

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.

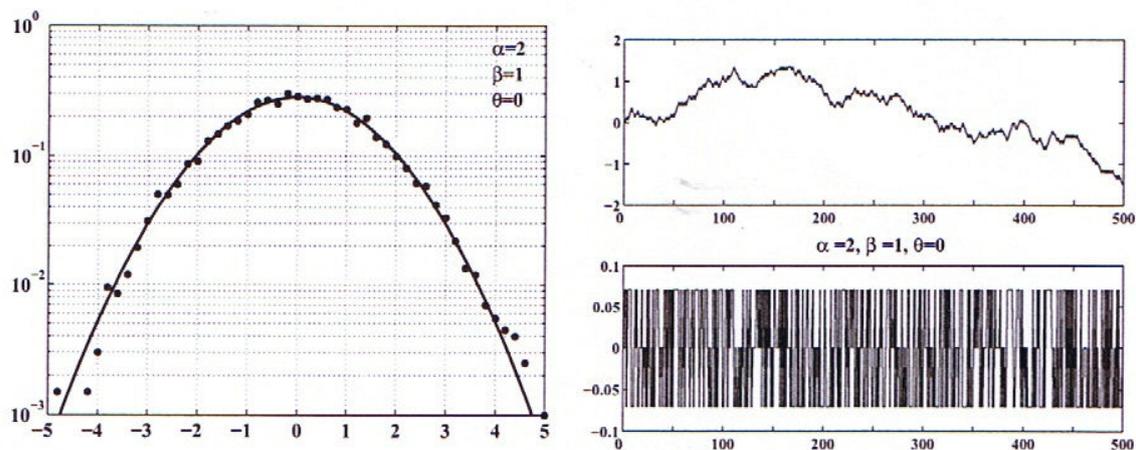


FIGURE 1.1 – Comparaison entre un histogramme d'un mouvement Brownien simulé et la solution de l'équation de diffusion (1.2) d'après Gorenflo et Minardi (2002). A gauche on a un diagramme semi logarithmique représentant en abscisses les positions d'un ensemble de marcheurs aléatoires, et en ordonnées 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

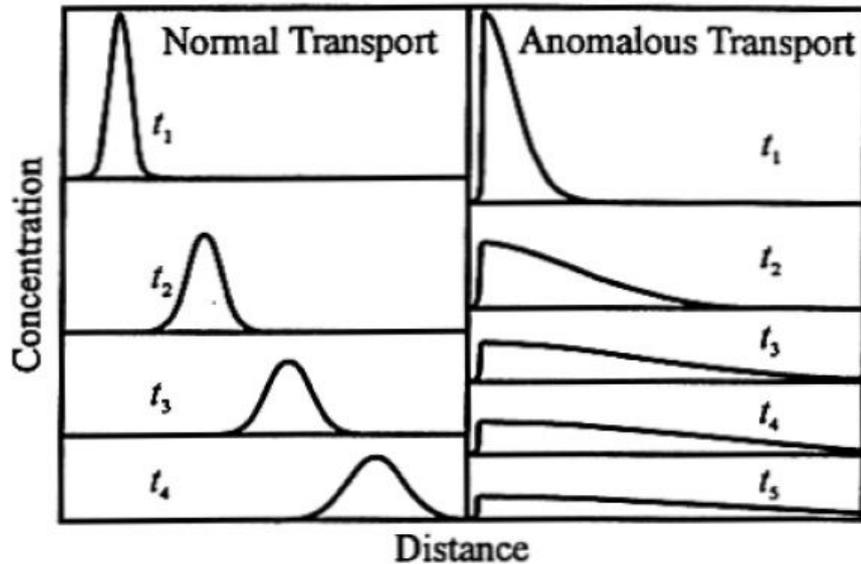


FIGURE 1.2 – Illustration schématique de l'effet de la dispersion anormale sur l'allure de courbes de percée, d'après Berkowitz et al. (2000)

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

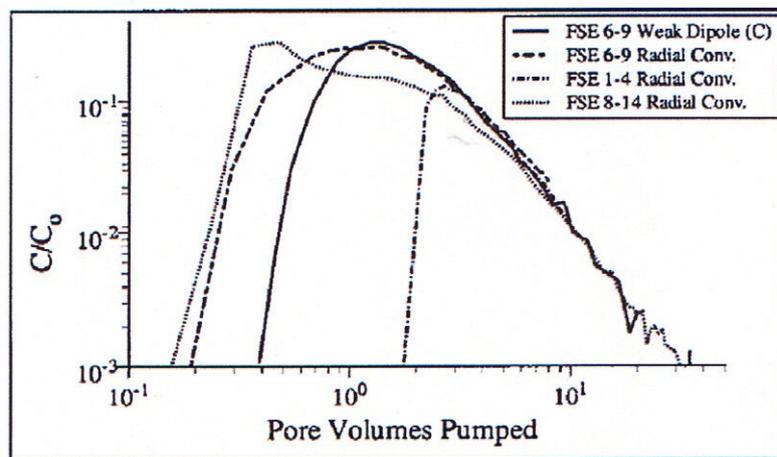


FIGURE 1.3 – Figure : Courbes de restitution de plusieurs essais de traçage au bromide sur le site de Mirror Lake en domaine cristallin fracturé. D'après Becker et Shapiro (2003).

