



HAL
open science

Transport anormal de traceurs passifs en milieux poreux hétérogènes: équations fractionnaires, simulation numérique et conditions aux limites

N. Krepysheva

► **To cite this version:**

N. Krepysheva. Transport anormal de traceurs passifs en milieux poreux hétérogènes: équations fractionnaires, simulation numérique et conditions aux limites. Sciences du Vivant [q-bio]. Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, 2005. Français. NNT: . tel-02830383

HAL Id: tel-02830383

<https://hal.inrae.fr/tel-02830383>

Submitted on 7 Jun 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ACADEMIE D'AIX MARSEILLE
UNIVERSITE D'AVIGNON ET DES PAYS DE VAUCLUSE

THESE

Spécialité : MECANIQUE

**Transport anormal de traceurs passifs en milieux
poreux hétérogènes : équations fractionnaires,
simulation numérique et conditions aux limites**

Présentée à l'Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse
Ecole Doctorale 380 «Science et Agronomie»
pour obtenir le diplôme de DOCTORAT par

Natalia KREPYSHEVA

Soutenu le 28 Octobre 2005

Devant le Jury composé de

Rapporteurs

E. SCALAS

Professeur, Université du Piémont Oriental, Italie

F. DELAY

Professeur, Lab. Hydrasa, Université de Poitiers

Examineurs

A. CHAMBAREL

Professeur, Université d'Avignon et de Pays de Vaucluse

F. PLOURABOUE

Chargé de Recherches, Institut de Mécanique des Fluides, Toulouse

Co-directeurs de thèse

L.DI PIETRO

Directeur des Recherches, INRA, Avignon

M.C. NEEL

Professeur, Université d'Avignon et de Pays de Vaucluse

Résumé

Le modèle de convection-dispersion, fondé sur la loi de Fick et sur des statistiques gaussiennes, est couramment utilisé pour décrire le transport de soluté en milieux poreux. De nombreux résultats expérimentaux sur le terrain et en laboratoire montrent que celui-ci ne reproduit pas toujours les observations expérimentales. C'est notamment le cas en milieux hétérogènes où les écarts sont les plus significatifs. Des équations aux dérivées partielles incluant des dérivées fractionnaires et liées aux statistiques non gaussiennes, ont été proposées pour modéliser le transport de matière dans ces milieux. Ce travail a pour objectif la discussion de ces modèles et de leurs conditions d'utilisation. On a, en particulier, réalisé des simulations numériques d'équations aux dérivées partielles fractionnaires en espace et en temps. Les principaux résultats concernent l'interdépendance entre certains de ces modèles et des conditions aux limites interdisant aux particules de franchir une barrière.

On rappelle les principaux résultats expérimentaux justifiant le recours à ces modèles fractionnaires et à des statistiques non gaussiennes. La démarche initiée par Einstein pour montrer que le mouvement brownien correspond à grande échelle à l'équation de convection-dispersion, établit un lien de même nature entre les vols de Lévy et les variantes fractionnaires de ce modèle classique. Ce lien est assez simple pour un milieu infini. Ici, on montre que certaines conditions aux limites exigent qu'on modifie le noyau de certains opérateurs fractionnaires. La simulation numérique permet d'illustrer ce résultat théorique, dans le cadre d'une méthode aux différences finies qui est discutée du point de vue de la convergence et de la stabilité. Elle est aussi testée à l'aide de solutions exactes et en comparant avec la simulation directe (de type Monte Carlo) d'un nuage de particules effectuant des vols de Lévy. Le cas de la sous-diffusion et des équations de dispersion fractionnaires en temps est aussi traité numériquement.

Table des matières

1	Introduction générale	1
1.1	Motivations et cadre général de la thèse	1
1.2	Structure de la thèse	3
2	Lois de transport de traceurs passifs en milieux poreux : évidences expérimentales des écarts à la loi normale	4
2.1	Introduction	4
2.2	Un modèle microscopique de transport : les marcheurs aléatoires en temps continu (CTRW)	5
2.3	Le mouvement brownien et l'équation de transport classique	8
2.4	Evidences expérimentales de lois de transport anormal	11
2.5	Interprétation des écarts à la loi normale	13
3	Outils de base pour la généralisation des modèles de transport anormal.	16
3.1	Introduction	16
3.2	Les lois de distribution α -stable	17
3.2.1	Notion de loi α -stable	17
3.2.2	Généralisation du théorème de la limite centrale	18
3.2.3	Distribution de densité de probabilité d'une loi stable	20
3.2.4	Conclusions sur les lois stables	22
3.3	Les dérivées fractionnaires	23
3.3.1	Les opérateurs fractionnaires de Riemann-Liouville	23
3.3.2	La dérivée fractionnaire de Caputo	25
3.3.3	La dérivée de Riesz-Feller.	25
3.3.4	Les différences finies fractionnaires : approche de Grunwald-Letnikov	26
3.4	Conclusion	27

4	Modèles CTRW généralisés et équations de transport fractionnaires	28
4.1	Introduction	28
4.2	Modèle CTRW pour le transport super-diffusif et équation de transport fractionnaire en espace	29
4.3	Modèle CTRW avec mémoire, transport sous-diffusif et équation fractionnaire en temps	32
4.4	Super-diffusion et mémoire	36
4.5	Les modèles fractionnaires avec advection en milieu infini	37
4.6	Conclusion	39
5	Équation fractionnaire en espace avec condition aux limites : le cas d'un mur élastique	41
5.1	Introduction	41
5.2	Conditions aux limites absorbantes	42
5.3	Le cas d'un fluide immobile	43
5.4	Le cas du fluide en mouvement ($v = constante$)	45
5.5	Advection restreinte à des intervalles de temps incluant les sauts	48
5.6	Conclusion	50
6	Simulation numérique de l'équation fractionnaire en espace	52
6.1	Discrétisation de la dérivée de Riesz-Feller en milieu infini	53
6.1.1	Le cas d'un fluide immobile	53
6.1.2	Dans un champ de vitesse constant	59
6.2	Discrétisation dans un milieu semi-infini avec un mur élastique	60
6.3	Mur élastique et advection.	63
6.4	Comparaisons avec des marches au hasard	66
6.5	Influence du mur	66
6.6	Conclusion	67
7	Solution numérique de l'équation fractionnaire en temps	70
7.1	Introduction	70
7.2	Le modèle	71
7.3	La méthode	71
7.4	Comparaison	73
7.5	Condition reflective et advection	74
8	Conclusions et perspectives	78

A	Un exemple d'interaction entre vols de Lévy et mur réfléchissant	87
B	Equivalence entre (5.4) et (5.5)	89
C	La limite du second membre de (5.8)	90
D	Mise en oeuvre des modèles de marcheurs aléatoires	92
E	Mesure et dimension de Hausdorff	96
F	Les programmes	97

Table des figures

2.1	Réalisation du processus brownien. La courbe en trait épais représente $\sqrt{\langle x^2(t) \rangle} = \sqrt{2\lambda t}$ (d'après Martin, 2001 [46])	10
2.2	L'histogramme (à gauche), la trajectoire d'une particule (en haut à droite) et les incréments correspondant (en bas à droite) pour la diffusion standard (mouvement brownien). D'après R.Gorenflo [21]	11
2.3	Schéma du dispositif expérimental de Burns (19 96) (reproduit d'après D.A. Benson et al. 2000)	11
2.4	Graphique de la concentration normalisée par rapport au temps normalisé (Burns, 1997). La droite correspond au profil gaussien. Les triangles sont les données expérimentales.	12
2.5	A droite, la variance du panache de soluté calculée en fonction de la distance moyenne (Garabedian et al., 1991). A gauche, représentation semi-log d'un panache mesuré (symbols) et calculé (lignes). Celles-ci indiquent le maximum de la concentration dans le plan y-z.	13
3.1	Ajustement de densité de la probabilité pour différents α	21
3.2	Profil de densités de probabilité des lois α -stable symétriques pour différents α en coordonnées logarithmiques.	22
4.1	Trajectoire d'une particule réalisant les vol de Lévy pour deux valeurs de α	29
4.2	Trajectoire d'une particule réalisant les vols de Lévy en dimension 2. Exemples correspondant à deux valeurs de α : à gauche $\alpha = 1.2$, à droite $\alpha = 2$	30
6.1	Comportement de G en fonction de la fonction de phase, exemple pour $\alpha = 1.5$	57
6.2	Comparaisons d'une simulation numérique (lignes) avec la solution exacte (symboles) sur un domaine infini. Compte tenu de la parité de la solution du problème continu et du problème discret, on a seulement représenté les x positifs. La courbe supérieure correspond à $t = 1.072$, les suivantes correspondent aux $t = 2.116$, $t = 3.844$, $t = 5.644$ et $t = 6.724$	58
6.3	Comportement de G en fonction de la phase $\varphi \in [0, 4\pi]$ pour trois valeurs de α	60

6.4	Comparaisons d'une simulation numérique avec la solution exacte dans un domaine infini, avec une vitesse non nulle, à partir d'une impulsion de Dirac en $x = 0$. La courbe supérieure correspond à $t = 3$, les suivantes correspondent aux $t = 5$ et $t = 10$.	61
6.5	Comparaison d'une simulation numérique de (5.10) (étoiles) avec la solution exacte (traits pleins), avec en $x = 0$ un mur élastique, et $v = 0$. Les courbes correspondent aux $t = 2$, $t = 4$ et $t = 14$.	62
6.6	Simulation numérique (traits pleins) et marche au hasard (pointillés), avec une limite réfléchissante en $x=0$; et avec $v=0$, $\alpha = 1.5$. Illustration en coordonnées logarithmiques $Ln(C(x, Ln(t)))$ en fonction du $Ln(t)$ pour 2 points situés en $x=1$ et $x=5$, à partir d'une impulsion initiale de Dirac en $x=0$. Pour la simulation numérique, on a pris la solution exacte avec $t = 1$ pour condition initiale.	63
6.7	Le comportement de G en fonction de la fonction de phase $\varphi \in [0; 4\pi]$ pour deux valeur de α .	65
6.8	Comparaison des solutions numériques et marche au hasard, limite en $x=0$, $v=1$, $\alpha = 1.5$, $C(x, 0) = \delta(x - 5)$.	66
6.9	Marche au hasard (points) et simulation numérique de (5.10) (traits pleins) en fonction du temps (axe horizontal) pour deux valeurs de x fixées, soit $x=5$ et $x=20$.	67
6.10	L'effet de condition à la limite, avec une vitesse $v = 1$. La figure de gauche représente d'une solution de (5.10) aux instants $t = 1$, $t = 4$ et $t = 9$. La figure de droite représente aux même instants la solution de (4.15) qui correspond à la même donnée initiale, à partir d'une impulsion de Dirac en $x = 5$.	68
6.11	Zoom de côté de la figure 6.10.	69
6.12	L'évolution de concentration en milieu borné par deux condition aux limites : $\partial_x C(0, t) = 0$ et $C(L, t) = 0$. Calculée avec la méthode (5.10).	69
7.1	Solutions analytique de l'équation (4.9) pour différentes valeurs de β pour $t = 1$. La donnée initiale est l'impulsion de Dirac en $x = 0$.	74
7.2	Solutions analytiques de l'équation (4.9) pour différentes valeurs de β en l'échelle logarithmique pour $t = 1$. La donnée initiale est l'impulsion de Dirac en $x = 0$.	75
7.3	La solution de l'équation (4.9) avec la donnée initiale $C(x, 0) = \sin(\pi x)$. La simulation numérique (traits pleins) est comparée avec la solution exacte (symboles) pour $\beta = 0.5$.	75
7.4	Solution numérique en milieu infini en comparaison avec la solution exacte pour trois valeurs de β , pour $t = 10$, et condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$ placé en $x = 0$.	76
7.5	Solutions numérique en milieu infini en comparaison avec la solution exacte pour trois valeurs de β , pour $t = 10$ et condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$ placée en $x = 0$ (échelle logarithmique).	76

7.6	Solution de (4.9) dans un milieu demi-infini avec $\partial_x C(0, t) = 0$ et $v = 0$ à partir de la relation (7.6) en utilisant pour $C^*(x, t)$ une solution de (4.9) sous la forme du fonction de Fox, pour $\beta = 0.5$, et l'impulsion initiale de Dirac en $x = 1$	77
7.7	Solution de (4.9) dans un milieu semi-infini avec $\partial_x C(0, t) = 0$ et $v = 1$ en utilisant la méthode analytique fondée sur les fonctions de Fox, pour $\beta = 0.5$, et l'impulsion initiale de Dirac en $x = 1$, en utilisant la relation (7.6).	77
A.1	Trajectoire d'une particule en l'absence du mur ou loin du mur.	87
A.2	Trajectoire d'une particule en l'absence du mur ou loin du mur.	88
D.1	Les histogrammes de Monte-Carlo réalisés avec $Q = 1000, 5000, 15000, 30000$	93
D.2	Les carrés - marche aléatoire avec $\tau = 1$, les cercles - marche aléatoire avec $\tau = 0.01$, lignes - solution numérique.	94
D.3	Simulation de Monte-Carlo de marche aléatoires contenant une distribution des longueurs de sauts α -stable et symétrique avec une distribution des temps d'attente β -stable. Ici on a $\alpha = 1.5$ et $\beta = 0.5$	95

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Motivations et cadre général de la thèse

La quantification du transport des espèces chimiques dans des milieux géologiques hétérogènes est aujourd'hui d'une importance primordiale pour la prévision de la pollution de l'environnement. Qu'il s'agisse de la contamination des eaux souterraines par des polluants transitant de la surface du sol jusqu'aux aquifères, de leur dispersion dans les eaux souterraines, ou de la filtration des substances dangereuses confinées dans des sites de stockage, une estimation correcte du devenir des espèces dissoutes est essentiel pour la préservation des écosystèmes et de la ressource en eau.

Les sols et les aquifères sont, le plus souvent, des milieux poreux très hétérogènes. Ces hétérogénéités sont manifestes à plusieurs échelles d'observation, et notamment à l'échelle macroscopique. Ainsi, les modèles de transport de solutés développés pour les milieux strictement homogènes, en particulier l'équation de convection-dispersion (CDE), ne peuvent pas être utilisés dans ce type de milieux.

Le modèle CDE tient compte des deux processus fondamentaux pour le transport des solutés dans un fluide. Ceux-ci sont d'une part, le flux convectif qui est l'entraînement des molécules avec l'écoulement du fluide, et d'autre part, le flux dispersif qui est une propagation du soluté par rapport à l'écoulement du fluide. Ce dernier est dû à la diffusion moléculaire et aux fluctuations de la vitesse du fluide. Le processus dispersif est caractérisé par le coefficient de dispersion. Le modèle CDE peut être obtenu comme la limite macroscopique d'un modèle stochastique de marcheurs aléatoires réalisant un processus brownien. En ce sens, il y a une correspondance bijective entre le mouvement brownien à l'échelle microscopique et l'équation CDE à l'échelle macroscopique.

Une caractéristique importante du transport dans les domaines hétérogènes est que

le coefficient de dispersion dépend de l'échelle. Ce fait est en contradiction avec les hypothèses de base de l'équation CDE classique qui suppose un écoulement moyen et des coefficients de dispersion constants. Dans les milieux hétérogènes, c'est la nature même du transport dispersif qui semble changer en fonction du temps ou de la distance parcourue par le contaminant. Un tel comportement dépendant de l'échelle est connu comme transport anormal ou non-Fickien.

Ces dernières années, un certain nombre de modèles microscopiques décrivant des phénomènes de dispersion anormale ont été proposés. Ils mettent en jeu des marcheurs aléatoires de temps continu, "Continuous Time Random Walks" (CTRW) en anglais, avec des distributions de probabilités différentes de celles du mouvement brownien. Ces modèles conduisent, à l'échelle macroscopique, à une généralisation du modèle CDE en terme de dérivées d'ordre non entier ou fractionnaire (FDE). Les dérivées fractionnaires sont des opérateurs non-locaux. Ces modèles semblent bien adaptés à la description de la dispersion anormale telle qu'observée dans les sols et les aquifères hétérogènes.

Néanmoins, avant d'obtenir des modèles opérationnels qui puissent être utilisés dans des situations réelles, plusieurs questions fondamentales restent à résoudre. Notamment,

- comment inclure des conditions aux limites dans des équations différentielles avec des opérateurs non locaux ?
- quels sont les meilleurs schémas numériques pour résoudre des équations du type FDE ?
- quelles distributions de probabilités microscopiques conduisent à des équations fractionnaires ?
- quelle est la relation entre l'ordre fractionnaire des dérivées temporelles et/ou spatiales et l'hétérogénéité du milieu ?
- quelles sont les conditions d'application de ces modèles ?

La résolution de ces questions a motivé les travaux de la présente thèse dans la perspective de contribuer à améliorer la description du transport de solutés dans les milieux hétérogènes et d'obtenir des modèles opérationnels permettant d'effectuer des prévisions plus réalistes.

1.2 Structure de la thèse

Les chapitres 2, 3 et 4 de cette thèse sont consacrés à l'analyse bibliographique sur le transport anormal. Il ne s'agit pas d'une étude exhaustive, mais ciblée sur les modèles microscopiques et macroscopiques et les techniques mathématiques associées qui nous ont semblé être les mieux adaptées au transport anormal en milieu poreux. Ainsi, on présente synthétiquement les modèles de marcheurs aléatoires en temps continu (CTRW) et on analyse les équations d'évolution de ceux-ci dans la limite asymptotique macroscopique. En particulier, on étudie des modèles CTRW dont les équations d'évolution généralisent l'équation CDE et font appel à des dérivées temporelles et/ou spatiales fractionnaires. Selon le type de marche au hasard étudiée, on obtient une équation incluant une dérivée fractionnaire par rapport au temps, ou à l'espace, ou combinant les deux. On parle alors d'équation fractionnaire (FDE) en temps, ou en espace, ou en temps et en espace. Des exemples de comportements anormaux observés dans des milieux poreux comme les sols ou les aquifères sont aussi discutés.

La deuxième partie de la thèse est consacrée aux développements analytiques et numériques des modèles de transport anormal.

Au chapitre 5, on présente un modèle CTRW qui accorde une certaine importance aux événements extrêmes dans le cadre du transport dans un milieu semi-infini limité par un mur infranchissable. En milieu infini, on sait que les marches au hasard en question conduisent à une équation fractionnaire en espace. On étudie spécialement l'interaction avec une condition au bord de ce type. On considère le cas d'un fluide au repos et le cas d'un fluide en mouvement avec vitesse constante.

Dans le chapitre 6 on présente la mise en oeuvre numérique et des simulations réalisées avec le modèle développé au chapitre 5.

Le chapitre 7 traite de la simulation numérique du modèle fractionnaire en temps.

Au chapitre 8 on discute des perspectives de ce travail.

