

# 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  $\omega$  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.

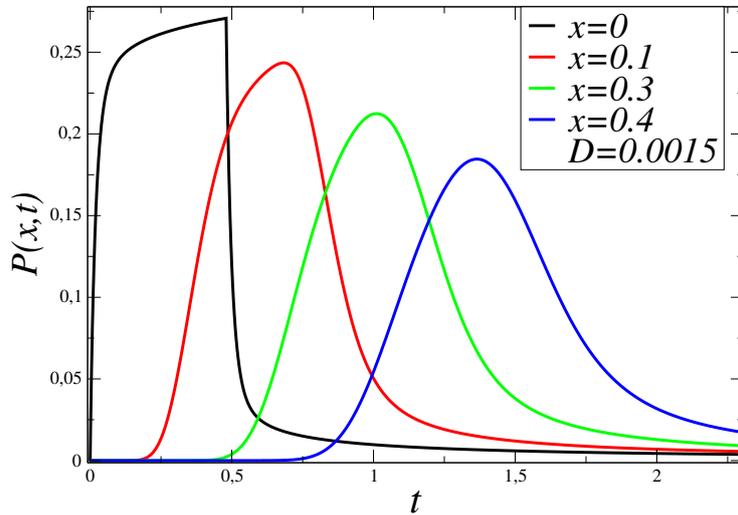


FIGURE 3.1 – Courbes de percée  $P(x,t)$  des solutions du modèle MIM donnés par l'équation (3.4) avec comme condition aux limites en  $x = 0$  flux  $R(t) = R_0$  pour  $t < t_0$ ,  $R(t) = 0$  pour  $t > t_0$ ; on a pris  $D = 0.01$ ,  $v = 1$ ,  $K = 1$  et  $\omega = 10$

### 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  $\alpha$  et de paramètre d'asymétrie  $\beta$ . 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  $\beta$  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,  $D_\alpha$  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  $\Lambda$  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  $\tau$  et une échelle de longueur  $l$ . Nous supposons que cette marche aléatoire tend vers un processus stochastique quand  $l$  et  $\tau$  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  $\tau$ . Plus précisément, à petite échelle, nous supposons que chaque particule de contaminant effectue une succession de déplacements, tous associés à une échelle de temps  $\tau$ . 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  $\phi$ . Donc la densité  $\phi_l$  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  $\tau$  comme sur la figure 3.2. Le

