [100] Schumer, R., Benson, D. A., Meerschaert, M. M. and Bauemer, B. 2003. " Multiscaling fractional advection-dispersion equations and their solutions ". *Water Resour. Res.* Vol.39, Num.1 P.1022.
-

-
- [101] Schumer, R., D. A. Benson, M. M. Meerschaert, and S.W. Wheatcraft. 2001, "Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation", *J. Contam. Hyd.*, 38, P.69-88
- [102] Shapiro A. M., Hsieh P. A. 1998. " How good are estimates of transmissivity from slug tests in fractured rock ". *Ground Water*. Vol.36, Num.1, P.37-48.
- [103] Shiriyayev, A.N. 1984. " Probability. Translated from the Russian by RP Boas ". *Graduate Texts in Mathematics*, Vol.95, P.336.
- [104] Sum, Ne Zhang. 2010. " Inverse problems in ground water modeling, theory and application of transport in porous media". *OklwerAc. publishers*, Dordredit Boston London.
- [105] Kamel, Haouam, 2007. " Existence et non-existence de solutions des équations différentielles fractionnaires ".
- [106] Tsallis, C., and E. K. Lenzi. 2002, "Anomalous diffusion : non- linear fractional Fokker-Plancker equation", *Chem. Phy*, Vol.284, Num.1-2, P.341-347.
- [107] Tsang, C.F. and Neretnieks I. 1998. " Flow Channeling in Heterogeneous Fractured Rocks " . *Reviews of Geophysics*, Vol.36, Num.2, p.275-298.
- [108] Valocchi, A. J. 1985. " Validity of the local equilibrium assumption for modeling sorbing solute transport through homogeneous soils ". *Water Resour. Res*, Vol.21, Num.6, p.808-820.
- [109] Van Genuchten, M. T. and Wierenga, P.J. 1976. 1976. "Mass transfert studies in sorbing porous media : I. Analytical solutions ". *Soil Science Society of America Journal*, Vol.40, Num.3, P.473-479.
- [110] Weron, N., 1996. "Correction to :'On the Chambers-Mallows-Stuck Methode for Simulating Skewed Stable Random Variables'". *J. HSC Research Reports*.
- [111] Xu X. F. and Graham-Brady, L. 2006. " Computational stochastic homogenization of random media elliptic problems using Fourier Galerkin method ". *Finite Elements in Analysis and Design*, Vol.42, Num.7, p.613-622.
- [112] Zheng, C. and Gorelick S. M. 2003. "Analysis of the effect of decimeter-scale preferential flow paths on solute transport", *Ground Water*, Vol.41, Num.2, p. 142-155.
-

-
- [113] Zhou, L. and Selim HM. 2003. "Application of the fractional advection-dispersion equation in porous media". Soil Science Society of America Journal, ,Vol.67, Num.4, P.1079-1084.
- [114] Zolotarev, V. 1966. " On representation of stable laws by integrals". Selected Translations in Mathematical Statistics and Probability, Vol.6, P.84-88.
- [115] Zolotarev, V. M. 1986. " One-dimensional stable distributions ". Amer Mathematical Society. Vol.65.
-

Annexe A

Discussion de l'hypothèse du milieu sem-infini, dans le cadre du MIM fractionnaire

La solution générale de l'équation (4.6) est $\tilde{P}_m(x, s) = \mathbf{A}(s)e^{-fx} + \mathbf{B}(s)e^{\lambda_+x}$ avec $\lambda_+ = \frac{v}{2D} + X(s)$.