Chapitre 2

Lois de transport de traceurs passifs en milieux poreux : évidences expérimentales des écarts à la loi normale

2.1 Introduction

Fick (1855) énonce la loi de diffusion. Le postulat fondamental de celle-ci est que, dans un milieu fluide immobile, le flux volumique d'un soluté à travers une surface unitaire est proportionnel au gradient de la concentration. On obtient ainsi une relation qui, combinée avec celle de la conservation de la masse de soluté, conduit à l'équation de la diffusion qui s'exprime

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \lambda \nabla^2 C(x, t) \quad (2.1)$$

Ici C est la concentration du soluté et λ est le coefficient de diffusion. Quand le fluide est en mouvement, le même raisonnement conduit à ajouter un terme qui tient compte de l'entraînement des particules dû à l'advection par la vitesse moyenne de l'écoulement. Ceci conduit au modèle classique CDE qui s'exprime par

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle C = \lambda^* \nabla^2 C(x, t) \quad (2.2)$$

où λ^* est le coefficient de dispersion. Celui-ci combine la diffusion moléculaire avec les fluctuations dues aux variations de vitesse par rapport à $\langle \mathbf{v} \rangle$, vitesse moyenne du fluide.

Indépendamment du développement de la théorie macroscopique, Brown (1773-1858) réalise des observations systématiques du mouvement de grains de pollen en

suspension dans l'eau immobile. Ce mouvement irrégulier, déjà observé par J. Ingelhouz en 1785, décrit des trajectoires aléatoires et indépendantes de la nature de la particule. Plus tard, Einstein (1905) élabore un modèle probabiliste moléculaire pour la description de ces trajectoires et établit une relation entre le mouvement brownien et les équations macroscopiques de la diffusion. N. Wiener élabore une théorie des processus stochastiques comme modèle mathématique du mouvement brownien et par conséquent de la diffusion. Plus tard, P. Langevin, M. Smoluchowski et L.S. Orstein ont, entre autres, largement contribué au développement de la théorie de la diffusion et des processus stochastiques associés (Kubo et al., 1995 [35]).

La représentation du phénomène physique de diffusion en tant que processus stochastique à l'échelle moléculaire et à un temps d'observation très grand par rapport au temps moyen entre deux collisions conduit au modèle des marcheurs aléatoires. Historiquement, les premiers modèles de marcheurs aléatoires étaient discrets dans l'espace et dans le temps. Une extension au temps continu (CTRW en anglais) de ces modèles s'est développée comme généralisation (Montroll et Weiss, 1965 [57]) permettant de représenter des situations plus complexes.

Dans ce chapitre, on présentera les bases du modèle des marcheurs aléatoires en temps continu, leur application à la description du mouvement brownien et à la diffusion normale. On rappellera ensuite des résultats expérimentaux manifestant des comportements qualitativement différents.

2.2 Un modèle microscopique de transport : les marcheurs aléatoires en temps continu (CTRW)

On décrira sommairement les bases du modèle CTRW. Des développements détaillés et complémentaires de cette approche se trouvent, notamment, dans Montroll et Weiss (1994)[57], Metzler et Klafter (2000)[51], Mainardi et al. (2000) [44] et Berkowitz et al. (2000) [6].

Soit $x(t)$ une variable aléatoire représentant la position d'une particule de traceur dans la position x au temps t . La série temporelle $\{x(t_i), i = 1, 2, \dots\}$ est un processus stochastique.

Les variables aléatoires $X_i = x(t_i) - x(t_{i-1})$ et $T_i = t_i - t_{i-1}$ représentent, respectivement, la longueur des sauts entre deux positions successives et l'intervalle de temps ou temps d'attente entre deux sauts.

En partant de x_0 , à l'instant $t = 0$, le n -ème événement se produit au temps $t_n = \sum_{i=1}^n T_i$. La particule arrive à la position $x(t) = x_0 + \sum_{i=1}^{N(t)} X_i$ après $N(t)$ sauts

dans l'espace, où $N(t) = \max \{n/t_n \leq t\}$.

Le processus $\{x(t_i), i = 1, 2, \dots\}$ est caractérisé par la distribution $C(x, t)$ qui représente la densité de probabilité de trouver la particule dans la position x au temps t . La densité de probabilité $C(x, t)$ est définie par

$$C(x, t)dxdt \equiv \text{Prob} \{x < X < x + dx; t < T < t + dt\} \quad (2.3)$$

et satisfait la condition de normalisation suivante

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty C(x, t)dxdt = 1 \quad (2.4)$$

Notons $\psi(X, T)$ la probabilité qu'une particule réalise une transition X_i après un temps d'attente T_i et supposons que la probabilité d'effectuer un saut de longueur l ne dépende pas de la position. Alors, les probabilités marginales

$$\rho(X) = \int_0^\infty \psi(X, T)dT \quad (2.5)$$

$$w(T) = \int_{-\infty}^\infty \psi(X, T)dX \quad (2.6)$$

correspondent, respectivement, à la distribution de longueur de sauts ou probabilité de transition et à la distribution des temps d'attente entre les sauts.

On fait l'hypothèse que les variables T_i sont identiquement distribuées et qu'elles sont indépendantes. Si, de plus, on impose que la distribution de la longueur des sauts soit indépendante de la distribution des temps d'attente, il résulte que les X_i sont, elles aussi, des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées. Sous ces hypothèses, la fonction de densité de probabilité $\psi(X, T)$ admet la factorisation $\psi(X, T) = \rho(X)w(T)$.

On remarque que $\int_0^T w(t')dt'$ représente la probabilité pour que la particule réalise au moins un saut dans l'intervalle $[0, T)$. Par conséquent,

$$\phi(T) = \int_T^\infty w(t')dt' = 1 - \int_0^T w(t')dt' \quad (2.7)$$

est la probabilité pour que la particule, après avoir réalisé un saut, reste dans la même position. Si l'on pose $t_0 = 0$, $\phi(t)$ représente la probabilité de survie à l'origine jusqu'au temps t . On a aussi la relation $w(t) = -\frac{d\phi(t)}{dt}$.

Nous posons, maintenant, la condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$, et cherchons une équation d'évolution pour $C(x, t)$. Cette équation d'évolution s'appelle l'équation maîtresse généralisée du modèle CTRW.

L'évolution avant que la particule réalise le premier saut est résumée par

$$C_0(x, t) = \phi(t)\delta(x) \quad (2.8)$$

et indique la persistance de la position initiale. Si le séjour dans la position initiale cesse au temps $t' < t$, la particule réalise une transition à la position x' , et le processus se régénère à partir de (x', t') . Par conséquent, on peut écrire l'équation d'évolution suivante

$$C(x, t) = \phi(t)\delta(x) + \int_0^t w(t - t') \left[\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x - x') C(x', t') dx' \right] dt' \quad (2.9)$$

Le second terme est une convolution spatio-temporelle et représente la contribution à $C(x, t)$ du marcheur ayant séjourné en x' pendant un intervalle de temps de borne supérieure $t' < t$ qui saute à la position x au temps t' et qui y reste pour une attente de durée $(t - t')$.

Notons les transformées de Fourier et de Laplace, respectivement par (B. Rubin, 1996 [67])

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = \hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} f(x) dx$$

$$\mathcal{L}\{g(t)\} = \tilde{g}(u) = \int_0^{+\infty} e^{-ut} g(t) dt$$

La solution de l'équation (2.9) s'obtient dans le domaine de Fourier-Laplace et s'exprime par

$$\tilde{C}(k, u) = \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u} \frac{1}{1 - \hat{\rho}(k)\tilde{w}(u)} \quad (2.10)$$

Cette dernière expression est connue sous le nom d'équation de Montroll-Weiss.

Mainardi (2000) [44] a montré que l'équation d'évolution du CTRW peut s'écrire à l'aide d'une fonction auxiliaire $\chi(t)$ appelé fonction de mémoire. Nous reproduisons le développement dans ce qui suit.

On définit

$$\tilde{\chi}(u) = \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u\tilde{w}(u)} = \frac{\tilde{\phi}(u)}{\tilde{w}(u)} = \frac{\tilde{\phi}(u)}{1 - u\tilde{\phi}(u)}$$

En fonction de $\tilde{\chi}(u)$ l'équation de Montroll-Weiss s'exprime par

$$\tilde{\chi}(u) \left[u\tilde{C}(k, u) - 1 \right] = [\hat{\rho}(k) - 1] \tilde{C}(k, u)$$

En revenant au domaine spatio-temporel, on obtient

$$\int_0^t \chi(t - t') \frac{\partial C(x, t')}{\partial t'} dt' = -C(x, t) + \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x - x') C(x', t) dx' \quad (2.11)$$

La fonction $\chi(t)$ affecte le taux de variation de la probabilité via une convolution temporelle. En ce sens, le processus CTRW est, en général, un processus non Markovien dans le temps. On rappelle qu'un processus est dit de Markov si l'événement au temps

t_n ne dépend pas des événements au pas des temps antérieurs à t_n . Par conséquent, il s'agit de processus sans mémoire. La seule CTRW strictement Markovienne dans la classe décrite ci-dessus est telle que $\chi(t) = c\delta(t)$, avec c une constante positive. A partir de la relation entre la fonction de mémoire et la distribution des temps d'attente, on montre que, dans ce cas, on a $w(t) = c'e^{-c't}$, et c' est l'inverse de la moyenne de cette variable aléatoire.

Ainsi, pour que le processus stochastique représenté par la CTRW ne présente pas de corrélations temporelles de longue portée, la distribution des temps d'attente doit être exponentielle.

Dans ce dernier cas, l'équation d'évolution s'exprime selon

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = -C(x, t) + \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x - x')C(x', t)dx' \quad (2.12)$$

Metzler et Klafter (2000) [51] classent les modèles CTRW en fonction des valeurs caractéristiques des distributions marginales. On définit, respectivement, le temps caractéristique d'attente τ , et le déplacement quadratique moyen l^2 par $\tau = \int_0^{\infty} w(t)t dt$, et $l^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)x^2 dx$. Ces grandeurs sont les moments d'ordre un et deux des distributions de probabilité correspondantes et ils peuvent être finis ou infinis. En fonction de ces valeurs et du type de distribution marginale, les modèles CTRW correspondent à des comportements macroscopiques différents. On verra dans la section suivante qu'un cas particulier de modèle CTRW simule au niveau microscopique le mouvement brownien tel que décrit par Einstein (1905) et conduit dans la limite continue à la loi classique de diffusion de Fick.

2.3 Le mouvement brownien et l'équation de transport classique

Considérons une CTRW définie par une distribution découplée des sauts et sans mémoire temporelle. La distribution des temps d'attente suit une distribution de Poisson $w(t) = \tau^{-1}e^{-t/\tau}$.

Dans le domaine de Laplace, on peut réaliser l'approximation

$$\tilde{w}(u) \approx 1 - u\tau + O(\tau^2) \quad (2.13)$$

Pour réaliser une approximation similaire de la fonction de distribution des probabilités de transition $\rho(x)$ dans le domaine de Fourier, on exige que ses deux premiers moments soient finis et que les moments d'ordre supérieur (n) tendent vers 0 suffisamment vite lorsque $n \rightarrow \infty$.

La distribution gaussienne a ces propriétés et s'exprime par

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l^2}} e^{-x^2/(2l^2)} \quad (2.14)$$

Dans le domaine de Fourier , on peut écrire

$$\hat{\rho}(k) \approx 1 - l^2 k^2 / 2 + O(k^4) \quad (2.15)$$

En remplaçant ces approximations dans l'équation de Montroll-Weiss et en notant la constante de diffusion $\lambda \equiv l^2/2\tau$, on obtient

$$\tilde{C}(\hat{k}, u) = \frac{1}{u + \lambda k^2} \quad (2.16)$$

En inversant cette dernière équation dans le domaine spatio-temporel, on obtient la deuxième loi de Fick :

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = \lambda \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x, t) \quad (2.17)$$

En dimension $n \leq 3$ et dans un espace infini, l'équation (2.17) avec la condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$ (impulsion de Dirac) admet pour solution

$$C(x, t) = \frac{1}{(4\pi\lambda t)^{n/2}} e^{-\frac{x^2}{4\lambda t}} \quad (2.18)$$

$C(x, t)$ est la probabilité de trouver la particule à la position x au temps t . En calculant les moments d'ordre un et deux, on obtient

$$\langle x(t) \rangle = 0$$

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

ce qui signifie que la particule reste à l'origine en moyenne et que les fluctuations croissent selon $t^{1/2}$.

La covariance du processus s'exprime par

$$Cov(t_1, t_2) = \langle x(t_1)x(t_2) \rangle = 2\lambda \min(t_1, t_2)$$

Dans le cas général, on peut montrer (Martin, 2001)[46] que pour des modèles CTRW markoviens, si les moments d'ordre k de la probabilité de transition satisfont les relations suivantes

$$(i) \quad \langle x(t) \rangle \underset{t \rightarrow 0}{=} a(x_0)t + O(t^\alpha), \quad \alpha > 1$$

$$(ii) \quad \langle x^2(t) \rangle \underset{t \rightarrow 0}{=} b(x_0)t + O(t^\alpha), \quad \alpha > 1$$

$$(iii) \quad \langle x^k(t) \rangle \underset{t \rightarrow 0}{=} O(t^\alpha), \quad \alpha > 1, \quad k > 2$$

alors, le processus obéit à une équation différentielle de Fokker-Planck, qui s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} (a(x)C(x, t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (b(x)C(x, t)) \quad (2.19)$$

avec la condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$. Si $a(x) = a_1 + a_2x$ et $b(x) = b$, alors la solution est gaussienne. Le cas particulier $a = 0$ et $b = 2\lambda$ est le processus brownien, aussi appelé processus de Wiener.

En figure (2.1), on montre plusieurs réalisations d'un processus brownien. Il est

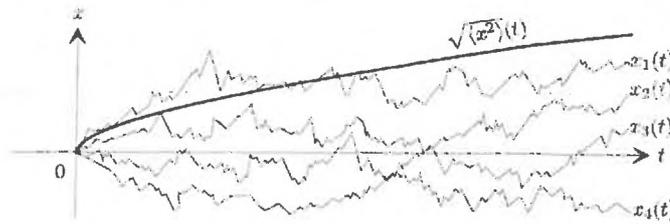


FIG. 2.1 – Réalisation du processus brownien. La courbe en trait épais représente $\sqrt{\langle x^2(t) \rangle} = \sqrt{2\lambda t}$ (d'après Martin, 2001 [46])

intéressant de caractériser les propriétés géométriques des trajectoires browniennes. Une analyse systématique de ces propriétés peut se trouver, notamment, chez K. Falconer(2003) [14]. Les principales propriétés sont :

(i) les trajectoires browniennes sont des courbes fractales continues et non-différentiables.

(ii) avec probabilité 1, dans R^n ($n \geq 2$), les trajectoires ont une dimension fractale égale à 2. (La dimension fractale ici définie est la dimension de Hausdorff (voir en annexe F)).

Le processus brownien satisfait la condition suivante (Samorodnitsky, 1994 [69])

$$X(ct) \stackrel{d}{=} c^H X(t) \quad (2.20)$$

où $\stackrel{d}{=}$ signifie équivalence de distribution et où $H = 1/2$ est le coefficient ou indice de similarité.

Gorenflo (2002 [22]) compare une simulation de mouvement brownien par des marcheurs aleatoires unidimensionnels avec la solution analytique de l'équation de la diffusion (2.17) (figure 2.2). De nombreux résultats montrent que la dispersion en milieu poreux hétérogène s'écarte parfois de ces comportements.

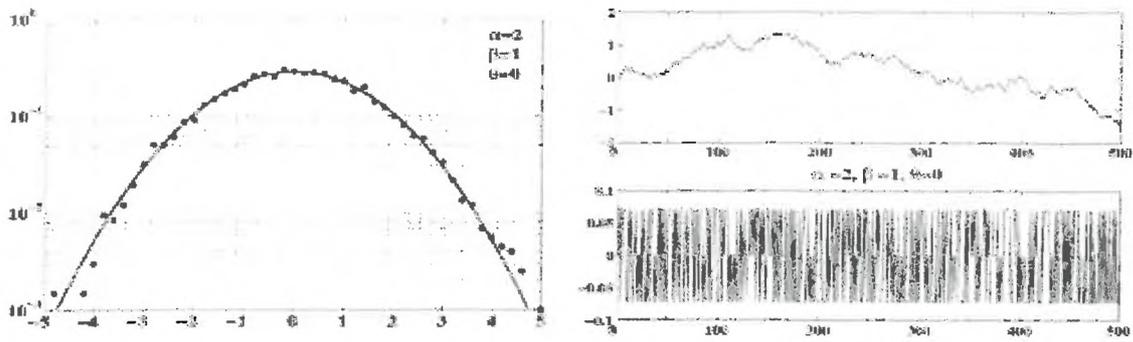


FIG. 2.2 – L’histogramme (à gauche), la trajectoire d’une particule (en haut à droite) et les incréments correspondant (en bas à droite) pour la diffusion standard (mouvement brownien). D’après R.Gorenflo [21]

2.4 Evidences expérimentales de lois de transport anormal

Un certain nombre d’expériences de traçage dans des milieux poreux ont été récemment réalisées montrant que l’équation CDE n’est pas la mieux adaptée à la description du transport de traceur.

Burns (1996) [4] réalise plusieurs expériences d’infiltration unidimensionnelle d’un traceur passif (bromure) dans une colonne remplie de sable saturé en eau (voir figure 2.3). Le remplissage de la colonne a été réalisé de façon à minimiser l’hétérogénéité du

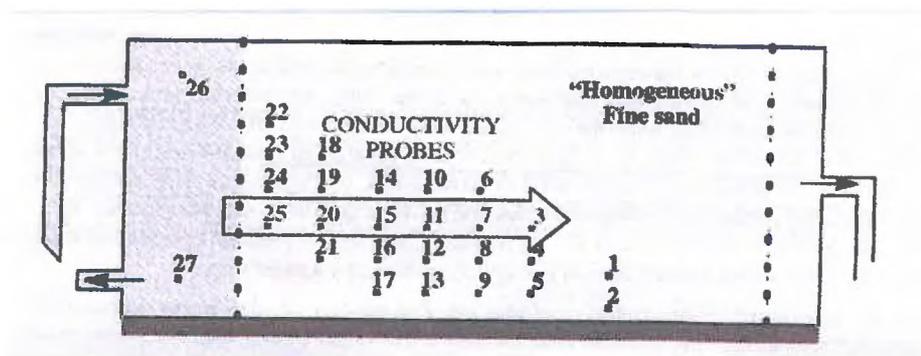


FIG. 2.3 – Schéma du dispositif expérimental de Burns (19 96) (reproduit d’après D.A. Benson et al. 2000)

milieu. La vitesse moyenne de l’écoulement est constante. Ces expériences ont montré des courbes d’élution du bromure non gaussiennes. Les courbes d’élution devraient être des gaussiennes translatées d’une distance vt qui est la distance moyenne parcourue dans la colonne. Si elles étaient gaussiennes, leur représentation dans un graphique de

probabilité devrait être une droite de pente proportionnelle au coefficient de dispersion, et la concentration relative du traceur devrait augmenter proportionnellement à $(\lambda t)^{1/2}$. Les courbes observées par Burns [4] sont des sigmoïdes comme l'indique la figure 2.4, qui montre que même dans un milieu relativement homogène l'équation CDE classique peut ne pas s'appliquer. D.A. Benson et al. (2000) [3] réinterprète ces résultats et montre que les courbes d'élution suivent des lois α -stables, dont la définition sera rappelée au chapitre 3.