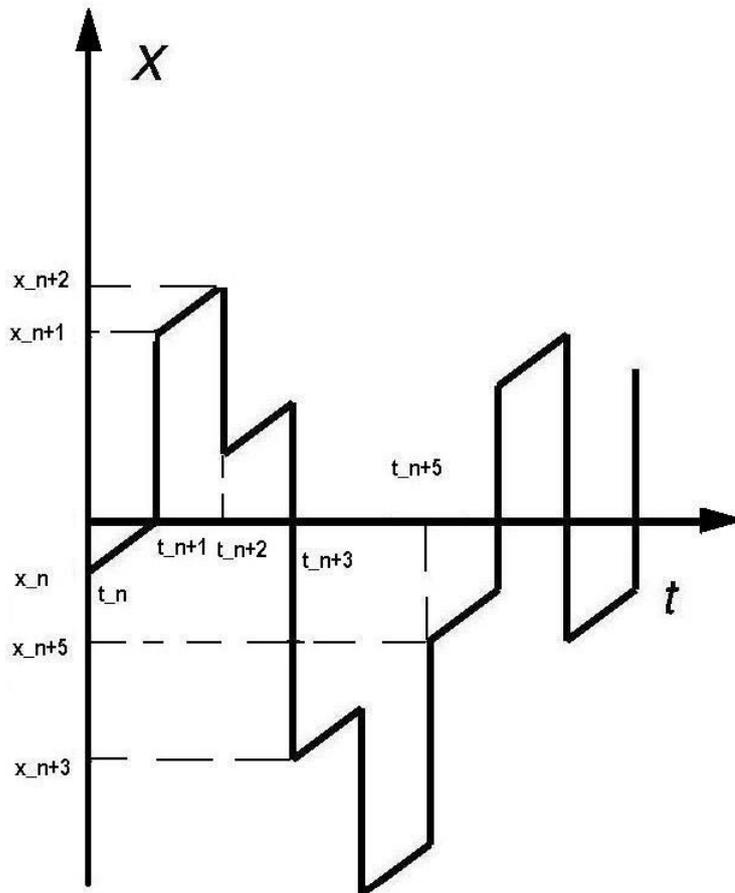


FIGURE 3.2 – Représentation de quelques étapes de marche aléatoire approchant le mouvement Brownien avec une vitesse moyenne uniforme

modèle MIM fractionnaire correspond au contraire à une situation dans laquelle le  $n$ ème saut (effectué à la fin d'une étape de durée  $\tau$ , 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  $\gamma$  avec  $0 < \gamma < 1$ . Pour être précis on a besoin de donner sa transformée de Laplace, qui est  $e^{-s^\gamma}$ . La densité  $\psi$  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.

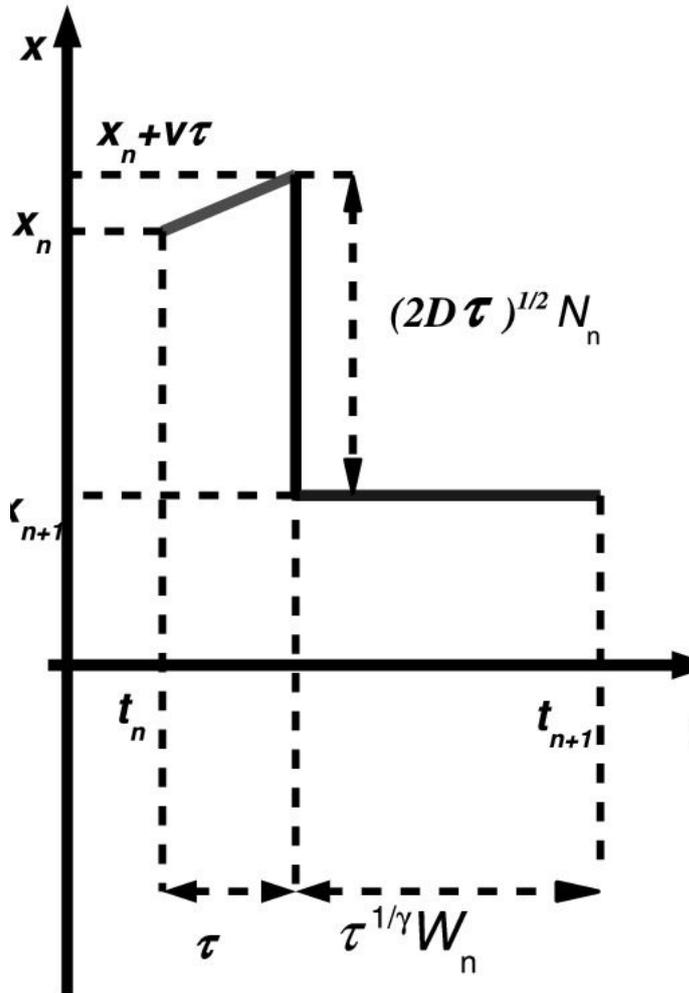


FIGURE 3.3 – Représentation d’une étape d’une marche aléatoire combinant des sauts instantanés, de l’advection et des immobilisations et approchant le fMIM.

### 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  $\tau$  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  $\tau$ , 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  $\tau$  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  $P_i^\tau$  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  $\tau$ . 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

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

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  $\tau$  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  $\tau$  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  $\tau$  tend vers 0. Il ne reste alors plus que le premier terme, qui est exactement  $\Lambda$  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  $\tau$  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  $\tau$  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  $\gamma$  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  $\Lambda$  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  $\gamma$  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  $\gamma$  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  $(D, v, \Lambda)$  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  $\gamma$ .