Avec les conditions aux limites (4.6) en $x = 0$ et $\frac{\partial P_m}{\partial x}|_{x=L} = 0$, dans le domaine fini $[0, L]$, les coefficients \mathbf{A} et \mathbf{B} sont de la forme

$$\mathbf{A} = \frac{\mathcal{A}}{1 - \left(\frac{f}{\lambda_+}\right)^2} e^{-(f+\lambda_+)L}$$

et

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \frac{f}{\lambda_+} e^{-(f+\lambda_+)L}$$

L'approximation par un milieu semi-infini, que nous avons utilisée, implique donc une erreur de $(\mathbf{A} - \mathcal{A})e^{-fx}$ pour l'onde se dirigeant vers l'aval, avec

$$\frac{\mathbf{A} - \mathcal{A}}{\mathcal{A}} = \frac{\frac{f}{\lambda_+} e^{-(f+\lambda_+)L}}{1 - \left(\frac{f}{\lambda_+}\right)^2 e^{-(f+\lambda_+)L}}$$

Comme on a $\lambda_+ > \frac{v}{D}$, cette erreur est petite lorsque le nombre de Peclet $\frac{vL}{D}$ est grand. Ceci ne suffit cependant pas pour évaluer l'erreur que cette approximation implique pour les dérivées de $\tilde{P}_m(x, s)$, donc de f . Nous avons cherché à avoir une idée de l'incidence de notre approximation sur les dérivées de f . Pour cela, nous avons complété la seconde étape de la méthode des moments tronqués décrite au paragraphe 4.3.5b. Pour chaque valeur de $s > 0$, une approximation des dérivées de f a été obtenue à la première étape. Elle serait exacte si on l'avait appliquée à une solution de (3.29) dans un milieu infini. Quand on l'applique aux données synthétiques, comme au paragraphe 4.3.6, ces

données correspondent au domaine $[0, 1]$. Nous comparons donc nos approximations des $\frac{d^n f}{ds^n}(s)$ avec ce qu'on obtient en reportant dans (4.14) les estimations $(D^{(e)}, v^{(e)}, \Lambda^{(e)}, \gamma^{(e)})(s)$ obtenues pour les paramètres lors de la seconde étape. Cette comparaison, effectuée systématiquement pour chaque valeur de s permet d'écarter éventuellement les résultats qui correspondent à des erreurs relatives exagérées, concernant les dérivées de s .

Dans le cadre de l'expérience numérique réalisée au paragraphe 4.3.6a, nous disposons des valeurs des vrais paramètres $(D^*, v^*, \Lambda^*, \gamma^*)$. Nous avons donc comparé les approximations obtenues pour les $\frac{d^n f}{ds^n}(s)$ avec les vraies valeurs, correspondant aux vrais paramètres associés à nos données. Le résultat est représenté sur la figure 5.1.

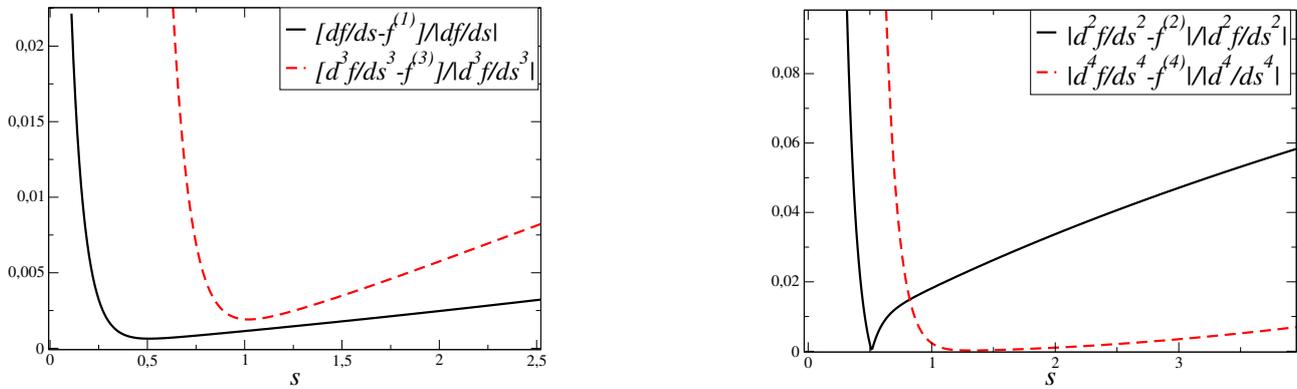


FIGURE 5.1 – Erreurs relatives commises sur les dérivées de f en appliquant l'approximation du milieu semi-infini, avec les données de la figure 4.2