M. Levy et B. Berkovitz (2003) [37] décrivent trois séries d'expériences de traçage

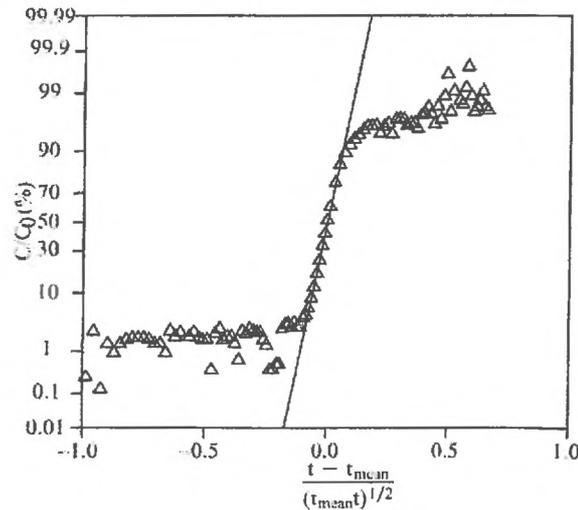


FIG. 2.4 – Graphique de la concentration normalisée par rapport au temps normalisé (Burns, 1997). La droite correspond au profil gaussien. Les triangles sont les données expérimentales.

(chlorure) dans des colonnes de sable saturées en eau. Les sables utilisés diffèrent par le diamètre de leurs grains et par la façon dont ils sont compactés dans la colonne. Trois séries d'expériences sont décrites avec, respectivement, une structure homogène, une distribution uniformément hétérogène et une structure hétérogène aléatoire. Le traceur est appliqué de façon continue (impulsion échelon) pour différentes vitesses moyennes de l'écoulement. Les courbes d'élution du chlorure pour les trois séries d'expériences sont comparées aux solutions de l'équation CDE. Pour le milieu homogène, les écarts à la solution gaussienne ne sont observés que pour des temps longs, et ils sont plus marqués pour des vitesses d'écoulement élevées. Les résultats observés pour les structures hétérogènes montrent la même tendance, mais les écarts sont encore plus marqués.

Des résultats similaires sont obtenus à l'échelle des formations géologiques dans l'aquifère de sable et gravier de Cape Code dans le Massachusetts (D.A. Benson et al., 2000 [3]). Un traceur non réactif (bromure) a été injecté dans l'aquifère et son

déplacement dans l'aquifère est suivi en prélevant des échantillons en 650 points. L'analyse réalisée est unidimensionnelle le long de la direction principale d'écoulement dans l'aquifère. Pour des temps longs, le graphique de la variance en fonction de la distance moyenne parcourue n'est pas linéaire (voir figure 2.5). Une distribution α -stable représente mieux l'évolution du panache pour des temps longs. D'autres expériences

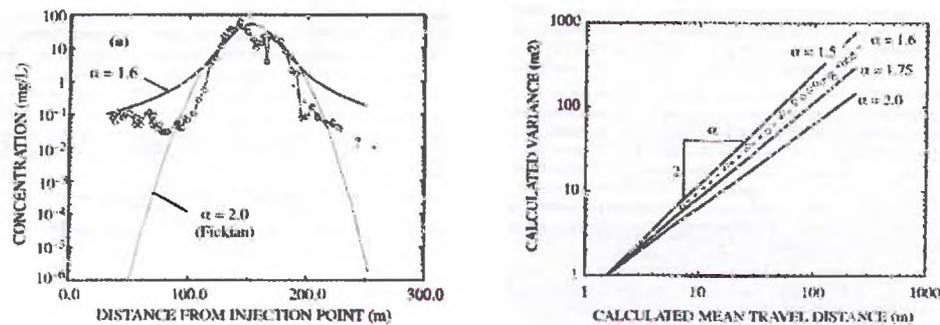


FIG. 2.5 – A droite, la variance du panache de soluté calculée en fonction de la distance moyenne (Garabedian et al., 1991). A gauche, représentation semi-log d'un panache mesuré (symbols) et calculé (lignes). Celles-ci indiquent le maximum de la concentration dans le plan y-z.

(E.E. Adams et L.W. Gelhar, 1992 [2]; Ya. Pachepsky et al., 2000 [61]; D.A. Benson et al., 2001) confirment que la loi de transport normale n'est pas la mieux adaptée pour décrire le transport de solutés dans les milieux poreux.

Si l'objet de cette thèse est l'étude du transport dans les milieux poreux, il est néanmoins important de signaler que des écarts à la loi de diffusion normale ont été observés dans d'autres champs d'application de celle-ci. Ces domaines sont, notamment, la dynamique des chaînes polymériques, le transport des charges dans des semi-conducteurs amorphes, le mouvement des bactéries, le transport dans des plasmas turbulents et même les variations des cours de la bourse. Une bibliographie extensive sur ces exemples est détaillée dans R. Metzler et J. Klafter [51] et [54].

2.5 Interprétation des écarts à la loi normale

Les milieux poreux, comme les sols et les roches, sont des milieux complexes qui présentent des hétérogénéités à toutes les échelles d'observation. Ils peuvent être conceptualisés comme des systèmes avec une structure hiérarchisée. Celle-ci peut être discrète ou, le plus souvent, continue (J.H. Cushman, 1990 [12]).

Dans un mouvement brownien classique, la particule subit des collisions avec les molécules du fluide qui, si ce dernier est immobile, sont distribuées d'une façon ho-

mogène et isotrope dans l'espace. Ce sont ces collisions qui sont à l'origine du mouvement erratique de la particule de traceur.

A une échelle mésoscopique, très grande par rapport au temps moyen de collision moléculaire, l'effet des collisions peut être représenté par une force aléatoire et une force moyenne de friction proportionnelle à la vitesse de la particule. Cette échelle est appelée échelle de Stokes et l'approche est due à Langevin.

Du fait de l'homogénéité et de l'isotropie de la distribution moléculaire du fluide, il est raisonnable de supposer que la force aléatoire exercée par le fluide sur la particule puisse suivre une distribution gaussienne de moyenne zéro et non corrélée dans le temps. Dans ce cas, on montre (D.A. Mc Quarrie, 2000 [43]) que la limite continue satisfait la loi de Fick. Cette symétrie sera rompue si le fluide est en mouvement et à cause de la présence des parois solides du milieu poreux. C'est alors que la distribution des parois solides dans l'espace aura un rôle prépondérant sur la trajectoire de la particule. Si celle-ci est "suffisamment homogène et isotrope" à une échelle donnée d'observation la force aléatoire pourra être représentée par une gaussienne et on retrouvera, à cette échelle là, la loi normale de transport. Mais, la plupart des sols et des roches ne rempliront pas cette condition. Il est donc nécessaire de trouver d'autres modèles aléatoires qui représentent mieux le phénomène de transport.

Dans un milieu poreux hétérogène, la particule de traceur ne peut pas, en général, se déplacer librement. Elle est obligée de suivre les chemins complexes de l'espace poral. Ces chemins sont déterminés par la géométrie du solide et peuvent comporter des pores sans issue ou de grands pores continus. Dans des pores sans-issue la particule sera piégée et pourra y rester ou repartir après un certain temps d'attente. Dans les grands pores continus, elle se déplacera sans contraintes avec une faible probabilité d'être réfléchi par les parois solides. Si le fluide est en mouvement, ce phénomène sera accentué par l'advection.

Dans le premier cas, le parcours moyen de la particule eu fonction du temps sera inférieur à celui qu'on observait dans un milieu sans contraintes. Ce comportement reçoit le nom de transport sous-diffusif ou persistant. Dans le second cas, la particule parcourra en moyenne plus de chemin que dans le cas normal, phénomène connu sous le nom de super-diffusion. Dans le cas général, dans un milieu poreux, les deux phénomènes peuvent coexister et le comportement de la particule dépendra de la structure de l'espace poral et de la vitesse du fluide.

Afin d'être en mesure de discuter avec précision ces scénarios et de mieux comparer avec des résultats expérimentaux, nous allons avoir besoin d'outils théoriques. Une première catégorie devra permettre une description statistique des observations et des

hypothèses élaborées pour les interpréter. D'autres outils, en relation avec les premiers, conduiront à des équations aux dérivées partielles destinées à modéliser le transport anormal.

Chapitre 3

Outils de base pour la généralisation des modèles de transport anormal.

3.1 Introduction

On a vu au chapitre précédent des modèles simples de CTRW complètement caractérisés par la distribution des probabilités de transition et des temps d'attente. Dans ce cadre, la loi de Fick résulte d'une distribution gaussienne, respectivement exponentielle, pour les probabilités de transition et les temps d'attente. Au chapitre 4, on verra que si l'on utilise une distribution α -stable pour les probabilités de transition, le modèle CTRW modélise le phénomène d'antipersistence observé dans les résultats expérimentaux évoqués au chapitre 2. On verra aussi que la généralisation à des distributions de temps d'attentes présentant des moments d'ordre un divergents modélise le phénomène de persistance. Dans les deux cas, la limite macroscopique des modèles CTRW diffère de la loi de Fick et nécessite l'introduction d'opérateurs intégrodifférentiels fractionnaires.

Dans ce chapitre, on introduit les notions de base et les principales propriétés associées aux distributions stables et aux opérateurs intégrodifférentiels fractionnaires.

3.2 Les lois de distribution α -stable

Les lois α -stables sont une généralisation des statistiques gaussiennes.

Le fait de devoir recourir à des statistiques non gaussiennes peut paraître troublant, puisque le théorème de la limite centrale montre que la loi normale est un attracteur : en additionnant un grand nombre de fois des variables aléatoires distribuées d'une façon identique et indépendantes X_n et de variance σ , et en normalisant convenablement (par $n^{-1/2}$) on obtient une variable aléatoire dont la loi tend vers la loi normale. Comme les propriétés des milieux naturels sont souvent le résultat d'un grand nombre d'effets non corrélés entre eux, on s'attend à ce qu'elles soient distribuées selon des lois possédant cette propriété d'attractivité. En fait, une vaste classe de lois plus générales que la loi normale joue le même rôle qu'elle lorsque les X_n n'ont pas de variance finie. On doit alors normaliser par autre chose que $n^{-1/2}$. Ces lois, appelées lois α -stables, ont été introduites par Lévy.

Après avoir précisé la notion de loi α -stable et l'énoncé général du théorème de la limite centrale, on présente leurs principales propriétés. On verra, en particulier, que leur densité et leur fonction de répartition ressemblent beaucoup à des résultats expérimentaux signalés au chapitre précédent.

3.2.1 Notion de loi α -stable

Les diverses notions de stabilité en physique font référence à des conditions assurant qu'une propriété est conservée par une classe de transformations. Ici, l'accent est mis sur la composition des fonctions de répartition, donc sur des combinaisons linéaires pour les variables aléatoires (VA) auxquelles elles sont associées.

Composition des fonctions de répartition.

Soient deux VA notées X_1 et X_2 , indépendantes et de distribution commune F . Soient a_1, a_2, b_1, b_2 des réels. La fonction de répartition de $a_1X_1 + a_2X_2 + b_1 + b_2$ est la convolution $F(a_1x + b_1) * F(a_2x + b_2)$. On l'appelle composition des lois de $a_1X_1 + b_1$ et $a_2X_2 + b_2$.

Définition des lois stables de Lévy

La variable aléatoire X qui a pour fonction de distribution F , est dite stable (P.Lévy, 1937 [36]), si pour tout $(a_1, a_2) \in \mathbf{R}^{+2}$ et pour tout $(b_1, b_2) \in \mathbf{R}$ il existe $a > 0$ et $b \in \mathbf{R}$ tels que la composition $F(a_1x + b_1) * F(a_2x + b_2)$ soit égale à $F(ax + b)$.

Remarque : Ceci est réalisé si et seulement si la loi de la VA $aX + b$ est identique à celles de $a_1X_1 + a_2X_2 + b_1 + b_2$.

Lorsque la loi F est stable et si les VA X_1, \dots, X_n sont distribuées selon F , alors, pour chaque n entier naturel il existe un réel positif c_n tel que $\frac{X_1 + \dots + X_n}{c_n}$ soit aussi distribuée selon F (d'après W.Feller [15] et B.V.Gnedenko [18]). On peut de plus démontrer que c_n est une puissance de n . L'inverse α de l'exposant contribue à caractériser la loi et est appelé ordre de stabilité. On dit que la loi est α -stable. L'ordre α ne peut pas dépasser 2, et ne suffit pas pour déterminer la fonction de répartition F . Il donne cependant des renseignements sur le comportement asymptotique de la densité.

Les lois α -stables jouent un rôle important dans la nature, tout d'abord à cause de la propriété qui les définit. Elles sont aussi des attracteurs pour un grand nombre de lois associées à des VA obtenues par addition de VA possédant des propriétés communes mais pas forcément distribuées selon des lois α -stables.

3.2.2 Généralisation du théorème de la limite centrale

Après avoir précisé ce qu'est attracteur pour un loi de probabilité, nous montrons le rôle des lois α -stables dans ce contexte.

Notion d'attracteur

Pour a et b réels, on passe de la VA X à la VA $aX + b$ et on dit que leurs lois sont "du même type". Les coefficients a et b influencent l'amplitude et la moyenne.

Définition (W. Feller, 1968 [15]) : soit F la fonction de distribution d'une suite de variables aléatoires indépendantes (X_n) . On dit que la loi G est un attracteur pour F ou que F est dans le domaine d'attraction de G , lorsqu'il existe des suites (A_n) et (B_n) avec $B_n > 0$, telles que la fonction de répartition de $\frac{X_1 + \dots + X_n}{B_n} - A_n$ tende vers G lorsque $n \rightarrow \infty$.

Remarque :

- (i) chaque loi stable est dans son propre domaine d'attraction ;
- (ii) deux lois de même type ont le même domaine d'attraction.

Domaine d'attraction

Seules les lois stables ont un domaine d'attraction non vide, comme l'indique le théorème suivant (B.V.Gnedenko, A.V.Kolmogorov, 1954 [18]).

Théorème : Une distribution G possède un domaine d'attraction non vide si et

seulement si elle est stable.

Il existe un grand nombre de lois stables. Leur comportement asymptotique permet de les distinguer.

Comportement asymptotique

L'ordre de stabilité α de la loi stable G est intimement lié au comportement asymptotique des éléments de son domaine d'attraction (W.Feller, 1968 [15]). Pour préciser ce point on dit qu'une fonction L est lentement variable à l'infini lorsque pour chaque $x > 0$ $\frac{L(tx)}{L(x)} \rightarrow 1$, quand $t \rightarrow 0$. Cette notion est utilisée dans l'énoncé suivant.

Théorème (W.Feller, 1968 [15])

- (i) Pour que la loi F appartienne à un domaine d'attraction il faut que $\int_{|X|<x} X^2 dF(x)x^{\alpha-2}$ soit lentement variable dans un voisinage de l'infini avec $\alpha \leq 2$.
- (ii) Si $\alpha = 2$ cette condition est suffisante si F n'est pas concentrée en un point.
- (iii) Si $\int_{|X|<x} X^2 dF(x)x^{\alpha-2}$ est lentement variable avec $0 < \alpha < 2$ alors F appartient à un domaine d'attraction si et seulement si

$$\frac{1 - F(x)}{1 - F(x) + F(-x)} \quad \text{et} \quad \frac{F(-x)}{1 - F(x) + F(-x)}$$

ont des limites finies quand $x \rightarrow +\infty$

Le corollaire suivant précise ce point.

Corollaire : pour que F appartienne au domaine d'attraction d'une loi α -stable avec $\alpha < 2$, il faut et suffit que

$$\frac{1 - F(x)}{1 - F(x) + F(-x)} \quad \text{et} \quad \frac{F(-x)}{1 - F(x) + F(-x)}$$

aient des limites finies quand $x \rightarrow \infty$ avec $\frac{1 - F(x) + F(-x)}{x^\alpha} \frac{\alpha}{1 - \alpha}$ lentement variable à $+\infty$.

Remarque :

(i) Lorsque F est symétrique, la seconde condition du corollaire ci-dessus équivaut à ce que $\frac{2F(-x)}{x^\alpha} \frac{\alpha}{1 - \alpha}$ soit lentement variable dans un voisinage de l'infini.

(ii) Certaines VA prennent exclusivement des valeurs positives. Tel est le cas pour des incréments temporels. Alors, les conditions du corollaire sont vérifiées dès que $\frac{1 - F(x)}{x^\alpha} \frac{\alpha}{1 - \alpha}$ est lentement variable dans un voisinage de l'infini.

(iii) Le moment d'ordre 2 des éléments du domaine d'attraction d'une loi α -stable avec $\alpha < 2$ diverge, mais les moments d'ordre inférieur à α existent.

La loi normale a pour domaine d'attraction les lois possédant une variance, comme l'indique la version classique du théorème de la limite centrale. Le théorème ci-dessus en représente une généralisation, mais dans la pratique on utilise souvent la version qui suit.

Version simplifiée du théorème de la limite centrale

En spécialisant un peu (B.V.Gnedenko, A.N.Kolmogorov) la suite (B_n) on déduit de ce qui précède que pour des VA X_n indépendantes, de loi F et de moyenne μ , il existe un réel positif σ tel que la loi de la VA

$$\frac{X_i + \dots + X_n - n\mu}{\sigma n^{1/\alpha}}$$

converge vers une loi α -stable sous les conditions suivantes.

Pour $\alpha = 2$ il faut et il suffit que F ait une variance finie. Alors σ égale cette variance.

Pour $\alpha < 2$ il faut et il suffit qu'il existe des réels c_1 et c_2 et des fonctions a_1 et a_2 qui tendent vers 0 à l'infini tels que $F(x) = (c_1 a_1^\alpha + a_2(x))|x|^{-\alpha}$ pour $x < 0$ et $F(x) = 1 - (c_2 a_1^\alpha + a_2(x))x^{-\alpha}$ pour $x > 0$.

Donc, finalement, une loi appartient au domaine d'attraction d'une loi stable avec $\alpha < 2$ dès que sa densité décroît comme une puissance d'exposant $(-\alpha-1)$ au voisinage de l'infini.

3.2.3 Distribution de densité de probabilité d'une loi stable

Les propriétés définissant les lois α -stables déterminent leur fonction caractéristique. Celle-ci est la transformée de Fourier de la densité, qui sera abondamment utilisée dans ce mémoire.