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  $\partial_t^\gamma$  est la dérivée de Caputo définie par l'équation (2.48). Rappelons ici que lorsque le paramètre  $\gamma$  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  $\omega$  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  $D_\alpha$  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.

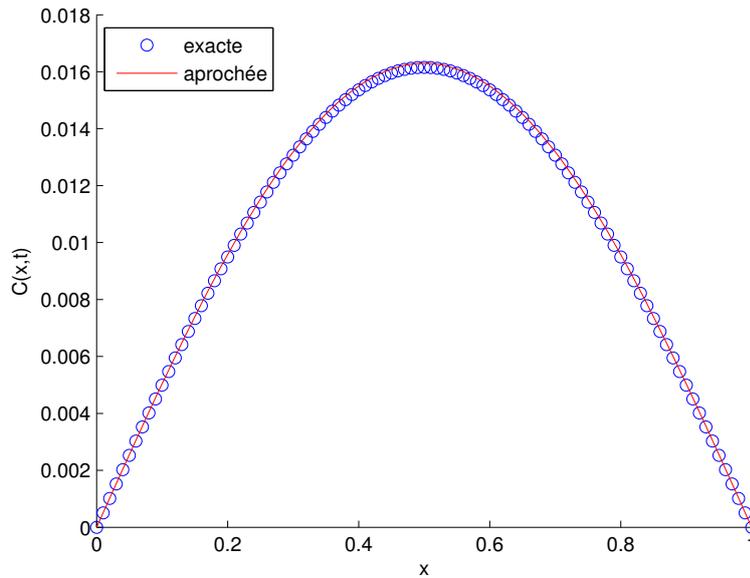


FIGURE 3.4 – Profil de  $C(x, t)$  lorsque  $v = 0$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.5$ ; conditions aux limites  $C(0, t) = C(1, t) = 0$

### 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  $\theta$  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 $\partial_t^\gamma$

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  $\Delta t$  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

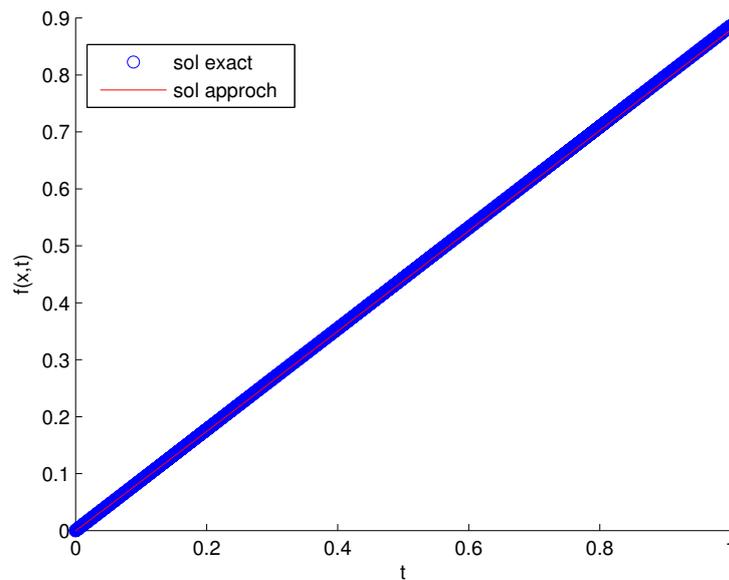


FIGURE 3.5 – La solution approchée et la solution exacte sont en accord,  $\gamma = 0.5$ ,  $\alpha = 0.5$