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.

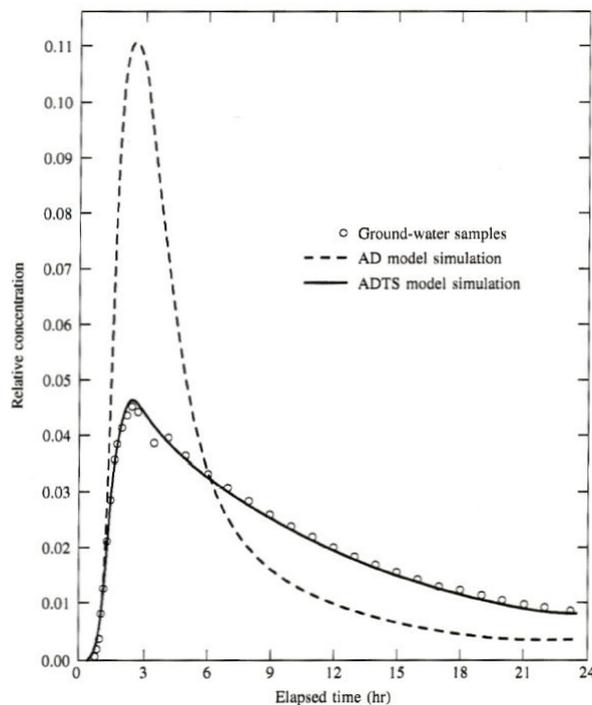


FIGURE 1.4 – Comparaison de données expérimentales sur une fracture simple avec le modèle ADE et un modèle incluant un terme de stockage transitoire, d'après Raven et al. (1988).

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.

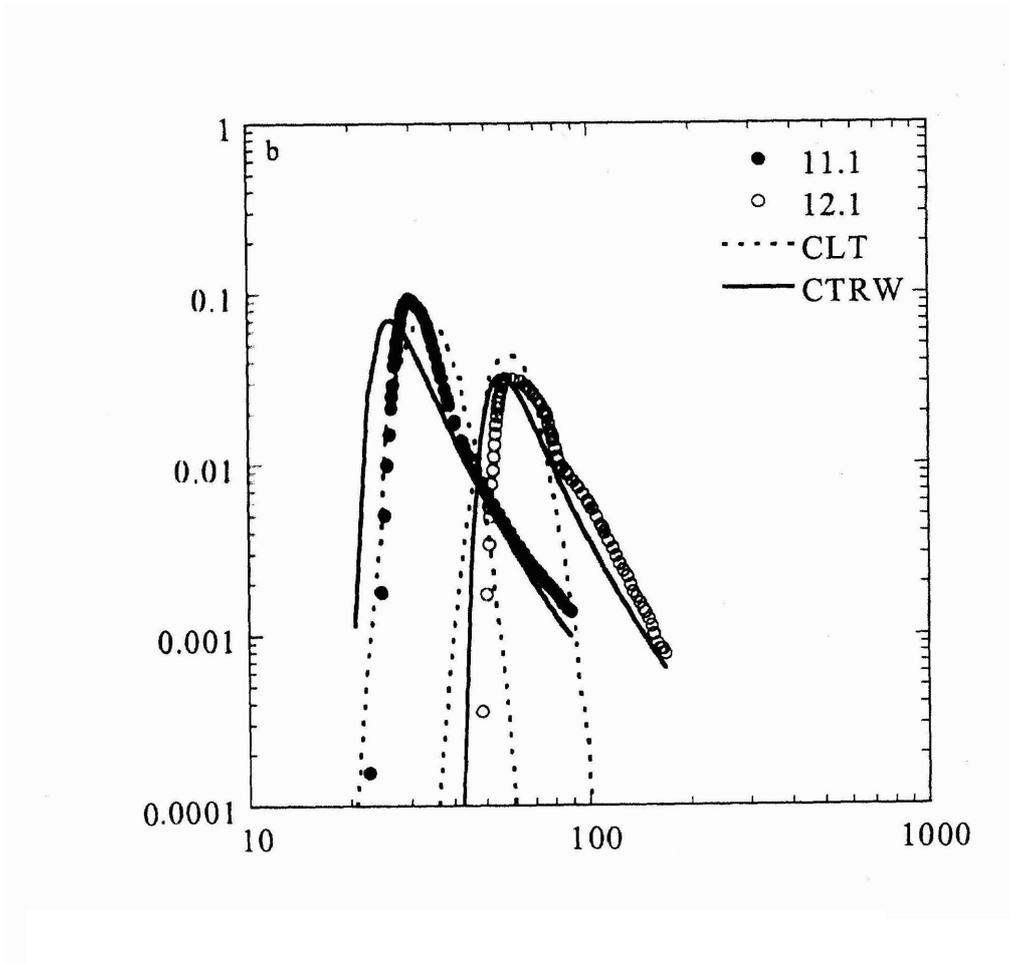


FIGURE 1.5 – Comparaison entre un modèle ADE (en pointillés) et un modèle de marche aléatoire CTRW (en trait plein) pour représenter des résultats d'expériences (cercles) en laboratoire d'après Bromly et Hinz [17]