Fonction caractéristique

Comme la composition des lois de probabilités se traduit par le produit des fonctions caractéristiques, celle d'une loi α -stable est de la forme

$$\hat{\psi}(k) = e^{i\mu k} \hat{p}_\alpha(\sigma k, \theta) \quad (3.1)$$

avec $\hat{p}_\alpha(k, \theta) = e^{-\hat{\psi}_\alpha^\theta(k)}$

et $\hat{\psi}_\alpha^\theta(k) = |k|^\alpha e^{i(\text{sign}k)\frac{\theta\pi}{2}}$

(W.Feller [15], F.Mainardi et al. [45])

Le paramètre réel θ , qui représente l'asymétrie, vérifie $|\theta| \leq \min\{\alpha, 2 - \alpha\}$, cependant que α appartient à $(0, 2]$. Pour $\theta = 0$, on obtient une loi symétrique, mais pour $\theta = \pm\alpha$ on obtient une loi supportée par $(-\infty, 0]$ ou $[0, +\infty)$.

Le paramètre μ représente la moyenne des variables aléatoire correspondantes, et σ est le coefficient d'échelle (ou amplitude).

Remarque : pour $\alpha = 2$, $\min\{\alpha, 2 - \alpha\}$ s'annule et nous arrivons à la loi normale avec le second moment connecté avec σ alors que la moyenne est μ . Avec $\sigma = 0$ on a la distribution de *Dirac*, localisée en μ .

Pour $\alpha = 2$ on reconnaît une gaussienne symétrique.

Allure générale de la densité

Sauf lorsque $\alpha = 2$, 1 ou $1/2$, il n'est pas possible d'exprimer à l'aide de fonctions usuelles la densité de probabilité $p_\alpha(x, \theta)$ d'une loi α -stable normalisée ($\sigma = 1$) et centrée ($\theta = 0$) de coefficient d'asymétrie θ . On dispose par contre de développements en séries (Feller, 1966 [15]) et d'expressions intégrales (J.H.McCulloch, 1966 [13]), V.M.Zolotarev, 1986 [74]). Nous insisterons sur le cas symétrique ($\theta = 0$) pour lequel

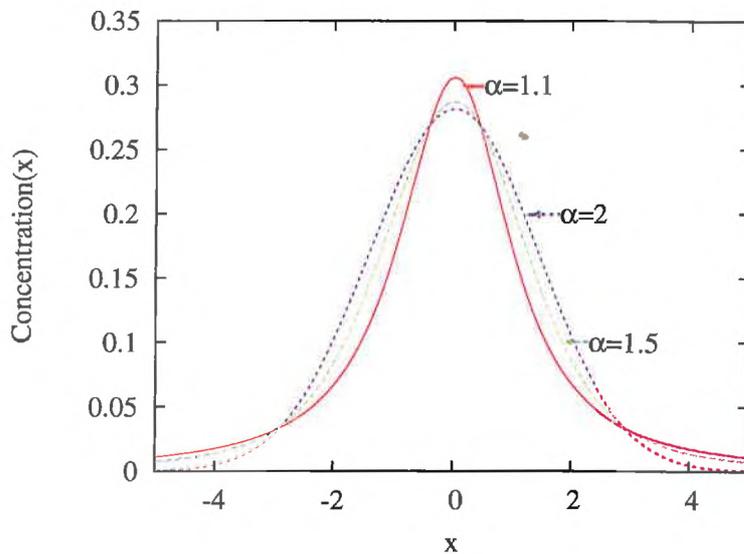


FIG. 3.1 – Ajustement de densité de la probabilité pour différents α .

la figure 3.1 représente l'allure de $p_\alpha(x, 0)$ pour plusieurs valeurs de α . Pour $|x|$ grand, $p_\alpha(x, 0)$ est proportionnel à $|x|^{-1-\alpha}$ pour $\alpha < 2$. La figure Log-Log (3.2) met mieux en évidence ce comportement asymptotique qu'on signale en parlant des "ailes épaisses" (en anglais "heavy tails") de la densité de probabilité. Cette figure correspond à une loi symétrique ($\theta = 0$).

Les coordonnées logarithmiques font apparaître le caractère singulier de la gaussienne ($\alpha = 2$) parmi les lois α -stables. Ce point peut servir à mettre en évidence expérimentalement une grandeur distribuée selon une loi α -stable différente de la loi

normale. Dans certains cas une primitive est plus utile.

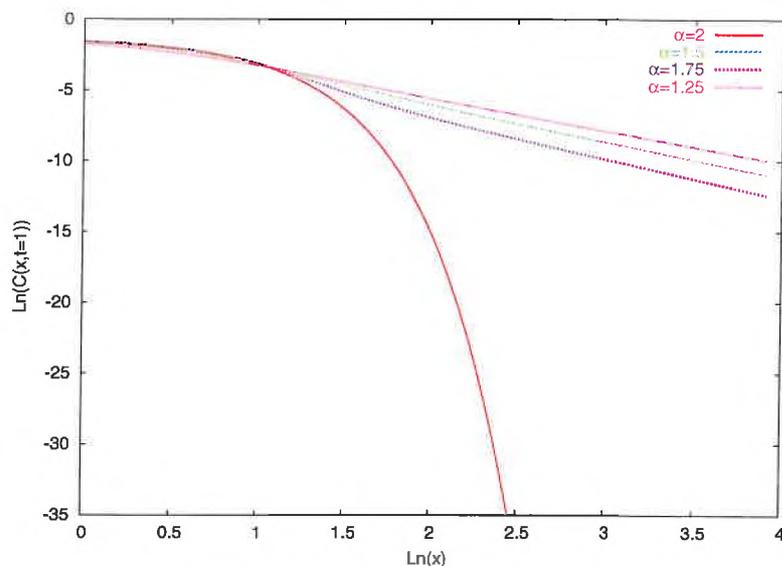


FIG. 3.2 – Profil de densités de probabilité des lois α -stable symétriques pour différents α en coordonnées logarithmiques.

3.2.4 Conclusions sur les lois stables

Parce qu'elles sont les seuls attracteurs possibles pour les lois de probabilité, les lois α -stables interviennent dans la description statistique de nombreux phénomènes naturels. Certains aménagements doivent être attendus. En effet, les théorèmes sur lesquels s'appuie cette idée, assez floue pour pouvoir sembler générale, sont très précis. Ils concernent des sommes de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées. Nous allons effectivement nous intéresser à des grandeurs physiques qui sont des sommes de ce genre.

Cependant d'autres grandeurs peuvent être obtenues en remplaçant les sommes par des produits, par exemple. Dans ce cas, c'est le logarithme qui doit être distribué selon une loi α -stable. Et on peut penser à des opérations plus compliquées, même lorsque des événements indépendants et correspondant à des statistiques de même type s'accumulent.

Les lois α -stables sont cependant à notre disposition au même titre que la loi normale qui est un cas particulier. Donc même si leur caractère "universel" reste à confirmer dans chaque situation, elles représentent un outil puissant. On peut les utiliser pour traiter des données expérimentales ou pour modéliser des phénomènes déterministes mais trop complexes.

Certains résultats expérimentaux en hydrologie portent la signature de lois α -stable. On les remarque en comparant des données rappelées au chapitre 2 avec les propriétés des densités de probabilité qui viennent d'être énumérées dans le présent chapitre. Il est donc naturel de s'intéresser à des processus généralisant les mouvements browniens, exactement comme les lois α -stables généralisent la loi normale. Ceci pourra nous conduire à chercher des modèles englobant aussi l'équation d'advection-dispersion comme cas particulier.

3.3 Les dérivées fractionnaires

Plusieurs ouvrages sont dédiés à l'analyse fractionnaire, et, notamment, K.B. Oldham et J. Spanier (1974)[60], K.S. Miller et B. Ross (1993)[52] et S.G. Samko et al.(1993)[68]. Le calcul fractionnaire est une généralisation naturelle du calcul différentiel. Son histoire remonte à L'Hôpital (1693) qui se pose la question d'interpréter la dérivée d'ordre $1/2$. C'est Lacroix (1879) qui montre que pour $f(x) = x^a$, et $a > 0$

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

Postérieurement, Fourier, Abel, Liouville, Riemann, Weyl, Riesz, Marchaud et Caputo, entre autres, ont contribué au développement du calcul fractionnaire dans lequel on définit des dérivées et intégrales d'ordre non entier.

On présentera ici les définitions des opérateurs fractionnaires et les principales propriétés qu'on utilisera dans la suite de cette thèse. Pour la théorie complète et des approches complémentaires non présentées ici, on peut se référer aux auteurs cités ci-dessus, ainsi qu'à P.L. Butzer et U. Westphal (2000)[8].

3.3.1 Les opérateurs fractionnaires de Riemann-Liouville

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

$${}_a I_x^n f(x) = \int_a^x du_1 \int_a^{u_1} du_2 \dots \int_a^{u_{n-1}} f(u_n) du_n = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-u)^{n-1} f(u) du$$

peut être généralisée à une intégrale d'ordre $\alpha \in R^+$ en remplaçant $(n-1)!$ par $\Gamma(\alpha)$.

On a ainsi

$${}_a I_x^\alpha f(x) \equiv \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-u)^{\alpha-1} f(u) du \quad (3.2)$$

et

$${}_x I_a^\alpha f(x) \equiv \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^a (u-x)^{\alpha-1} f(u) du \quad (3.3)$$

Les équations (3.2) et (3.3) définissent les opérateurs d'intégration fractionnaire de Riemann-Liouville.

La différentiation fractionnaire est définie comme la dérivée d'ordre entier $n > \alpha > n - 1$ d'une suite d'intégrales fractionnaires, de la façon suivante :

$$\frac{d^\alpha f(x)}{d(x-a)^\alpha} = {}_a D_x^\alpha f(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} {}_a I_x^{n-\alpha} f(x) \quad (3.4)$$

$$\frac{d^\alpha f(x)}{d(a-x)^\alpha} = {}_x D_a^\alpha f(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} {}_x I_a^{n-\alpha} f(x) \quad (3.5)$$

Ces équations définissent les opérateurs de dérivation par la droite et par la gauche.

Les cas $a = 0$ et $a = \infty$ présentent un intérêt particulier.

(i) Pour $a = 0$ la transformée de Laplace de l'intégrale fractionnaire est

$$\mathcal{L}[{}_0 I_x^\alpha f(x)] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \mathcal{L}[x^{\alpha-1}] \mathcal{L}[f(x)] = s^{-\alpha} \hat{f}(s) \quad (3.6)$$

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

$$\mathcal{L}[{}_0 D_x^\alpha f(x)] = s^\alpha \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{m-1} {}_0 D_x^{(k)} {}_0 I_x^{n-\alpha} s^{m-1-k} \quad (3.7)$$

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

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

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

$$\mathcal{L}[{}_0 I_x^\alpha x^\mu] = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+\alpha+1}}, \quad \mu > -1$$

$$\mathcal{L}[{}_0 I_x^\alpha e^{mt}] = \frac{1}{s^\alpha (s-m)}$$

(ii) Pour $a = \infty$ les opérateurs intégraux (3.2) et (3.3) sont connus sous le nom d'opérateurs de Weyl. Il convient de recourir à la transformée de Fourier, car dans l'espace de Fourier les équations (3.2) et (3.3) sont des convolutions définies par

$$\mathcal{F}[{}_{-\infty} I_x^\alpha f(x)] = (ik)^\alpha \hat{f}(k) \quad (3.8)$$

$$\mathcal{F}[{}_x I_{+\infty}^\alpha f(x)] = -(ik)^\alpha \hat{f}(k) \quad (3.9)$$

3.3.2 La dérivée fractionnaire de Caputo

Une définition voisine de celle de Riemann-Liouville, introduite plus tard pour traiter des problèmes de mécanique, est celle de Caputo (1967), qui s'exprime selon

$${}_0\mathcal{D}^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_0^t (t-u)^{m-\alpha-1} f^{(m)}(u) du \quad (3.10)$$

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

La différence entre la dérivée de Caputo et celle de Riemann-Liouville, est que la définition de Caputo prend en compte la valeur en 0^+ de la fonction f et de ses dérivées d'ordre entier. Si on dénote la dérivée de Caputo par \mathcal{D}_t^α et par D_t^α la dérivée de Riemann-Liouville, la correspondance entre l'une et l'autre est [65][20][22] :

$$\mathcal{D}_t^\alpha = D_t^\beta f(t) - \sum_{k=0}^{m-1} f^{(k)}(0^+) \frac{t^{k-\alpha}}{\Gamma(k+1-\alpha)} \quad (3.11)$$

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

Cette dérivée est utile pour notre sujet, et sa transformée de Laplace s'exprime par

$$\mathcal{L}[\mathcal{D}_t^\alpha f(t)](s) = s^\alpha \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{m-1} s^{\alpha-1-k} f^{(k)}(0^+) \quad (3.12)$$

3.3.3 La dérivée de Riesz-Feller.

La dérivée de Riesz-Feller $\nabla_x^{\alpha,\theta}$ est définie à l'aide de sa transformée de Fourier

$$\mathcal{F}[\nabla_x^{\alpha,\theta} f(x)] \equiv -|k|^\alpha e^{i(\text{sign}k)\theta\pi/2} \hat{f}(k) \quad (3.13)$$

Cette dérivée est importante pour notre étude, parce que son symbole est le logarithme de la fonction caractéristique d'une loi α -stable (pour $\alpha \in (0, 2]$), en accord avec la paramétrisation de Feller. Nous nous intéressons seulement au cas symétrique $\theta = 0$, que nous noterons ∇_x^α . Dans ce cas, la transformée de Fourier devient $-|k|^\alpha \hat{f}(k)$.

Pour $\alpha \neq 1$, une définition équivalente de la dérivée de Riesz-Feller est donnée par la combinaison des dérivées de Riemann-Liouville suivantes [20] :

$$\nabla_x^\alpha f(x) = -\frac{1}{2\cos(\alpha\pi/2)} \left({}_{-\infty}D_x^\alpha f(x) + {}_xD_{+\infty}^\alpha f(x) \right) \quad (3.14)$$

On obtient ainsi un opérateur qui généralise le Laplacien.

De même, on définit l'intégrale de Riesz-Feller par

$${}_x\mathcal{I}_0^\alpha f(x) = \frac{1}{2\cos(\alpha\pi/2)} \left({}_{-\infty}I_x^\alpha f(x) + {}_xI_{+\infty}^\alpha f(x) \right) \quad (3.15)$$

3.3.4 Les différences finies fractionnaires : approche de Grunwald-Letnikov

La dérivée d'ordre entier d'une fonction $f(x) \in C^n$ est définie par :

$$f^{(n)}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(\Delta_h^n f)(x)}{h^n} \quad (3.16)$$

où les différences finies $\Delta_h^n f$ d'ordre entier l et de pas h sont définies en x par

$$(\Delta_h^l f)(x) = \sum_{k=0}^l (-1)^k \binom{l}{k} f(x - kh)$$

En passant de n entier à $\alpha > 0$ rationnel, les dérivées fractionnelles de Grunwald-Letnikov sont définies comme

$$f_{\pm}^{(\alpha)}(x) = \lim_{h \rightarrow +0} \frac{(\Delta_{\pm h}^{\alpha} f)(x)}{h^{\alpha}} \quad (3.17)$$

par les différences finies généralisées d'ordre fractionnaire α , elles mêmes définies par

$$(\Delta_{\pm h}^{\alpha} f)(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x \mp kh) \quad (3.18)$$

pour $\alpha \in R^+$ et $\binom{\alpha}{k} = \frac{(-1)^k (\alpha)_k}{k!}$. Notez la définition du symbole de Pochhammer $(\alpha)_k$ ([68]) :

$$(z)_n = z(z+1)(z+2)\dots(z+n-1), \quad n = 1, 2, \dots$$

S.G.Samko [68] montre que les dérivées de Grunwald-Letnikov ($f_{\pm}^{(\alpha)}$) (3.17) coïncident avec les dérivées de Marchaud (S.G.Samko [68]) pour des fonctions plates, qui s'annulent à l'infini. Pour de telles fonctions $f(x)$ les dérivées de Marchaud coïncident avec des dérivées de Riemann-Liouville si en plus les fonctions sont régulières (voir le théorème 5.8 [68]). D'ailleurs on va principalement s'intéresser à de telles fonctions.

De plus, pour $t > 0$ et $m-1 < \alpha < m$ l'équation

$$D_{0+}^{\alpha} f(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{t^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)} + \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_0^t \frac{f^{(m)}(u) du}{(t-u)^{\alpha+1-m}} \quad (3.19)$$

établit la relation entre les dérivées de Caputo et de Grunwald-Letnikov.

L'approche des différences finies de Grunwald-Letnikov est très utile pour des résolutions numériques d'intégrales et de dérivées fractionnaires.

3.4 Conclusion

Les définitions des lois α -stables et des dérivées fractionnaires ont été rappelées. Elles sont impliquées dans l'étude de nombreux phénomènes physiques et dans l'interprétation de nombreuses données. Ceci est dû au fait que ces lois jouent un rôle aussi important que la loi normale.

Comme elle, elles régissent la répartition de toutes les variables aléatoires obtenues en ajoutant un grand nombre de variables identiquement distribuées, sous certaines conditions, pas plus restrictives que celles conduisant à la loi normale. Le lien entre cette dernière et l'équation CDE est bien établi. Il nous reste à discuter celui qui existe entre les lois α -stables et une vaste classe d'équations aux dérivées partielles incluant des dérivées fractionnaires.

Chapitre 4

Modèles CTRW généralisés et équations de transport fractionnaires

4.1 Introduction

Les marches au hasard de temps continu fournissent des modèles pour le transport à des échelles de temps et de longueur que l'on peut faire varier. Le hasard peut représenter ce qu'on ne sait pas d'un milieu complexe, surtout lorsque l'hypothèse ergodique laisse espérer qu'en reproduisant suffisamment de fois une expérience on soit sûr d'explorer toutes les réponses qu'elle peut donner. En fait le hasard permet de tenir compte de variations importantes aux échelles τ et l . Les outils statistiques définis au chapitre 3 élargissent considérablement le champ couvert par les mouvements browniens.

En considérant que τ et l sont petits, on prétend accéder uniquement à des grandeurs mesurées à des échelles beaucoup plus grandes, au niveau desquelles on cherche à décrire le comportement du milieu. Pour une classe assez vaste de marches au hasard, on verra que, à grande échelle, la concentration en particules évolue en obéissant à une équation aux dérivées partielles dont les coefficients sont constants. Cependant elle peut contenir des dérivées fractionnaires. On se restreindra au cas de modèles CTRW découplés, c'est-à-dire où les distributions de temps d'attente et de transition sont indépendantes. On traitera tout d'abord le cas des CTRW dont la probabilité de transition suit une loi α -stable de Lévy avec $1 < \alpha < 2$, ce qui est un modèle pour le transport anti-persistant ou super-diffusif. Dans la deuxième partie du chapitre, on présentera le modèle CTRW avec mémoire et dont la distribution des temps d'attente possède un moment d'ordre un

divergent. On analysera différentes distributions des temps d'attente, afin d'englober le transport persistant ou sous-diffusif. Dans la dernière partie du chapitre on analysera le cas du transport anormal dans un fluide en mouvement.