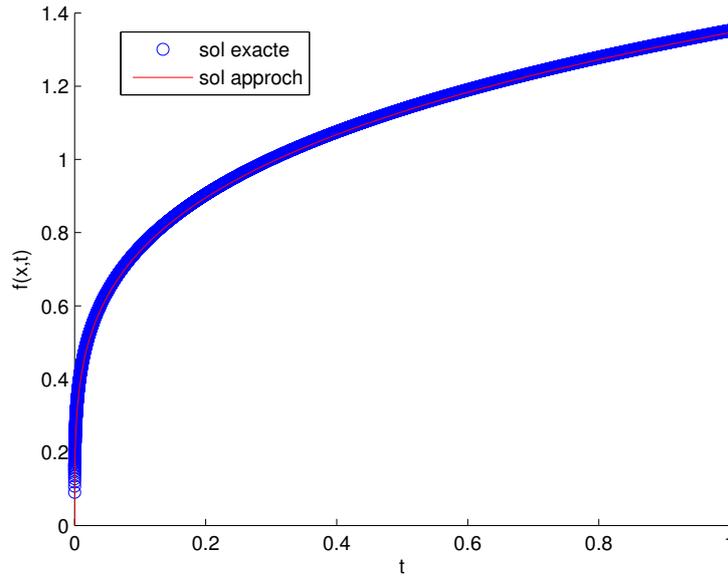


FIGURE 3.6 – La solution approchée et exacte sont en accord,  $\gamma = 0.5$ ,  $\alpha = 0.25$

### 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

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

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

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

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

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

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  $\Lambda$  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  $\gamma$  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  $\gamma$  est petit. La figure 3.13 montre des instantanés obtenus à des instants fixés, pour diverses valeurs du paramètre  $\gamma$ , qui est le seul qu'on ait fait varier. On observe que les profils spatiaux s'étalent plus lorsque  $\gamma$  diminue. On observe aussi qu'en diminuant  $\gamma$  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  $\gamma$  vont même un peu plus loin que les autres, au début. Les figures 3.7-3.8 montrent l'effet de  $\gamma$  sur les traînées : quand ce paramètre est seul à varier, on épaissit la traînée en diminuant  $\gamma$ . Cependant, on diminuerait aussi les traînées en diminuant  $\Lambda$ . Les courbes de percée représentées sur les figures 3.14, 3.15 et 3.16 montrent que la valeur de  $\gamma$  a peu d'effet sur la montée de ces courbes.

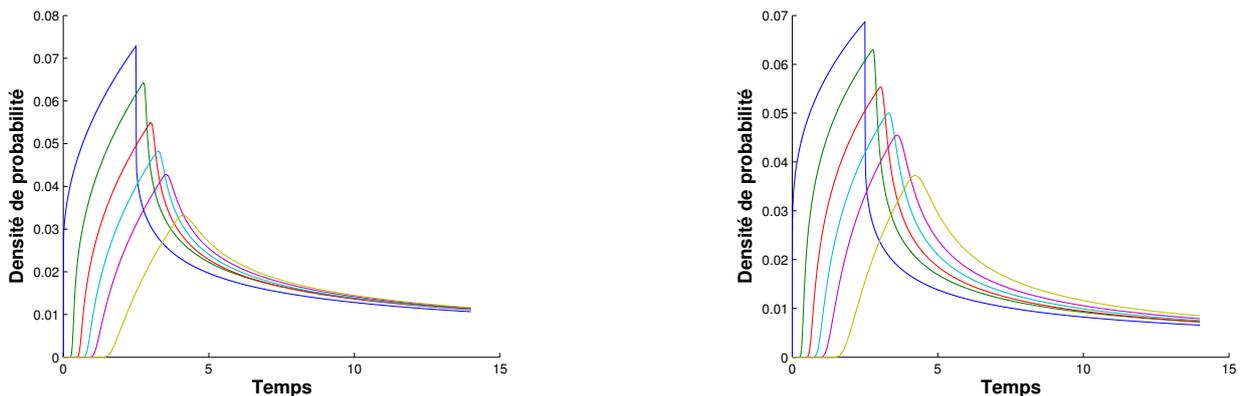


FIGURE 3.7 – Profils temporels  $P(x,t)$  des courbes de percée solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) avec  $D = 0.001$ ,  $v = 1$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.6$ ;  $D = 0.001$ ,  $v = 1$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.5$  pour différentes positions.