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} :

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

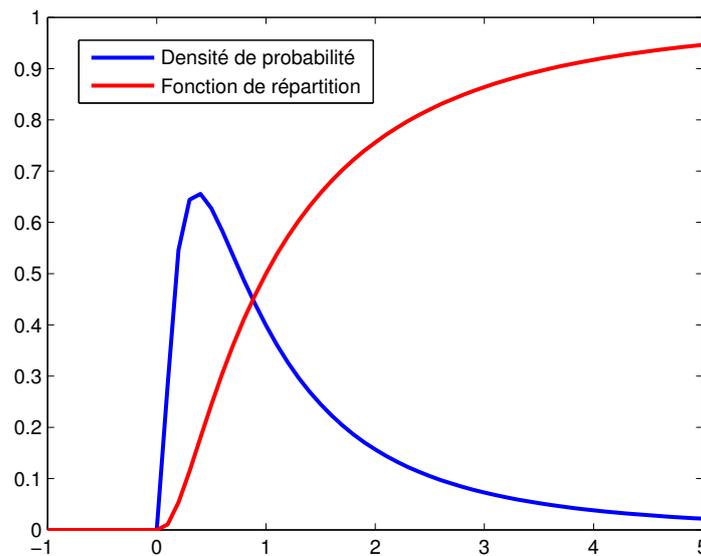


FIGURE 2.1 – Exemple de densité de probabilité (ici une loi lognormale) et de fonction de répartition d'une variable aléatoire continue

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.

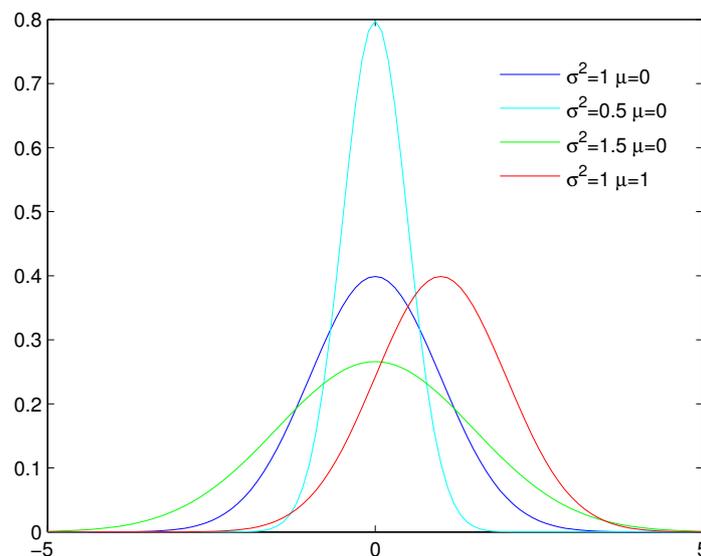


FIGURE 2.2 – Exemples de densités de probabilité de variables aléatoires suivant la loi normale

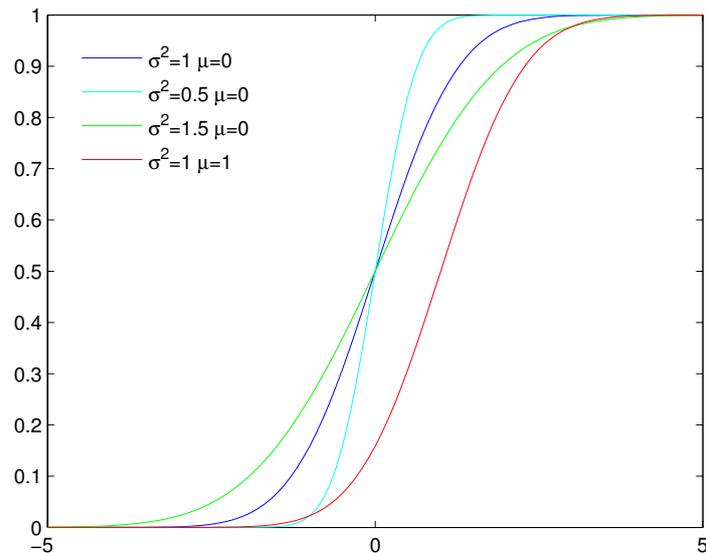


FIGURE 2.3 – Exemple de fonction de répartition de variable aléatoire de loi normale

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 :