4.2 Modèle CTRW pour le transport super-diffusif et équation de transport fractionnaire en espace

Une CTRW découplée et sans mémoire dont la distribution des probabilités de transition ρ suit une loi α -stable avec $1 < \alpha < 2$, est un processus markovien qui reçoit le nom de vols de Lévy. Donc les temps d'attente sont distribués selon la densité $w(t) = \tau^{-1}e^{-t/\tau}$. On ne considère que le cas d'une distribution symétrique.

Des réalisations de trajectoires de vols de Lévy pour différents paramètres α en dimension 1 sont montrées en figure (4.1) On observe que des sauts de courte distance

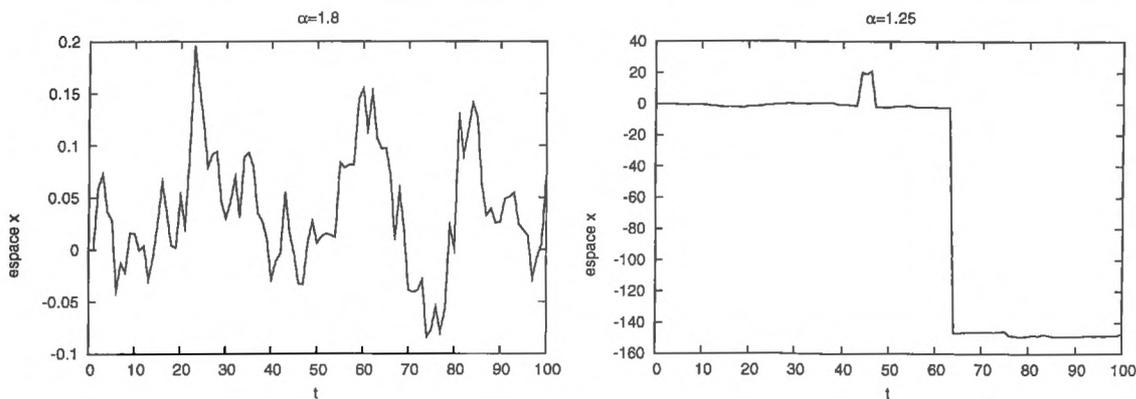


FIG. 4.1 – Trajectoire d'une particule réalisant les vol de Lévy pour deux valeurs de α .

sont intercalés avec des sauts plus grands ce qui est à l'origine de la divergence de la variance de la distribution. Des réalisations de trajectoires de vols de Lévy en dimension 2 sont illustrées par la figure (4.2). La trajectoire du mouvement brownien ($\alpha = 2$) en 2 dimensions présente des clusters denses qui tendent à couvrir complètement la surface, donc sa dimension fractale est 2. En contraste, dans les vols de Lévy, les petits sauts produisent des clusters denses, tandis que les grands sauts, moins fréquents, initient de nouveaux clusters. Ces trajectoires présentent une géométrie fractale de dimension plus petite que 2 alors que la dimension de l'espace sous-jacent est 2. Un phénomène analogue est observé en dimension supérieure.

Dans les deux cas (dimensions 1 et 2) le mouvement des particules résulte de l'accumulation de sauts successifs. Leur longueur ne dépend pas de la position, et sa

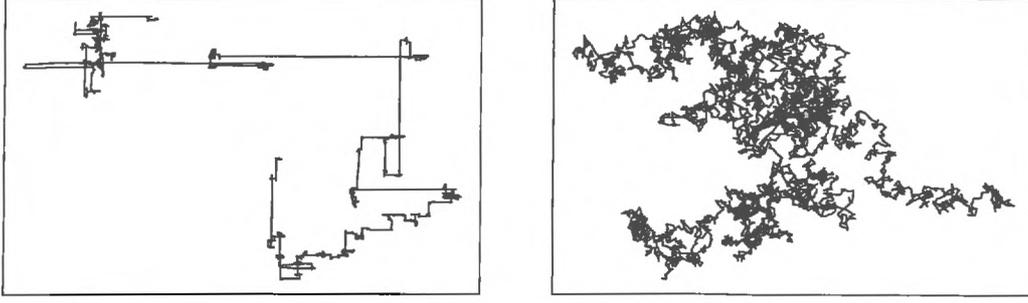


FIG. 4.2 – Trajectoire d'une particule réalisant les vols de Lévy en dimension 2. Exemples correspondant à deux valeurs de α : à gauche $\alpha = 1.2$, à droite $\alpha = 2$.

distribution a pour fonction caractéristique de probabilité de transition

$$\hat{\rho}(k) = e^{-l^\alpha |k|^\alpha} \sim 1 - l^\alpha |k|^\alpha$$

Pour $x \rightarrow \infty$, la distribution de l'amplitude des sauts présente le comportement asymptotique suivant

$$\rho(x) \sim l^{-\alpha} |x|^{-1-\alpha}$$

On voit qu'elle décroît moins vite que la distribution gaussienne pour les grandes distances.

En dimension 1, chaque saut est défini par son amplitude. En dimension 2 cela ne suffit pas, mais les directions sont tout simplement uniformément distribuées dans le cas isotrope. De nombreuses variables privilégiant éventuellement une direction peuvent être envisagées. Dans la suite nous concentrons nos efforts sur la dimension 1. Parce que plus tard, nous allons nous intéresser particulièrement à un problème de conditions aux limites.

En utilisant pour chaque (k, u) l'approximation donnée ci-dessus pour la fonction caractéristique dans l'équation de Montroll-Weiss (2.10), on obtient (lorsque l et τ sont petits)

$$C(k, u) \simeq \frac{1}{u + \lambda_\alpha |k|^\alpha} \quad (4.1)$$

avec $\lambda_\alpha = \frac{l^\alpha}{\tau}$, où τ est le temps caractéristique ou moment d'ordre un de la distribution exponentielle des temps d'attente. On en déduit que la transformée de Laplace de la transformée de Fourier de $\partial_t C(x, t)$, qui n'est autre que $u\tilde{C}(k, u) - \hat{C}(k, 0)$, est égale à $-\lambda_\alpha |k|^\alpha \tilde{C}(k, u)$. Par conséquent, en retournant aux variables physiques on obtient l'équation de transport fractionnaire en espace [51], [20], qui s'exprime par

$$\partial_t C(x, t) = \lambda_\alpha \nabla_x^\alpha C(x, t) \quad (4.2)$$

où ∇_x^α est l'opérateur fractionnaire de Riesz-Feller défini au paragraphe (3.3.3). Pour $\alpha = 2$, l'équation (4.2) est tout simplement l'équation de diffusion de Fick, aussi appelée équation de la chaleur.

Lorsqu'on considère un domaine spatial infini, toutes les solutions s'obtiennent à partir de la réponse impulsionnelle. Il s'agit du problème dont la condition initiale est $\delta(x - x_0)$. Dans ce cas, il est possible d'obtenir une solution exacte de l'équation fractionnaire sous forme d'une intégrale par inversion des transformées de Laplace et Fourier, mais aussi, sous la forme d'une fonction spéciale de Fox (Prudnikov A.P et al., 1989 [66]).

Solution sous forme intégrale

On considère l'équation (4.2) dans un milieu infini, avec $\alpha \in (1, 2]$ et la condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$. L'équation (4.2) s'écrit dans l'espace de Fourier

$$\partial_t \hat{C}(k, t) = \frac{(-ik)^\alpha + (ik)^\alpha}{2} \hat{C}(k, t) = \cos \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha \hat{C}(k, t)$$

et elle a pour solution

$$\hat{C}(k, t) = e^{t \cos \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha} \hat{C}(k, 0)$$

En inversant la transformée de Fourier pour retourner à l'espace physique, on obtient

$$C(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} e^{t \cos \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha} dk = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} e^{t \cos \frac{\pi\alpha}{2} |k|^\alpha} \cos kx dk \quad (4.3)$$

On voit que l'équation (4.3) est la représentation intégrale d'une distribution α -stable de Lévy qui évolue dans le temps (Zolotarev, 1983 [74]). Cette solution peut s'écrire sous la forme suivante (Paradisi et al., 2001 [63])

$$C(x, t) = t^{-1/\alpha} p_\alpha(x t^{-1/\alpha}) \quad (4.4)$$

où $p_\alpha(\cdot, 0)$ est une distribution symétrique de Lévy d'indice α .

Solution en termes de fonction de Fox

On définit (Butzer et Westphal, 2000 [8]) la transformé de Mellin f_M d'une fonction $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{C}$ par

$$f_M(s) = M\{f(x)\}(s) = \int_0^{\infty} x^{s-1} f(x) dx$$

où $s = c + it$. La transformé de Mellin inverse est donnée par

$$M^{-1}\{f_M(s)\}(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-s} f_M(s) ds$$

A l'aide des transformées de Mellin, on obtient (Kiryakova et al. [33])

$$M\{p_\alpha(x, 0)\}(s) = \frac{\Gamma(s)\Gamma(\frac{1}{\alpha} - \frac{s}{\alpha})}{\alpha\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{s}{2})\Gamma(1 - \frac{1}{2} + \frac{s}{2})} \quad (4.5)$$

Et la transformée de Mellin inverse de (4.5) s'exprime par

$$p_\alpha(x, 0) = \frac{1}{\alpha} H_{2 \frac{1}{2}}^1 \left(x \middle| \begin{matrix} (1 - \frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}), & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ (0, 1), & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right) \quad (4.6)$$

où $H_{2 \frac{1}{2}}^1$ est une fonction Fox.

Pour α rationnel égal à $\frac{n}{d}$ avec n et d entiers on a donc

$$C(x, t) = \sqrt{2n}(2\pi)^{\alpha/n} (2\alpha)^{\frac{1}{\alpha}-1/2} G_{n+2d, 3n}^{2n, 2d} \left\{ \begin{matrix} (2d)^{2d} |x|^{2n} t^d \\ n^{2n} |x|^{2n} t^d \end{matrix} \middle| \begin{matrix} e_1, e_2 \\ f_1, f_2 \end{matrix} \right\} \quad (4.7)$$

Ici, G est la fonction de Meijer associée aux suites finies e_1, e_2, f_1, f_2 suivantes

$$e_1 = \left\{ 1 - \frac{1}{2n}, 1 - \frac{n+d}{2dn}, \dots, 1 - \frac{n(n-1)+d}{2dn} \right\}$$

$$e_2 = \left\{ \frac{1/2}{n}, \frac{1/2+1}{n}, \dots, \frac{1/2+n-1}{n} \right\}$$

$$f_1 = \left\{ 0, \frac{1}{2n}, \dots, \frac{2n-1}{2n} \right\}$$

$$f_2 = \left\{ 1 - \frac{1-1/2}{n}, 1 - \frac{2-1/2}{n}, \dots, 1 - \frac{n-1/2}{n} \right\}$$

Les fonctions G de Meijer sont disponibles dans certains logiciels comme *Mathematica*, permettant ainsi d'estimer les solutions de l'équation fractionnaire en espace.

4.3 Modèle CTRW avec mémoire, transport sous-diffusif et équation fractionnaire en temps

On a discuté au chapitre 3 le développement de Mainardi et al. (2000) [44] qui montre que l'équation de Montroll-Weiss peut s'écrire

$$\int_0^t \chi(t-t') \frac{\partial}{\partial t'} C(x, t') dt' = -C(x, t) + \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x-x') C(x', t) dx' \quad (4.8)$$

où $\chi(t-t')$ est la fonction mémoire.

Stanislavsky(2000)[73] établit et discute une classification des effets de mémoire à l'aide de la forme de cette fonction de la manière suivante.

- (i) **Systèmes sans mémoire ou markoviens :** Il s'agit de systèmes où la fonction mémoire est $\chi(t) \propto \delta(t)$ et sa transformée de Laplace est $\tilde{\chi}(s) = 1$. Comme discuté au chapitre 3, ces systèmes ont une distribution exponentielle des temps d'attente.
- (ii) **Systèmes avec mémoire idéale :** Dans ce cas, la fonction mémoire est une fonction échelon de la forme

$$\chi(t) = \begin{cases} 1, & t \geq t' \\ 0, & t < t' \end{cases} \quad \text{et donc } \tilde{\chi}(s) = \frac{1}{s}.$$
La fonction mémoire agit à chaque instant à partir de l'instant t' .
- (iii) **Systèmes avec mémoire intermédiaire ou incomplète :** Dans ce cas, la forme de la fonction mémoire se trouve entre la fonction δ et la fonction échelon. C'est ce cas qu'on analysera ci-après.

On considère des CTRW découplées, telles que la distribution des probabilités de transition (de densité ρ) ait une variance finie. La distribution des temps d'attente est complètement déterminée par la forme de la fonction $\chi(t)$. En effet, on rappelle que $\phi(\tau) = \int_{\tau}^{\infty} w(t') dt' = 1 - \int_0^{\tau} w(t') dt'$ avec $w(t) = -\frac{d\phi(t)}{dt}$ qui s'écrit dans le domaine de Laplace

$$\tilde{\chi}(s) = \frac{1 - \tilde{w}(s)}{s\tilde{w}(s)} = \frac{\tilde{\phi}(s)}{\tilde{w}(s)} = \frac{\tilde{\phi}(s)}{1 - s\tilde{\phi}(s)}$$

d'où $\tilde{w}(s) = \frac{1}{s\tilde{\chi}(s)+1}$.

Supposons, que la fonction mémoire soit une fonction puissance d'exposant $-\beta$, de la forme

$$\chi(t) = \frac{t^{-\beta}}{\Gamma(1-\beta)}, \quad t \geq 0 \quad \text{et } \beta \in (0, 1]$$

Dans ce cas, on a $\tilde{\phi}(s) = \frac{s^{\beta-1}}{1+s^{\beta}}$ et $\tilde{w}(s) = \frac{1}{1+s^{\beta}}$.

Après inversion on obtient

$$\phi(t) = E_{\beta}(-t^{\beta}) \quad \text{et } w(t) = -\frac{d}{dt} E_{\beta}(-t^{\beta})$$

où E_{β} est la fonction de Mittag-Leffler d'ordre β . Cette fonction est définie par

$$E_{\beta}(z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\beta n + 1)}, \quad \beta > 0, \quad z \in \mathbb{C}$$

En appliquant cette définition, on peut écrire

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{t^{\beta n}}{\Gamma(\beta n + 1)} \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(\beta\pi) \Gamma(\beta)}{\pi} \frac{1}{t^{\beta}} \\ w(t) &= \frac{1}{t^{1-\beta}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{t^{\beta n}}{\Gamma(\beta n + \beta)} \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(\beta\pi) \Gamma(\beta + 1)}{\pi} \frac{1}{t^{1+\beta}} \end{aligned}$$

Asymptotiquement la distribution des temps d'attente décroît comme une fonction puissance d'exposant $-1 - \beta$.

Un autre cas d'intérêt, est de supposer que $w(t)$ suit une distribution des probabilités β -stable d'index $\beta \in (0, 1]$ (Mainardi et al., 2000 [44]). Alors, on a

$$\tilde{w}(s) = e^{-s^\beta} \text{ et } \tilde{\phi}(s) = \frac{1 - \exp(-s^\beta)}{s}$$

Après inversion on obtient

$$w(t) = \frac{1}{t} W_{-\beta,0} \left(-\frac{1}{t^\beta} \right)$$

$$\phi(t) = 1 - W_{-\beta,1} \left(-\frac{1}{t^\beta} \right)$$

où $W_{-\beta,0}$ et $W_{-\beta,1}$ sont des fonction de Wright (F. Mainardi et al., 2000 [44]), définies par

$$W_{-\lambda,\mu}(z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n! \Gamma(\lambda n + \mu)}, \quad \lambda > -1, \quad \mu \in \mathbb{C}, \quad z \in \mathbb{C}$$

Dans ce cas, les limites asymptotique de $w(t)$ et de $\phi(t)$ sont

$$w(t) \underset{t \rightarrow 0}{\sim} A t^{-a} e^{-B t^{-b}}$$

$$\phi(t) \underset{t \rightarrow 0}{\sim} 1 - C t^c e^{-B t^{-b}}$$

avec

$$A = \left[\frac{\beta^{1/(1-\beta)}}{2\pi(1-\beta)} \right]^{1/2} \quad B = (1-\beta)\beta^b$$

$$a = \frac{2-\beta}{2(1-\beta)} \quad b = \frac{\beta}{1-\beta}$$

$$C = \left[\frac{1}{2\pi(1-\beta)\beta^{1/(1-\beta)}} \right]^{1/2} \quad c = \frac{b}{2} = \frac{\beta}{2(1-\beta)}$$

Notons que les deux exemples de la fonction $\phi(t)$ analysés ci-dessus présentent le même comportement asymptotique, quand $t \rightarrow \infty$, mais différent qualitativement quand $t \rightarrow 0$.

D'une façon générale, R. Metzler et J. Klafter [51] (2000) ont montré que si la distribution des probabilités de transition a une variance finie et si la distribution de probabilité des temps d'attente a un moment d'ordre un divergent avec $w(t) \sim A_\beta (\tau/t)^{1+\beta}$, $\beta \in (0, 1]$, alors la limite macroscopique de la CTRW correspond à une équation d'évolution impliquant une dérivée temporelle fractionnaire qui s'exprime par

$$\partial_t C(x, t) = {}_0 D_t^{1-\beta} \lambda_\beta \nabla_x^2 C(x, t) \quad (4.9)$$

où ${}_0D_t^{1-\beta}$ est la dérivée fractionnaire de Riemann-Liouville. L'équation (4.9) peut aussi s'écrire comme suit

$${}_0D_t^\beta C(x, t) - \frac{t^{-\beta}}{\Gamma(1-\beta)} C(x, 0) = \lambda_\beta \nabla_x^2 C(x, t) \quad (4.10)$$

où l'on reconnaît dans le terme de gauche l'opérateur fractionnaire de Caputo ${}_0D_t^\beta$ défini au chapitre 3.

Ici on a $\lambda_\beta = l^2/\tau^\beta$, où l^2 est la variance de la distribution des probabilités de transition.