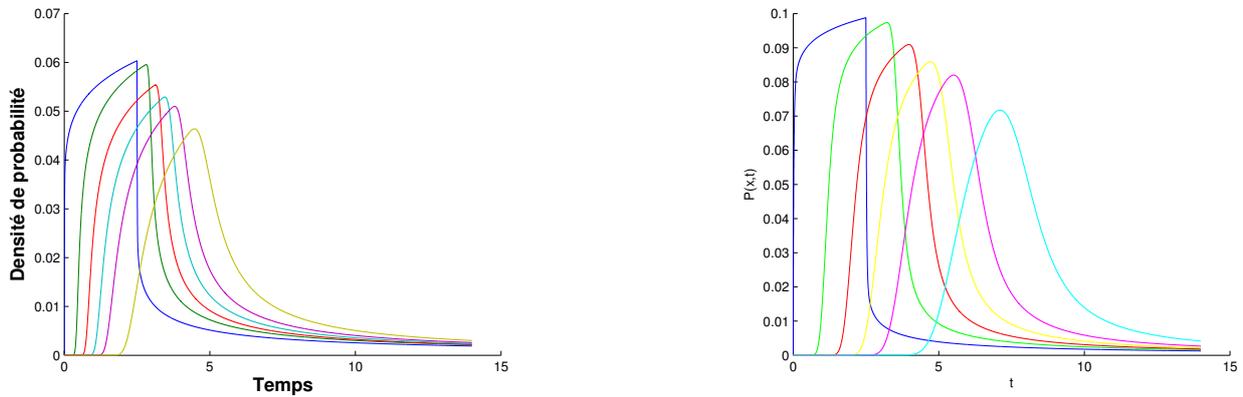


FIGURE 3.8 – Profils temporels  $P(x,t)$  des courbes de percée solutions du modèle MIM fractal donnés par l'équation (3.29) avec  $D = 0.001$ ,  $v = 0.5$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.9$ ;  $D = 0.001$ ,  $v = 1$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.8$  pour différentes positions.

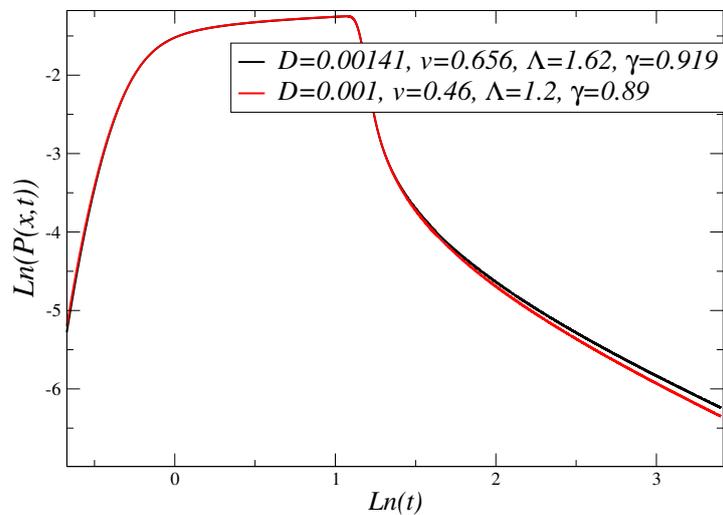


FIGURE 3.9 – Courbes de percée en coordonnées logarithmiques, montrant le comportement asymptotique de 2 jeux de paramètres donnant des profils, excepté aux grands temps.

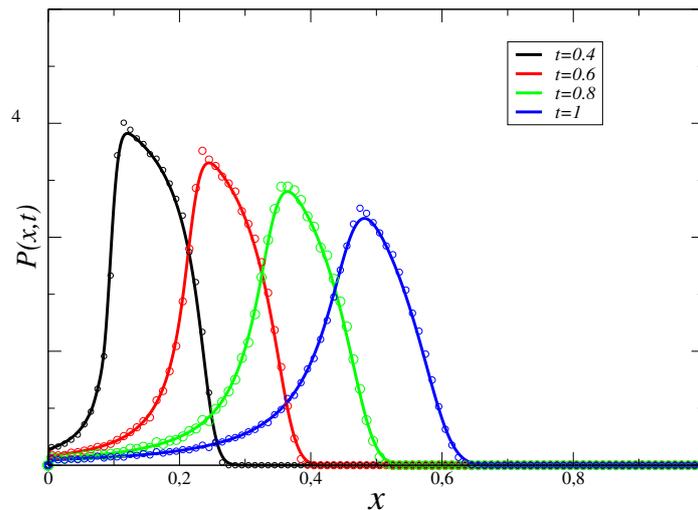


FIGURE 3.10 – Instantanés  $P(x,t)$  des solutions du modèle MIM-fractionnaire en temps donnés par l'équation (3.29) comparés à la Marche aléatoire (3.38) avec  $D = 0.00001$ ,  $v = 1$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.9$

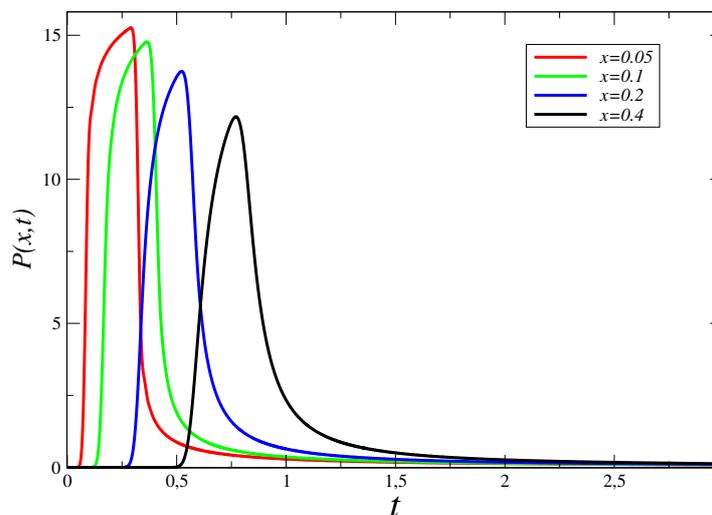


FIGURE 3.11 – Profils temporels  $P(x,t)$  des solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) avec  $D = 0.00001$ ,  $v = 1$ ,  $\Lambda = 1$ ,  $\gamma = 0.9$

### 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  $\gamma$  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  $\gamma$  : les durées d'immobilisation, plus longues lorsque  $\gamma$  diminue, retardant les particules.

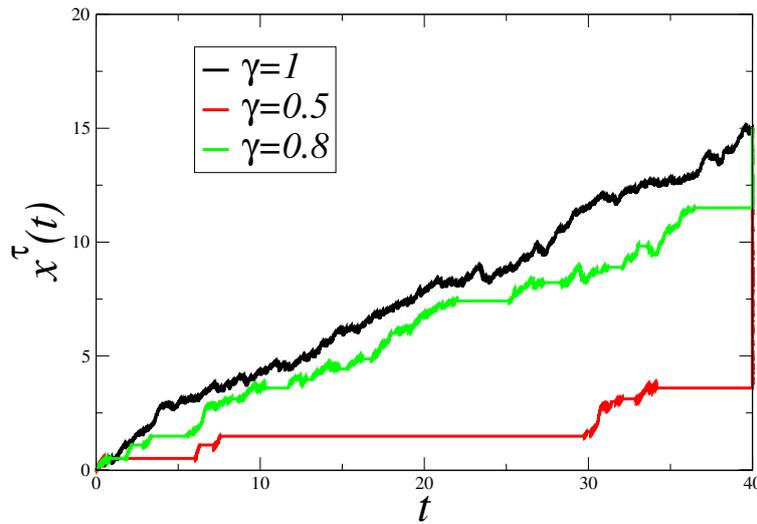


FIGURE 3.12 – Trajectoires des marches au hasard définies par (3.38). Les trajectoires ont été obtenues avec les mêmes déplacements  $lN_n$

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  $\gamma$  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  $\tau$  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  $\tau$  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  $\theta$ ). 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  $\Lambda$  sont autorisés à dépendre de  $x$ , ou de  $t$ , car alors on ne dispose plus de solutions exactes pour vérifier les résultats des simulations.