Solution analytique de l'équation fractionnaire en temps

La solution analytique de l'équation (4.9) peut s'obtenir dans l'espace de Laplace-Fourier ($x \div p, t \div s$) pour une condition initiale de Dirac : $C(x, 0) = \delta(x)$, dont la transformée de Fourier est $F\{\delta\}(p) = 1$. En inversant la transformée de Fourier, on obtient une fonction de Bessel K [32].

$$\tilde{C}(p, s) = \frac{1}{s^{1-\beta}} \frac{1}{s^\beta + p^2} \div \tilde{C}(x, s) = \left(\frac{x}{2\pi s^{(4-3\beta)/2}} \right)^{1/2} K_{-1/2}(|x|s^{\beta/2}) \quad (4.11)$$

En utilisant la propriété suivante de la transformée de Mellin :

$$M\{f(t)\} = \frac{M\{L\{f(t)\}(u)\}(1-q)}{\Gamma(1-q)}$$

où $Mf(t)(q) \div f(t)$ et $Lf(t)(u) \div f(t)$, on a pour l'équation (4.11)

$$M\{C(x, t)\}(q) = \frac{\sqrt{2}|x|}{\beta} \left(\frac{2}{|x|} \right)^{-\frac{2q}{\beta}} \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{q}{\beta})\Gamma(1 - \frac{q}{\beta})}{\Gamma(1-q)}$$

L'inversion de la transformation de Mellin nous donne une fonction de Fox, qui représente un solution dans l'espace physique (x, t) de la forme de

$$C(x, t) = \frac{\sqrt{2}}{|x|\beta} H_{3,2}^{1,2} \left(\left[\frac{2}{|x|} \right]^{\frac{2}{\beta}} t \mid \begin{matrix} (1, \frac{1}{\beta})(0, \frac{1}{\beta})(0, 1) \\ (0, 1)(0, 1) \end{matrix} \right)$$

Pour utiliser cette solution, il est commode de la transformer en fonction hypergéométrique ou fonction G de Meijer suivante

$$C(x, t) = \frac{\sqrt{2dn}}{\beta|x|} (2\pi)^{0.5(d-2n)} G_{2n,d}^{0,2n} \left\{ \frac{n^{2n}}{d^d} \left(\frac{2}{|x|} \right)^{2n} t^d \mid \begin{matrix} e_1, e_2 \\ f_1 \end{matrix} \right\} \quad (4.12)$$

Ici $\beta = \frac{d}{n}$ avec d et n entiers. Les suites e_1, e_2, f_1 sont définies par

$$e_1 = \left\{ 1 - \frac{1}{2n}, 1 - \frac{3}{2n}, \dots, \frac{1}{2n} \right\}, e_2 = \left\{ 1 - \frac{1}{n}, 1 - \frac{2}{n}, \dots, 0 \right\}$$

$$f_1 = \left\{ 1 - \frac{1}{d}, 1 - \frac{2}{d}, \dots, 0 \right\}.$$

4.4 Super-diffusion et mémoire

La limite macroscopique pour une CTRW découplée, avec mémoire et accordant de l'importance à des évènements extrêmes a été étudiée par R. Gorenflo et F. Mainardi, 2002 [23], E. Scalas et al., 2004 [70].

Ces articles généralisent et unifient les résultats des deux paragraphes précédents. Ils concernent des CTRW avec une densité de probabilité des temps d'attente $w(t)$ de la forme $w(t) = \frac{1}{\tau} E'_\beta \left(-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta \right)$ avec $\beta \in (0, 1]$. Ici $E'_\beta \left(-T^\beta \right)$ représente la dérivée de la fonction $E_\beta \left(-T^\beta \right)$, et le paramètre τ a la dimension d'un temps.

La densité de probabilité des longueurs des sauts est de la forme $\frac{1}{l} \rho \left(\frac{x}{l} \right)$ où le paramètre l a la dimension d'une longueur, et ρ est une fonction paire avec le comportement asymptotique $\rho(x) = (h + \epsilon|x|)|x|^{-\alpha-1}$ à l'infini avec $\alpha \in (0, 2]$.

Ici ϵ désigne une fonction tendant vers zéro lorsque son argument tend vers l'infini. Ce comportement implique que la fonction caractéristique $\hat{\rho}(k)$ se comporte selon $\hat{\rho}(k) = 1 - c|lk|^\alpha + o(l^\alpha)$, où c est une constante lorsque l tend vers zéro. On en déduit que pour chaque $(k, u) \in R^* \times R^{+*}$ la transformée de Laplace-Fourier $\hat{C}(k, u)$ de la concentration en particules est de la forme

$$\frac{\tau^\beta u^{\beta-1}}{\tau^\beta u^\beta + c'l^\alpha |k|^\alpha}$$

lorsque τ et l sont petits. Cette expression s'écrit

$$\frac{u^{\beta-1}}{u^\beta + \lambda_{\alpha,\beta} |k|^\alpha}$$

lorsque τ et l sont liés par

$$\lambda_{\alpha,\beta} = c' \frac{l^\alpha}{\tau^\beta} \quad (4.13)$$

Cette fraction n'est autre que la fonction de Green (ou réponse impulsionnelle) de

$${}_0\mathcal{D}_t^\beta C(x, t) = \lambda_{\alpha,\beta} \nabla_x^\alpha C(x, t) \quad (4.14)$$

Cette équation régit l'évolution de la concentration en particules lorsque, x et t étant fixés, les paramètres l et τ tendent vers zéro en vérifiant (4.13). Ceci signifie que l'équation (4.14) rend compte de cette évolution à des échelles de temps et de longueur grandes devant l et τ .

Adopter ce point de vue revient à prendre la "limite diffusive" de CTRW découplées, symétriques, markoviennes ou non-markoviennes associées à une fonction mémoire de type Mittag-Leffler, pourvu que la distribution des temps d'attente se comporte asymptotiquement comme une puissance d'exposant $-1 - \alpha$. Ce résultat ne s'applique pas directement à des situations mettant en jeu un écoulement moyen.

4.5 Les modèles fractionnaires avec advection en milieu infini

A. Compte [10](1997), A. Compte et M.O. Caceres [11](1998) et R. Metzler et J. Klafter [51](2000), M.M. Meerschaert [48](2000) ont, notamment, analysé le cas du transport anormal dans des fluides en mouvement. A. Compte [10](1997) a étudié des CTRW pour des champs de vitesse hétérogènes dans des régimes laminaires.

On présente ici le cas du transport d'un traceur dans un champ de vitesse uniforme.

L'advection modifie la distribution de probabilités de transition, et deux points de vue ont été développés dans la littérature. Dans le cas d'un traceur dissous dans un fluide libre, la particule de traceur est entraînée par le fluide tout le temps. Dans un milieu poreux, les particules piégées dans certains pores peuvent être moins sensibles à la dérive générale du fluide. Dans ce cas, l'advection peut être plus ou moins restreinte aux sauts. On est ainsi conduit à distinguer deux situations bien différentes, puisque la seconde n'est pas invariante par le groupe de Galilée (R.Metzler et al., 1998 [53]).

Cas 1 : Advection tout le temps (Metzler et al, 1998 [53])

La probabilité que la particule réalise une transition de (x', t') à (x, t) devient

$$\psi_{adv}(x - x', t - t') = T_{v(t-t')} \psi(x - x', t - t') = \psi(x - v(t - t') - x', t - t')$$

L'opérateur $T_{v(t-t')}$ est un opérateur de translation galiléen, et ψ_{adv} et ψ sont, respectivement, les distributions de probabilités dans le système de coordonnées du laboratoire et dans un système qui se déplace à la vitesse du fluide. Donc, on a $\psi_{adv}(x, t) = \psi(x - vt, t)$ dans l'espace physique, et $\tilde{\psi}_{adv}(k, u) = \tilde{\psi}(k, u + ivk)$ dans l'espace de Fourier-Laplace. Ici, k et u sont couplés par la vitesse v .

Considérons une CTRW découplée avec une distribution des temps d'attente exponentielle et une distribution des probabilités de transition de la forme $\rho(x) = \frac{1}{l} p_\alpha(\frac{x}{l}, 0)$ où p_α est une loi α -stable de Lévy. L'équation de Montroll-Weiss s'écrit en variables de Laplace-Fourier

$$\tilde{C}(k, u) = \frac{1 - \hat{\rho}(0)\tilde{w}(u - ivk)}{(u - ivk)(1 - \hat{\rho}(k)\tilde{w}(u - ivk))}$$

dans la limite où $(l, \tau) \rightarrow 0$ cette expression se comporte comme

$$\tilde{C}(k, u) = \frac{1}{u + ivk + \lambda_\alpha |k|^\alpha},$$

qui est, en variables de Fourier-Laplace, la fonction de Green de

$$(\partial_t + v\partial_x - \frac{l^\alpha}{\tau} \nabla_x^\alpha) C(x, t) = 0$$

Donc si $\frac{t^\alpha}{\tau} = \lambda_\alpha$, la concentration $C(x, t)$ évolue selon

$$\partial_t C(x, t) + v \partial_x C(x, t) = \lambda_\alpha \nabla_x^\alpha C(x, t) \quad (4.15)$$

où ∇_x^α est l'opérateur de Riesz-Feller.

Dans le cas d'une distribution des temps d'attente possédant un moment d'ordre un infini et une distribution des longueurs des sauts avec une variance finie, R.Metzler et al. [51] ont montré que l'équation d'évolution macroscopique est de la forme

$$D_t^\beta C(x, t) - \frac{t^{-\beta} \delta(x)}{\Gamma(1-\beta)} + v {}_0 I_t^{1-\beta} \partial_x C(x, t) = \lambda \partial_x^2 C(x, t) \quad (4.16)$$

avec la condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$ incorporée dans l'opérateur de Caputo. On observe que le terme d'advection (avec v en facteur) est modifié.

Cas 2 : Advection limitée aux sauts (Compte, 1997 [10])

Imaginer des scénarios pour la dispersion à petite échelle dans les milieux poreux devient aussi complexe (sinon plus) que dans un fluide turbulent sans matrice solide, par exemple.

Une méthode pour tenir compte de cette complexité consiste admettre que, en présence d'une vitesse d'ensemble du fluide, les particules ne sont pas constamment advectées. Ceci revient à supposer qu'elles sont plus ou moins piégées dans certaines régions de milieu poreux entre les mouvements très rapides représentés par les sauts. Ceci pose quelques problèmes. Tout d'abord, le modèle de mouvements quasi-instantannés conduirait à ne pas tenir compte du tout de la vitesse d'advection si on devait imposer aux particules dissoutes de ressentir cet effet uniquement pendant les sauts. On est ainsi conduit à préciser une durée pour l'advection. On pourrait introduire pour cela un processus aléatoire, ou tenir compte au contraire de la durée des sauts. Ces deux voies doivent être explorées dans un travail futur. Une méthode plus expéditive revient à fixer la distance que l'écoulement moyen fait parcourir aux particules chaque fois qu'elles effectuent un saut. Ceci équivaut à tenir compte de cet effet pendant le temps moyen d'advection τ_a (A. Compte, 1997 [9]). On suppose donc que ce temps moyen existe et on le compare au temps moyen d'attente qui doit être supérieur à τ_a . Il semble difficile d'accepter ce schéma simpliste lorsque le temps moyen d'attente diverge et donc on restreint cette approche au cas d'une moyenne finie.

L'équation maitresse s'écrit alors

$$C(x, t) = \delta(x) \int_t^{+\infty} w(t') + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^t C(x', t') \rho(x - x' - \tau_a v) w(t - t') dt' dx'$$

Dans l'espace des variables de Laplace-Fourier ceci s'écrit

$$\hat{C}(k, u) = \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u(1 - e^{ik\tau_a v} \tilde{w}(u) \hat{\rho}(k))} \quad (4.17)$$

Pour k et u fixés, lorsque τ_a , τ et l sont petits et avec $\frac{\tau_a}{\tau} = \xi$ et $\frac{l^\alpha}{\tau} = \lambda_\alpha$, on reconnaît la fonction de Green $\frac{1}{u - iv\xi k + \lambda_\alpha |k|^\alpha}$ de l'équation

$$(\partial_t + v\xi \partial_x)C(x, t) = \lambda_\alpha \nabla_x^\alpha C(x, t) \quad (4.18)$$

Avec $\xi = 1$ c'est à dire $\tau_a = \tau$ on retrouve (4.15).

4.6 Conclusion

Plusieurs classes de CTRW découplées généralisant le mouvement brownien peuvent être obtenues à partir de distribution des temps d'attente avec ou sans moyenne finie, et de longueurs de sauts avec ou sans variance finie. Compte tenu de la généralisation du théorème de la limite centrale énoncée au paragraphe 3.2.2, on peut les classer d'après le comportement asymptotique des densités de ces deux VA.

Dans un milieu infini, en l'absence d'advection la densité de particules effectuant de telles CTRW vérifie une équation aux dérivées partielles qui généralise l'équation CDE en incluant des dérivées fractionnaires. En gros, un temps d'attente avec moyenne infinie donne une dérivée temporelle d'ordre fractionnaire, et une longueur des sauts avec une variance infinie donne une dérivée spatiale d'ordre fractionnaire. De plus la dérivée spatiale est une dérivée de Riesz-Feller, combinant des dérivées à gauche et à droite. A partir d'une longueur des sauts avec une distribution symétrique, elle est symétrique. Cependant, les résultats de ce chapitre s'étendent à des distribution non symétriques de la longueur des sauts. Alors, on obtient une dérivée de Riesz-Feller dissymétrique.

On arrive à des résultats analogues lorsque la CTRW découplée représente les mouvements relatifs à un référentiel mobile à la vitesse v .

Lorsque le temps d'attente a une moyenne finie, le transport est régi, au niveau macroscopique par une équation FDE comportant une dérivée de Riesz-Feller et un terme d'advection avec une dérivée première. Cependant, lorsque le temps d'attente moyen est infini alors que la longueur des sauts a une variance finie, le terme d'advection est modifié. Le modèle macroscopique se complique encore lorsque le temps d'attente moyen et la variance de la longueur des sauts sont tous deux infinis.

Nous souhaitons étudier plus particulièrement l'influence de conditions aux limites sur le transport de matière. D'autre part, des difficultés sont rencontrées même en

l'absence d'advection lorsque seule la variance de la longueur des sauts est infinie. Pour ces raisons nous laissons de côté les situations combinant advection et temps moyen d'attente infini.

Chapitre 5

Équation fractionnaire en espace avec condition aux limites : le cas d'un mur élastique

5.1 Introduction

On a vu que lorsque des particules effectuent une CTRW satisfaisant certains critères, leur concentration évolue selon une équation qui peut contenir des dérivées fractionnaires. Nous savons même quelle classe de modèles macroscopiques correspond à certaines catégories (assez vastes) de CTRW. Il est cependant difficile de savoir directement quelle CTRW décrit correctement le mouvement à petite échelle d'un soluté dans un milieu donné. Rien ne prouve d'ailleurs qu'il existe pour chaque cas un processus comme ceux qui ont été étudiés au chapitre 4.

L'évolution de la concentration de soluté, par contre, peut être étudiée expérimentalement. On peut donc espérer pouvoir dire si un modèle macroscopique décrit ou non le transport dans un milieu donné. Cette démarche a été effectuée dans certains aquifères, et aussi en laboratoire. Mais l'interprétation des résultats ainsi obtenus n'est pas univoque et d'autres expériences devront être réalisées. Or, le travail en laboratoire introduit souvent des conditions aux limites qu'on ne peut pas toujours rejeter à l'infini.

Passer à un domaine borné peut poser des problèmes pour un phénomène décrit par une équation aux dérivées partielles comportant des termes non-locaux. Nous allons voir que cette question peut être réglée plus ou moins facilement selon la nature des frontières. Mais on doit être a priori prudent lorsqu'on soupçonne la dynamique à petite échelle d'être dépourvue de longueur caractéristique bien définie. Pour des déplacements dont la longueur possède une variance finie, et lorsque ce paramètre tend

vers zéro, toute donnée aux limites localisée finit par être suffisamment loin pour avoir peu d'influence sur l'évolution de la concentration en un point précis du domaine. Mais nous prétendons justement étudier des phénomènes pour lesquels cette variance diverge. Au niveau macroscopique, ils sont représentés par des équation contenant des dérivées fractionnaires en espace.

Pour ces dérivées, la littérature disponible concerne principalement des conditions aux limites absorbantes. Après les avoir évoquées, nous étudierons des conditions de type "flux nul", couplées à une équation d'advection-diffusion fractionnaire en espace. Nous verrons qu'elles obligent à modifier le noyau de l'opérateur non-local.

5.2 Conditions aux limites absorbantes

Soient des particules effectuant une CTRW dont le résultat est la somme d'un grand nombre de variables indépendantes distribuées selon une loi α -stable de Lévy. On s'intéresse à l'évolution de la densité des particules. Imposer à celle-ci de s'annuler pour $x < 0$ (par exemple) revient à exclure de la CTRW toute particule pénétrant dans ce domaine. Ceci équivaut à annuler tout simplement sa contribution à une équation maîtresse (généralisée) régissant l'évolution de la concentration. Donc des conditions aux limites absorbantes en $x = 0$ reviennent à remplacer par 0 la borne inférieure ($-\infty$) de l'intégrale définissant la dérivée de Riesz-Feller (G. Zumofen et J. Klafter, 1995 [75]).

Dans ces conditions, la masse totale des particules diminue constamment, donc l'intégrale de la concentration est une fonction décroissante du temps. Bien sûr, avec en $x = 0$ un mur infranchissable, cette intégrale devra être constante.

Nous proposons d'étudier l'influence d'un mur réfléchissant les particules. Plus précisément, on présente un modèle de CTRW pour simuler le transport super-diffusif d'un traceur dans un milieu poreux hétérogène qui présente un mur élastique en $x = 0$. On analysera le cas où le fluide est au repos et le cas où le fluide se déplace avec une vitesse moyenne constante. La condition aux limites imposée conduit à une modification de l'équation fractionnaire en espace obtenue pour un milieu infini qui a été présentée au paragraphe (4.2). C'est la non localité des opérateurs fractionnaires qui est à l'origine de l'impossibilité de découpler les conditions aux limites de l'équation elle-même.

5.3 Le cas d'un fluide immobile

Nous nous intéressons principalement à une CTRW découplée avec une distribution de probabilités de transition qui suit une loi α -stable de Lévy avec $1 < \alpha < 2$ ou plus généralement dont la densité se comporte asymptotiquement comme une puissance d'exposant $-\alpha - 1$. Quant à la distribution de probabilités des temps d'attente, nous supposons qu'elle possède une moyenne finie.

Cependant, en l'absence d'advection, le cas plus général où cette distribution est "du type de Mittag-Leffler" d'ordre $\beta \in (0, 1]$, comme au paragraphe (4.4), n'est pas plus difficile à traiter. Nous nous plaçons donc dans ce cadre, pour ce paragraphe.

On considère la condition initiale $C(x, 0) = \delta(x - x_0)$ avec $x_0 > 0$ et un mur élastique placé en $x = 0$. Les particules sont contraintes de se déplacer dans le demi-espace $x > 0$, et la probabilité de transition n'est pas invariante par translation.

Une particule qui se trouve à la position x' à l'instant t' peut sauter jusqu'à la position x directement ou après avoir été réfléchi par le mur. Si $\Lambda(x, x')$ est la densité de probabilité de passer à x sachant que la particule est en x' , on suppose que

$$\Lambda(x, x') = \rho_d(x, x') + \rho_r(x, x')$$

où $\rho_d(x, x')$ est la probabilité de transition directe et $\rho_r(x, x')$ la probabilité de transition après réflexion par le mur. Si nous supposons que, en l'absence du mur, le moteur de la marche au hasard est invariant par translation, il correspond à une probabilité de transition $\rho(|x - x'|)$ et on a $\rho_d(x, x') = \rho(x - x')$.

On peut imaginer plusieurs scénarios pour représenter un mur infranchissable. Parmi eux figure celui pour lequel $\rho_r(x, x') = \rho(-x - x')$. Nous parlons alors de réflexion sur un mur élastique. En effet, l'expression ci-dessus pour ρ_r serait obtenue par un raisonnement mécanique si les sauts représentaient les projections sur un axe de mouvements de chute libre dans un champ de force uniforme avec une impulsion initiale proportionnelle à une VA distribuée selon ρ . L'annexe A développe ce point.

Parler de "mur réfléchissant" ou "élastique" revient donc à faire l'hypothèse que la distribution des sauts indirects est telle que

$$\rho_d(x - x') = \rho_r(-x - x')$$

donc alors la probabilité de transition s'exprime par la somme $\rho_d(x - x') + \rho_r(-x - x')$.

La probabilité $C(x, t)$ de trouver particule en $x > 0$ à l'instant t satisfait alors l'équation

$$C(x, t) = \delta_{x_0}(x) \left(1 - \int_0^t w(t') dt'\right) +$$

$$+ \int_{x'=0}^{+\infty} \int_{t'=0}^t C(x', t') [\rho(x - x') + \rho(-x - x')] w(t - t') dt' dx'$$

L'intégrale double fait intervenir une convolution se traduisant par le produit des transformées de Laplace, ainsi qu'une intégrale sur $(0, +\infty]$. En milieu infini, à la place de cette dernière on aurait une convolution se traduisant encore par un produit pour les transformées de Fourier. Ici, il est possible de voir une convolution de ce type à condition de prolonger la fonction $C(x, t)$.

Puisque ρ est pair (par rapport à x), le prolongement C^* de C par parité (défini par $C^*(x, t) = C(x, t)$ pour $x > 0$ et $C^*(x, t) = C(-x, t)$ pour $x < 0$) satisfait

$$C^*(x, t) = \int_R \int_{t'=0}^t C(x', t') \rho(x - x') w(t - t') dt' dx' + (\delta_{x_0}(x) + \delta_{-x_0}(x)) \int_t^{+\infty} w(t') dt'$$

pour $x \in R$. Selon [9], la transformée de Fourier-Laplace \tilde{C}^* satisfait

$$\tilde{C}^*(k, u) = \tilde{C}^*(k, u) \hat{\rho}(k) \tilde{w}(u) + \frac{1 - \hat{\rho}(0) \tilde{w}(u)}{u} (e^{ikx_0} + e^{-ikx_0})$$

On en déduit que

$$\hat{C}^*(k, u) = 2 \frac{\tau^\beta u^{\beta-1} \cos(kx_0)}{1 + (\tau u)^\beta - e^{-|k|^\alpha}}$$

si la distribution de la longueur des sauts suit une loi de Lévy. Plus généralement, on a

$$\tilde{C}^*(k, u) = 2 \frac{\tau u^{\beta-1} \cos(kx_0)}{1 + (\tau u)^\beta - (1 - c|lk|^\alpha + o(l^\alpha))}$$

si ρ est de la forme

$$\rho(x) = \frac{1}{l} \left(b + \epsilon \left| \frac{x}{l} \right| \right) \left| \frac{x}{l} \right|^{-\alpha-1}$$

où la fonction ϵ tend vers zéro à l'infini. En effet, dans ce cas la transformée de Fourier de ρ vérifie

$$\hat{\rho}(k) = 1 - c|lk|^\alpha + o(l^\alpha)$$

où $o(l^\alpha)l^{-\alpha} \rightarrow 0$ quand $l \rightarrow 0$, avec $c = \frac{b\pi}{\Gamma(\alpha+1)\sin(\alpha\pi/2)}$ en vertu du lemme 1 de (R.Gorenflo et F.Mainardi, 2002 [23], [22])

Pour (k, u) fixées différent de $(0, 0)$, et avec les conditions suivantes

$$\begin{cases} l \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0 \\ l^\alpha / \tau^\beta = \lambda_{\alpha, \beta} \end{cases} \quad (5.1)$$

$\tilde{C}^*(k, u)$ tend vers une limite. Puisque pour chaque (4.1) $C^*(x, t)$ est positive et a une intégrale constante, elle a aussi une limite qui possède à son tour ces propriétés. Nous appelons $C^*(x, t)$ cette limite.

Par ailleurs, la transformée de Fourier-Laplace de la dérivée de Caputo ${}_0\mathcal{D}_t^\beta C^*(x, t)$ d'ordre β par rapport au temps est

$$u^\beta \tilde{C}^*(k, u) - 2u^{\beta-1} \cos kx_0$$

Elle est égale à

$$-2u^{\beta-1} \cos kx_0 + \lambda_{\alpha, \beta} \frac{|k|^\alpha}{u^\beta + \lambda_{\alpha, \beta} |k|^\alpha} \quad (5.2)$$

or on a

$$2 \cos kx_0 = \tilde{C}^*(k, u) \frac{u^\beta + \lambda_{\alpha, \beta} |k|^\alpha}{u^{\beta-1}}$$

On en déduit que pour x, t fixés avec $x > 0$ et $\alpha < 2$ la concentration des particules $C(x, t)$ satisfait

$${}_0\mathcal{D}_t^\beta C(x, t) = \frac{-\lambda_{\alpha, \beta}}{2 \cos \frac{\alpha\pi}{2} \Gamma(2 - \alpha)} \partial_x^2 \int_0^{+\infty} (|x - y|^{1-\alpha} + (x + y)^{1-\alpha}) C(y, t) dy \quad (5.3)$$

lorsque l et τ tendent vers zéro en vérifiant (5.1).

Alors, le noyau de la dérivée de Riesz-Feller d'ordre $\alpha \neq 2$ a changé à cause de la condition de frontière élastique en $x = 0$. Pour $\alpha = 2$, le second membre de (5.2) est la transformée de Fourier-Laplace de $\lambda \partial_{x^2}^2 C^*(x, t)$, qui est un opérateur local. Donc dans la limite ci-dessus $C(x, t)$ vérifie

$$\partial_t C(x, t) = \lambda \partial_{x^2}^2 C(x, t)$$

On obtient un résultat peu différent lorsque la CTRW représente le mouvement de particules par rapport à un référentiel mobile à la vitesse v constante.

5.4 Le cas du fluide en mouvement ($v = \text{constante}$)

Dans ce cas l'équation maîtresse devient

$$C(x, t) = \int_R \int_{t'=0}^t C(x', t') T_{v(t-t')} \Lambda(x, x') w(t-t') dt' dx' + \delta_{x_0+vt}(x) \int_t^{+\infty} w(t') dt'$$

où $\Lambda(x, x')$ représente la densité de probabilité de transition vers x sachant que la particule est en x' .

Dans un milieu semi-infini avec un mur élastique en $x = 0$, la particule ne peut pas être en $x > 0$ à l'instant t après avoir sauté à l'instant t' si $x - v(t - t')$ est négatif. De plus, pour être en x à l'instant t elle doit soit y être depuis le début, soit avoir sauté pour la dernière fois à l'instant t' de x' vers $x - v(t - t')$. Donc, pour $x > 0$ l'équation maîtresse s'écrit

$$C(x, t) = \delta_{x_0+vt}(x) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \int_{x'>0} \int_{t'=0}^t C(x', t') H(x - v(t - t')) T_{v(t-t')} \Lambda(x, x') w(t - t') dt' dx' \quad (5.4)$$

avec $\Lambda(x, x') = \rho(x - x') + \rho(-x - x')$, et H est la fonction échelon d'Heaviside.

En se rappelant que ρ est une fonction paire, et en utilisant le prolongement par parité C^* , nous montrons à l'annexe B que (5.4) équivaut à

$$C^*(x, t) = (\delta_{x_0+vt}(x) + \delta_{-x_0-vt}(x)) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \int_{t'=0}^t w(t - t') [T_{v(t-t')} (H[C^* *_F \rho]) + T_{-v(t-t')} ((1 - H)[C^* *_F \rho])](x, t') dt' \quad (5.5)$$

où T_a représente la translation définie par $(T_a f)(x) = f(x - a)$. Cette équation s'écrit aussi

$$C^*(x, t) = (\delta_{x_0+vt}(x) + \delta_{-x_0-vt}(x)) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \int_{t'=0}^t w(t - t') \int_R H(x - v(t - t')) C^*(x', t') \rho(x - v(t - t') - x') dx' dt' + \int_{t'=0}^t w(t - t') \int_R (1 - H)(x - v(t - t')) C^*(x', t') \rho(x - v(t - t') - x') dx' dt'.$$

Dans (5.5) il y a deux convolutions. En passant aux variables de Fourier (k) et Laplace u , nous allons voir que (5.5) équivaut à une équation aux dérivées partielles non locale pour $C^*(x, t)$, qui peut être considérée comme étant (5.3) avec un terme advectif, mais seulement avec $\beta = 1$, à la limite macroscopique.

Dans l'espace de Fourier-Laplace

Puisque la transformée de Laplace de $\int_t^{+\infty} w(t')dt'$ est $u^{-1}(1 - \tilde{w}(u))$, notons

$$2A(k, u) \equiv \frac{1 - \tilde{w}(u - ivk)}{u - ivk} + \frac{1 - \tilde{w}(u + ivk)}{u + ivk} = \frac{2\tau(1 + \tau u)}{(1 + \tau u)^2 + \tau^2 k^2 v^2}$$

et

$$2iB(k, u) \equiv \frac{1 - \tilde{w}(u - ivk)}{u - ivk} - \frac{1 - \tilde{w}(u + ivk)}{u + ivk} = \frac{2i\tau^2 kv}{(1 + \tau u)^2 + \tau^2 k^2 v^2}$$

La transformée de Fourier-Laplace du premier terme au second membre de (5.5) est $2A \cos kx_0 - 2B \sin kx_0$.

Posons aussi

$$G(k, u) \equiv \hat{\rho}(k)[\tilde{w}(u + ivk) - \tilde{w}(u - ivk)] = \frac{-2ik\tau v e^{-|lk|^\alpha}}{(1 + \tau u)^2 + \tau^2 k^2 v^2}$$

et

$$\begin{aligned} D(k, u) \equiv 1 - D'(k, u) &\equiv 1 - \frac{\hat{\rho}(k)[\tilde{w}(u + ivk) + \tilde{w}(u - ivk)]}{2} \\ &= \frac{\tau u + |lk|^\alpha + \tau^2 u^2 + \tau^2 k^2 v^2 + \tau u |lk|^\alpha + O(|lk|^{2\alpha})}{(1 + \tau u)^2 + \tau^2 k^2 v^2}, \end{aligned}$$

afin d'expliciter la transformée de Laplace-Fourier du second terme au second membre de (5.5). En effet, cette dernière n'est autre que

$$\tilde{w}(u + ivk) \times \hat{H} *_F (\widehat{\tilde{C}}^* \times \hat{\rho})(k, u) + \tilde{w}(u - ivk) \times (1 - \widehat{H}) *_F (\widehat{\tilde{C}}^* \times \hat{\rho})(k, u).$$

Comme la transformée de Fourier de la fonction H est $\delta/2 - 1/(ik)$, le second terme au second membre de (5.5) s'écrit $D' \tilde{C}^*(k, u) + G[\tilde{C}^* *_F \frac{1}{ik}](k, u)$, où le symbole $*_F$ représente une convolution de Fourier.

Avec ces notations, dans l'espace de Fourier-Laplace, on a

$$D \tilde{C}^*(k, u) = 2A \cos kx_0 - 2B \sin kx_0 + G[\tilde{C}^* *_F \frac{1}{ik}](k, u) \quad (5.6)$$

qui entraîne

$$2 \cos kx_0 = \frac{D}{A} \tilde{C}^*(k, u) + 2 \frac{B}{A} \sin kx_0 - \frac{G}{A} [(\hat{\rho} \tilde{P}^*) *_F \frac{1}{ik}](k, u). \quad (5.7)$$

Ceci implique que la transformée de Fourier-Laplace $u\tilde{C}^*(k, u) - 2 \cos kx_0$ de $\partial_t C^*$ satisfait

$$\partial_t \tilde{C}^*(k, u) = \frac{Au - D}{A} \tilde{C}^*(k, u) - \frac{2B \sin kx_0}{A} + \frac{G}{A} [\tilde{C}^* *_{\mathcal{F}} \frac{1}{ik}] \quad (5.8)$$

La limite macroscopique pour $C(x, t)$

Si on considère la limite

$$\begin{cases} l \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0 \\ l^\alpha / \tau = \lambda_\alpha \end{cases} \quad (5.9)$$

qui n'est que autre que (5.1) avec $\beta = 1$, les coefficients de $\tilde{C}^*(k, u)$ dans (5.8) tendent vers $-\lambda|k|^\alpha$ (voir l'annexe C), qui est la dérivée de Riesz-Feller d'ordre α , et le terme avec $\tilde{C}^* *_{\mathcal{F}} \frac{1}{ik}$ donne (dans l'espace physique) :

$$-v \text{sign}(x) \partial_x C^*(x, t) - 2v C^*(0, t) \delta(x) = -v \partial_x (\text{sign}(x) C^*)(x, t)$$

On en déduit que

$$\partial_t C^*(x, t) + v \text{sign}(x) \partial_x C^*(x, t) - \lambda_\alpha D^\alpha C^*(y, t)$$

tend vers 0 en même temps que l , si (l, τ) satisfait (5.9). Donc pour $x > 0$ C satisfait $\partial_t C(x, t) + v \partial_x C(x, t) =$

$$= \frac{-\lambda_\alpha}{2 \cos \frac{\alpha\pi}{2} \Gamma(2 - \alpha)} \partial_x^2 \int_{y=0}^{+\infty} (|x - y|^{1-\alpha} + (x + y)^{1-\alpha}) C(y, t) dy \quad (5.10)$$

si $\alpha < 2$. Si $\alpha = 2$, la dérivée ∇_x^α , dont le symbole est $-|k|^2$, est ∂_x^2 et on obtient l'équation classique de la diffusion avec advection.

On arrive à un résultat similaire en supposant, comme au paragraphe 4.5 (cas 2) que les particules de soluté sont sensibles à l'écoulement moyen lorsqu'elles effectuent les sauts, mais pas tout le temps.

5.5 Advection restreinte à des intervalles de temps incluant les sauts

Supposons, comme au paragraphe 4.5 (cas 2) que, à cause de la matrice solide, les particules du fluide soient exclues de l'écoulement moyen de vitesse v sauf pendant des

durées de moyenne τ_a incluant les sauts. Mais à part ceci, nous ne modifions pas les hypothèses formulées au paragraphe 5.4 pour la statistique régissant les mouvements à petite échelle et la condition à la limite imposée en $x = 0$. Alors, l'équation maîtresse s'écrit

$$C(x, t) = \delta(x - x_0) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \\ + \int_0^t H(x - v\tau_a) \int_0^{+\infty} C(x', t') (\rho(x - x' - \tau_a v) + \rho(-x - x' - \tau_a v)) w(t - t') dt' dx'$$

pour $x > 0$. On en déduit

$$C(x, t) = \delta(x - x_0) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \\ + \int_0^t H(x - v\tau_a) \int_{-\infty}^{+\infty} C^*(y, t') w(t - t') \rho(x - v\tau_a - y) dy dt' \\ = \delta(x - x_0) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \int_0^t w(t - t') T_{v\tau_a} (H \times [C^*(., t') *_F \rho(.)])(x) dt'$$

pour $x > 0$.

Donc, comme l'image par symétrie de $T_{v\tau_a} (H \times [C^*(., t') *_F \rho(.)])(x)$ est $T_{-v\tau_a} ((1 - H) \times [C^*(., t') *_F \rho(.)])(x)$, pour tout x on a

$$C^*(x, t) = (\delta(x - x_0) + \delta(x + x_0)) \int_t^{+\infty} w(t') dt' + \\ \int_0^t w(t - t') T_{v\tau_a} (H \times [C^*(., t') *_F \rho(.)])(x) dt' \\ + \int_0^t w(t - t') T_{-v\tau_a} ((1 - H) \times [C^*(., t') *_F \rho(.)])(x) dt'.$$

Donc la transformée de Laplace-Fourier $\hat{C}^*(k, u)$ vérifie

$$\hat{C}^*(k, u) = 2\cos kx_0 \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u} + \\ \tilde{w}(u) (\mathcal{F}\{T_{\tau_a v} (H[\tilde{C}^* *_F \rho(.)])\} + \mathcal{F}\{T_{-\tau_a v} ((1 - H)[\tilde{C}^* *_F \rho(.)])\})(k, u) \\ = 2\cos kx_0 \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u} + \tilde{w}(u) (e^{ikv\tau_a} \times (\hat{H} *_F [\hat{C}^* \hat{\rho}]) + e^{-ikv\tau_a} \times ((1 - \widehat{H}) *_F [\hat{C}^* \hat{\rho}])) \\ = 2\cos kx_0 \frac{1 - \tilde{w}(u)}{u} + \tilde{w}(u) (\cos kv\tau_a \times [\hat{C}^* \hat{\rho}] - 2i \sin kv\tau_a (\frac{1}{ik} *_F [\hat{C}^* \hat{\rho}]))$$

On en déduit

$$\hat{C}^*(k, u) = 2\cos kx_0 \frac{\tau}{1 + \tau u} + \tilde{w}(u) (\cos kv\tau_a \times [\hat{C}^* \hat{\rho}] - 2i \sin kv\tau_a (\frac{1}{ik} *_F [\hat{C}^* \hat{\rho}]))$$

qui s'écrit aussi

$$2\cos kx_0 = \frac{1 + \tau u}{\tau} - \tau^{-1} \cos kv\tau_a \hat{\rho} \hat{C}^* + \frac{1}{\tau} 2i \sin kv\tau_a \left(\frac{1}{ik} *_F [\hat{C}^* \hat{\rho}] \right).$$

On en déduit

$$u \hat{C}^*(k, u) - 2 \cos kx_0 = \frac{\rho \cos \tau_a v - 1}{\tau} \hat{C}^* + ikv \frac{\tau_a \sin kv\tau_a}{\tau kv\tau_a} \left(\frac{x}{|x|} *_F [\hat{C}^* \hat{\rho}] \right)(k, u)$$

et par conséquent

$$\widehat{\partial_t \tilde{C}^*}(k, u) = \hat{C}^*(k, u)A + ikvB \frac{x}{|x|} [\widehat{\tilde{C}^* *_F \rho}](k, u) \quad (5.11)$$

où $\frac{x}{|x|} [\widehat{\tilde{C}^* *_F \rho}]$ représente la transformée de Fourier de $\frac{x}{|x|} [\tilde{C}^* *_F \rho]$, cependant qu'on a posé $A = \tau^{-1}(e^{-|k|^\alpha} \cos k\tau_a v - 1)$

$$\text{et } B = \frac{\tau_a \sin kv\tau_a}{\tau kv\tau_a}.$$

Or $\frac{\sin kv\tau_a}{kv\tau_a}$ est le produit par $\frac{1}{\tau_a v}$ de la transformée de Fourier de la fonction $\chi_{[-v\tau_a, v\tau_a]}$ valant 1 sur l'intervalle $[-v\tau_a, v\tau_a]$ et 0 ailleurs. Donc l'opposé du dernier terme de (5.11) est la transformée de Fourier-Laplace de la dérivée de la convolution par $\frac{1}{\tau_a v} \chi_{[-v\tau_a, v\tau_a]}$ de la fonction $\frac{x}{|x|} [\tilde{C}^* *_F \rho]$ qui tend vers $\frac{x}{|x|} \tilde{C}^* *_F \rho$ lorsque l tend vers 0. Ensuite la convolution par $\frac{1}{\tau_a v} \chi_{[-v\tau_a, v\tau_a]}$ donne l'identité quand τ_a tend vers 0. Donc, à la limite (5.9), lorsque en plus $\tau_a \rightarrow 0$ avec $\frac{\tau_a}{\tau} = \xi$, l'opposé du dernier terme de (5.11) tend vers la transformée de Fourier-Laplace de

$$C^*(x, t) + \partial(v\xi \frac{x}{|x|} C^*(x, t)).$$

On en déduit que, pour $x > 0$, $C(x, t)$ vérifie (4.15) avec ∇_x^α défini par

$$\nabla_x^\alpha C(x, t) = \frac{-\lambda_\alpha}{2 \cos \frac{\alpha\pi}{2} \Gamma(2 - \alpha)} \partial_x^2 \int_{y=0}^{+\infty} (|x - y|^{1-\alpha} + (x + y)^{1-\alpha}) C(y, t) dy \quad (5.12)$$

5.6 Conclusion

Nous avons ainsi démontré que la version fractionnelle (4.15) de l'équation CDE s'applique au transport de matière lorsque, à petite échelle, celui-ci est décrit par des CTRW pour lesquelles la longueur des sauts est distribuée selon une densité symétrique appartenant au domaine d'attraction d'une loi α -stable de Lévy avec $\alpha \in (1, 2]$. Ce résultat s'applique en domaine infini avec la définition classique (3.14) de la dérivée de Riesz-Feller. Il s'applique à un milieu infini si la frontière est absorbante. Lorsque elle est de type réflexif, il faut remplacer la dérivée de Riesz-Feller par (5.12).