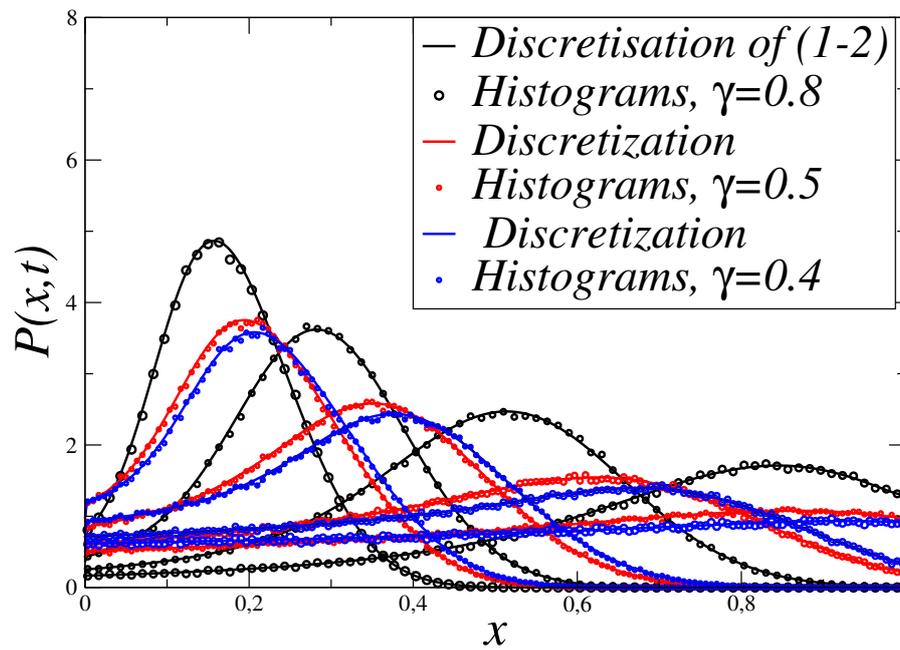


FIGURE 3.13 – Profils  $P(x,t)$  des solutions du modèle MIM-fractionnaire donnés par l'équation (3.29) comparés à la Marche aléatoire (3.38)

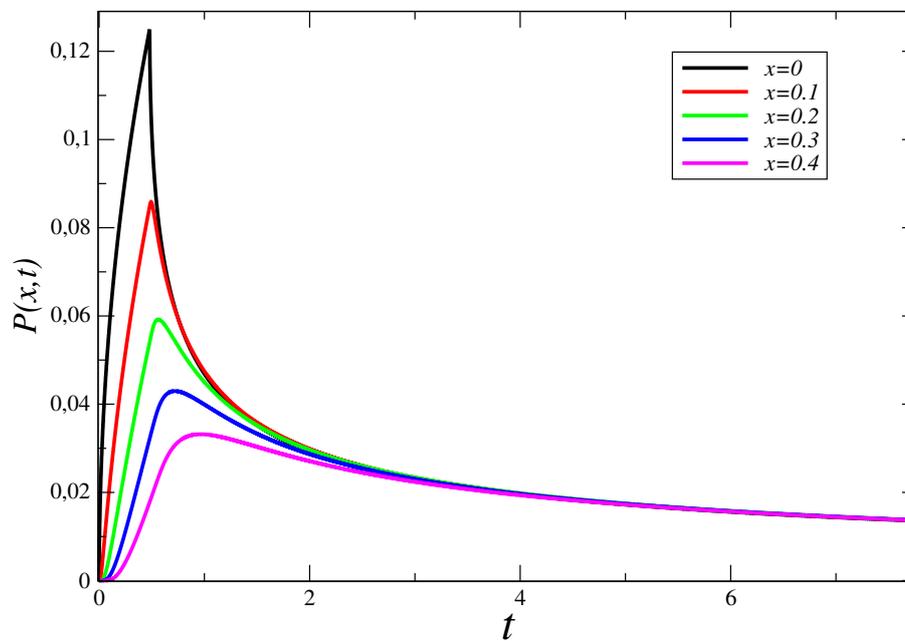
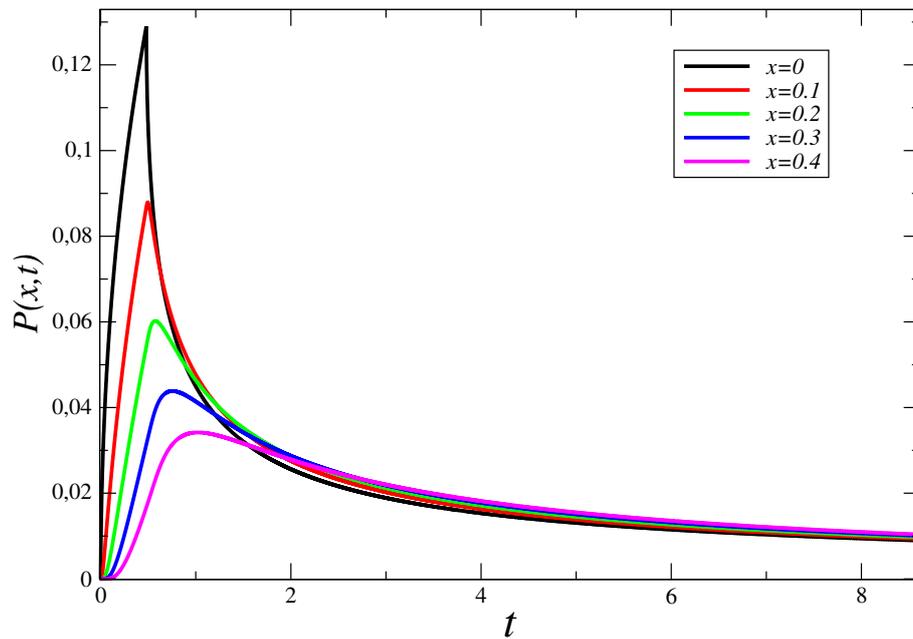
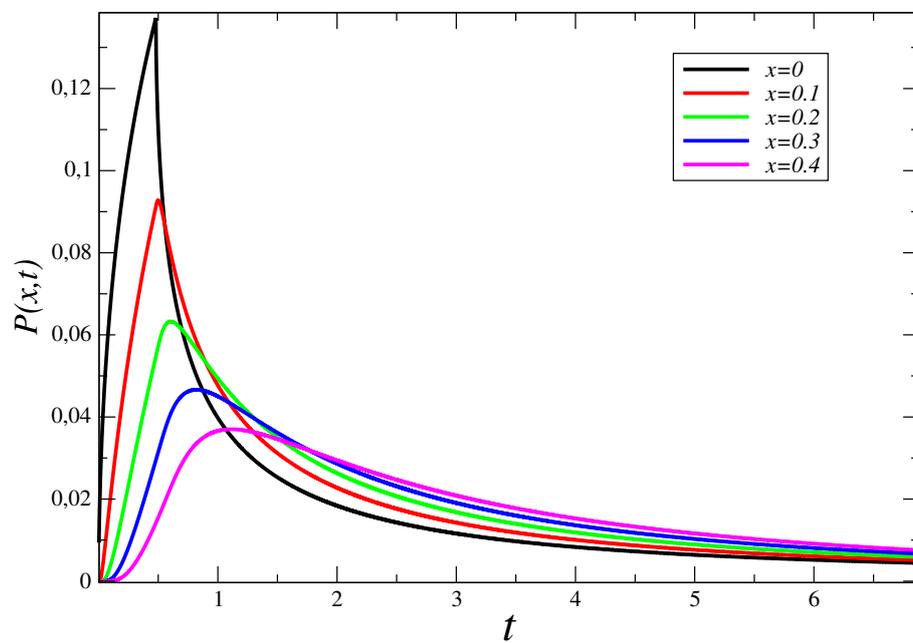


FIGURE 3.14 – Courbes de percée correspondant à  $D = 0.1$ ,  $v = 0.5$ ,  $\Lambda = 1.2$ , et  $\gamma = 0.5$

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  $(D, v, \lambda, \gamma)$  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.