Le terme “d’advection” $v\partial_x C$ n’est pas modifié par une telle donnée au bord, tant que le temps moyen d’attente entre deux sauts successifs est fini. En particulier, les résultats ci-dessus restent valables si ce temps moyen est infini (avec une distribution des temps d’attente du type de Mittag-Leffler) à condition d’avoir $v = 0$.

Certaines conditions aux limites associées à un mur infranchissable ont ainsi été étudiées. Pour les inclure dans un démarche établissant un lien entre les niveaux micro- et macroscopique, il a fallu en proposer une interprétation à petite échelle. Nous avons concentré nos efforts sur le cas d’un mur renvoyant les particules de telle sorte qu’elles se déplacent, après le choc, de la distance qu’elles auraient parcourue si celui-ci n’avait pas eu lieu. Cette hypothèse reviendrait à parler de chocs élastiques si une interprétation énergétique du moteur induisant le mouvement des particules était possible. Tel serait le cas pour des mouvements de chute libre générés par des impulsions aléatoires. Les moteurs du transport anormal en milieu poreux sont plus complexes, et d’autres scénarios sont envisageables pour représenter ce qui se passe pour des particules rencontrant un mur infranchissable. On peut, par exemple, imaginer que, immédiatement après le choc, les particules s’arrêtent tout simplement à la frontière du domaine. Ensuite elles participent à la CTRW en sautant à nouveau. Cette éventualité devra être étudiée, mais hors du cadre de cette thèse.

Notre objectif est de rendre possible l’interprétation de résultats expérimentaux dans des dispositif mettant en jeu des conditions aux limites. Pour cette raison, nous devons nous doter d’un outil de simulation numérique.

Chapitre 6

Simulation numérique de l'équation fractionnaire en espace

Le chapitre précédent a montré l'étroite interdépendance entre certaines conditions aux limites et les équations contenant une dérivée spatiale d'ordre fractionnaire. On doit s'attendre à ce qu'une modification du noyau comme celle qui correspond à une donnée au bord de type réfléchissante impose aussi d'apporter des aménagements à un schéma de discrétisation utilisé en domaine infini et qu'on chercherait à adapter à la présence de conditions aux limites. Ce chapitre est consacré à la discrétisation d'une équation fractionnaire représentant l'évolution d'un nuage de particules effectuant des vols de Lévy, en présence d'un mur réfléchissant. On sera attentif au fait que la discrétisation d'une dérivée fractionnaire peut, a priori, concerner tous les points du domaine, tandis que les conditions de frontière parviennent à influencer le noyau donc le schéma lui-même.

Plusieurs schémas sont utilisés pour discrétiser les dérivées fractionnaires dans des domaines finis ou infinis. De nombreuses méthodes aux différences finies sont disponibles, ainsi que des éléments finis (G.J.Fix et al., 2004 [16]) qui ont été développés en domaine borné pour la version stationnaire de (4.2). Il faut aussi mentionner le travail de V.E. Lynch, 2003 [42] consacré à des modèles qui ressemblent à (4.2) sauf que la dérivée d'ordre α par rapport à la variable d'espace est du type de Riemann-Liouville.

On s'intéressera plus particulièrement à un schéma aux différences finies, attaché à la dérivée symétrique de Riesz-Feller et pour lequel des résultats de convergence sont disponibles. On l'adapte au cas d'un domaine semi-infini, limité par un mur réfléchissant, et on envisagera la possibilité d'advection. Le schéma est testé à l'aide de solutions analytiques lorsque c'est possible, c'est à dire en fait sans advection. Comme le couple "équation - conditions aux limites" représente l'évolution de la concentration

d'un nuage de particules effectuant des marches au hasard, nous comparons aussi les résultats numériques avec ceux d'une simulation de type Monte Carlo. Ceci permet de valider la méthode numérique lorsqu'on ne dispose pas de solution exacte, et c'est aussi une façon d'illustrer les résultats du chapitre 5.

Nous présentons d'abord le schéma que nous utilisons pour discrétiser la dérivée de Riesz-Feller, sous sa forme utilisée dans un milieu infini. Nous introduirons ensuite la condition à la limite, puis le terme d'advection.

6.1 Discrétisation de la dérivée de Riesz-Feller en milieu infini

Introduire un terme d'advection ($v \neq 0$) dans une équation fractionnaire comme (4.15) lorsque le domaine décrit par x est R tout entier, conduit au changement de variable $X = x - vt$, ce qui correspond à un changement de référentiel galiléen. Par conséquent, il y a peu de différence dans un tel milieu entre les cas $v = 0$ et $v \neq 0$. Pour cette raison, l'essentiel de l'attention sera orienté vers le cas $v = 0$.

6.1.1 Le cas d'un fluide immobile

La dérivée de Riesz-Feller (présente dans l'équation (4.15)) peut être considérée comme une généralisation du Laplacien, pour lequel on peut utiliser le schéma aux différences finies centrées d'ordre 2.

Le paragraphe 3.3.4 a rappelé que, sous certaines conditions de régularité et pour $\alpha \in (0, 2]$ les dérivées de Riemann-Liouville-Weyl $D_{\pm}^{\alpha} f(x)$ sont les limites, lorsque le pas h tend vers zéro, des différences finies fractionnaires. Nous avons donc pensé à utiliser ce fait pour discrétiser l'opérateur de Riesz-Feller selon

$$\nabla_x^{\alpha} f(x) : \frac{-1}{2h^{\alpha} \cos(\pi\alpha/2)} \left[\Delta_{-h}^{\alpha} f(x) + \Delta_{+h}^{\alpha} f(x) \right]$$

Mais lorsqu'on utilise cette représentation dans un schéma explicite pour l'équation (4.2), celui-ci est inconditionnellement instable pour $\alpha \in (1, 2]$ (R.Gorenflo et F.Mainardi, 1998 [27]). Passer à un schéma implicite ou semi-implicite ne donne pas de meilleur résultats. Nous avons pu le remarquer en utilisant la méthode de Von-Neumann, comme ci-dessous. Pour une équation aux dérivées partielles fractionnaires voisine de (4.15) (mais avec une dérivée de Riemann-Liouville) (M.M. Meerschaert et C. Tadjeran [50]) ont rencontré la même difficulté.

Suivant R.Gorenflo [27] et M.M.Meerschaert [50] nous avons remarqué qu'on obtient un schéma stable en décalant les points en lesquels on calcule les différences finies fractionnaires. On obtient aussi le schéma

$$\nabla_x^\alpha f(x) : \frac{-1}{2h^\alpha \cos(\pi\alpha/2)} [\Delta_{-h}^\alpha f(x-h) + \Delta_{+h}^\alpha f(x+h)]$$

avec la définition (3.18) de $\Delta_{\pm h}^\alpha f(x)$, pour $\alpha \in (1, 2]$, suivant [24], [25], [28] et [29].

Afin de préciser ce point, soient $j = 1, \dots, \infty$, l'échelle discrète par rapport à la variable x avec le pas régulier h , et $n = 1, \dots, \infty$, l'échelle discrète par rapport au temps t avec le pas Δ . Alors, appelons C_j^n la valeur discrète de la concentration $C(x, t)$ au point jh à l'instant $n\Delta$.

La discrétisation de la dérivée de Riesz-Feller en jh à l'instant Δn est

$$\frac{-1}{2h^\alpha \cos(\pi\alpha/2)} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} [C_{j+k-1}^n + C_{j-k+1}^n] \quad (6.1)$$

Pour la dérivée temporelle on utilise un schéma avancé

$$\partial_t C : \frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta},$$

En posant $c = -\frac{\lambda\alpha}{2} \frac{\Delta}{h^\alpha \cos(\pi\alpha/2)}$, on obtient pour l'équation (4.2) le schéma explicite suivant

$$C_j^{n+1} = C_j^n + c \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} [C_{j+k-1}^n + C_{j-k+1}^n] \quad (6.2)$$

ou, sous forme plus compacte

$$C_j^{n+1} = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k C_{j\pm k}^n \quad (6.3)$$

Les coefficients a_k sont
$$\begin{cases} a_0 = 1 - 2c\alpha, \\ a_1 = c(1 + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2}), \\ a_k = c \frac{\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)\dots(k-\alpha)_k}{(k+1)!}, \quad k \geq 2 \end{cases}$$

Les auteurs R.Gorenflo et F.Mainardi ([24], [28], [29]), R.Gorenflo et G. de Fabritiis [25] les ont interprétés comme définissant un schéma de redistribution associé à une marche au hasard de temps discret sur un réseau de pas h .

Interprétation probabiliste

La relation (6.3) calcule la suite (C_j^{n+1}) à partir de la suite (C_j^n) , et on peut aussi la lire comme une convolution discrète. Comme la somme est égale à 1, la relation (6.3) redistribue d'un instant $n\Delta$ au suivant $(n+1)\Delta$ une masse constante, si on est parti

d'une suite (C_j^0) sommable à valeurs positives. L'essentiel est que le processus défini par (6.3) soit conservatif et préserve la positivité dès que

$$c\alpha < 1/2 \quad (6.4)$$

Cette propriété assure la convergence de ce schéma explicite.

Convergence du schéma numérique

R.Gorenflo et F.Mainardi [24] ont montré que lorsque pour le schéma (6.3) tous les a_k sont positifs et de somme 1, la suite (double) C_j^n converge vers une solution de l'équation (4.2), lorsque h et Δ tendent vers zéro. Comme cette dernière est linéaire, il suffit de s'en assurer pour la donnée initiale $(C_j^0) = \delta_{j0}$, où δ_{jk} représente le symbole de Kronecker. Comme on a affaire à des suites positives et sommables, il suffit de considérer les transformées de Fourier.

On y accède en passant par les fonctions généralisées

$$a_g(z) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} a_j z^j$$

et

$$C_g(z, n) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} C_j^n z^j$$

lesquelles, à cause de (6.3) et de la donnée initiale, vérifient

$$C_g(z, n) = a_g^n(z)$$

Quand $z = e^{i\kappa h}$, $C_g(z, n)$ est la transformée de Fourier de la suite (C_j^n) . Comme la transformée de Fourier de la solution de (4.2) correspondant à la donnée initiale $C(x, 0) = \delta$ est $e^{-\lambda_\alpha t |\kappa|^\alpha}$, la convergence du schéma sera assurée si nous vérifions que $n \text{Log}(a_g(e^{i\kappa h}))$ tend vers $-\lambda_\alpha |\kappa|^\alpha$ lorsque $h \rightarrow 0$.

Ceci est vrai puisque

$$n \text{Log}(a_g(e^{i\kappa h})) = \frac{t}{\Delta} \text{Log}(a_g(e^{i\kappa h}))$$

et de plus on a ([24])

$$a_g(z) = 1 - 2c\alpha \left(z^{-1}(1-z)^\alpha + z(1-\frac{1}{z})^\alpha \right) = 1 - 2c\alpha \text{Re} \left(z^{-1}(1-z)^\alpha \right)$$

avec $a_g(z) = -2c\alpha \kappa^\alpha h^\alpha \cos(\pi\alpha/2 + \kappa h)$, compte tenu de la définition de c .

La condition (6.4) est vérifiée lorsque $\frac{\Delta}{h^\alpha}$ est suffisamment petit. Elle généralise la condition bien connue dans le cadre des équations paraboliques comme pour le cas

$\alpha = 2$. Lorsque cette condition est satisfaite, le schéma est aussi stable.

L'analyse de la stabilité du schéma.

La méthode de Von-Neumann est utilisée généralement pour l'analyse de stabilité. On représente la solution C_j^n sous la forme d'une série de Fourier

$$C_j^n = V^n e^{ik_x \Delta x j} \quad (6.5)$$

où le nombre d'onde k_x représente des perturbations périodiques,

$\varphi = k_x \cdot \Delta x$ est l'angle de phase

et $i = \sqrt{-1}$.

Revenant au schéma (6.3), nous avons

$$V^{n+1} e^{i\varphi j} = V^n e^{i\varphi j} a_0 + \sum_{k=1}^{+\infty} a_k V^n e^{i\varphi j} [e^{i\varphi k} + e^{-i\varphi k}]$$

$$V^{n+1} = V^n [a_0 + \sum_{k=1}^{+\infty} a_k 2\cos(k\varphi)]$$

Le schéma est stable lorsque toutes les perturbations sont affaiblies.

Notons

$$|G| = |a_0 + \sum_{k=1}^N a_k 2\cos(k\varphi)| \quad (6.6)$$

Le schéma est stable, si pour tout les φ

$$|G| \leq 1 \quad (6.7)$$

Notons que $|G| = 1$, si $N \rightarrow \infty$. Cette condition est suffisante, si on considère des conditions aux limites périodiques dans l'espace. Une visualisation du comportement de G en fonction de la phase, est montrée en figure 6.1.

Les coefficients a_k/c , $k \geq 1$ sont les coefficients binomiaux (positifs et décroissants, avec la somme égale 1). Alors, il reste à vérifier que le coefficient a_0 soit positif et plus petit que 1. Alors, la condition pour a_0 s'exprime par

$$0 \leq 1 + \frac{\Delta}{h^\alpha} \frac{\alpha \lambda_\alpha}{\cos(\pi\alpha/2)} < 1$$

Elle équivaut à ce que le coefficient d'échelle $\frac{\Delta}{h^\alpha}$ vérifie

$$0 < \frac{\Delta}{h^\alpha} \leq \frac{-\cos(\pi\alpha/2)}{\alpha \lambda_\alpha} \quad (6.8)$$

La seconde inégalité n'est autre que (6.4).

On a donc prouvé que le schéma (6.3) associé à la discrétisation de la dérivée temporelle, et à une méthode explicite, permet de converger vers une solution de (4.2), et

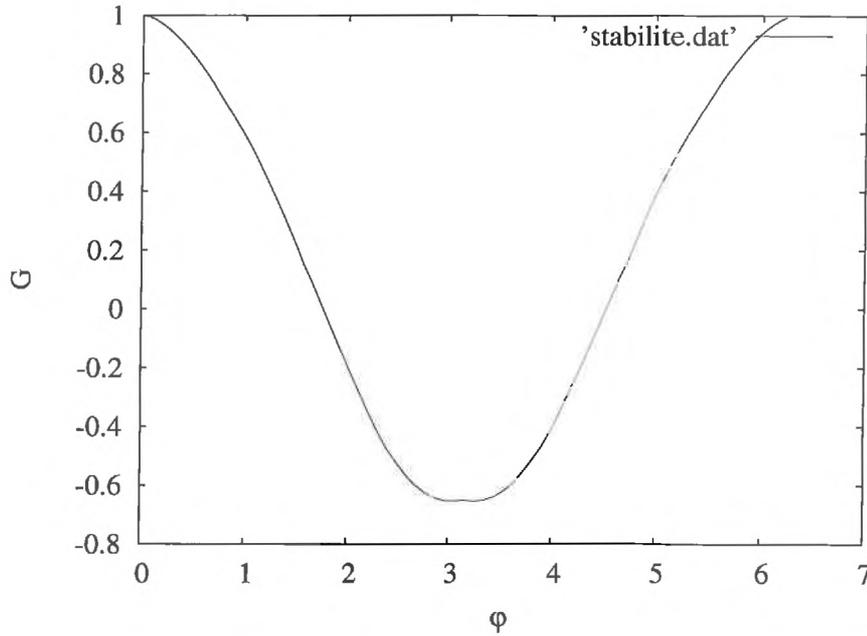


FIG. 6.1 – Comportement de G en fonction de la fonction de phase, exemple pour $\alpha = 1.5$.

qu'il est stable sous la condition (6.8).

Comparaisons

Afin d'illustrer notre propos, nous avons comparé les résultats de cette discrétisation avec une solution exacte de (4.2). En effet, nous avons vu au paragraphe 5.2 qu'en partant d'une donnée initiale de la forme $C(x, 0) = \delta(x - x_0)$, l'équation (4.2) admet une solution qui peut s'exprimer à l'aide d'une fonction G de Meijer (qui est dans dans le logiciel Mathematica, voir le code "MGspace.nb" en annexe F).

Numériquement, il est difficile de simuler une impulsion de Dirac $\delta(x)$, alors nous avons pris comme donnée de départ la solution exacte au temps $t = 1$. Cela nous a permis d'avoir les mêmes conditions initiales (mais décalées) pour la simulation numérique et la solution exacte, permettant ainsi de les comparer sans avoir à gérer les complications d'inexactitude liées à l'impulsion de Dirac.

La figure 6.2 montre la comparaison entre la solution exacte (4.7) et la simulation numérique (6.3), calculée avec les pas $h = 0.05$, $\Delta = 0.036$.

Cette comparaison suffit dans le cas d'un domaine infini, sans advection, pour déterminer quelles valeurs du pas h conduisent à des résultats corrects.

Autres discrétisations

Dans le même esprit, R.Gorenflo et al.[24] proposent d'autres possibilités pour les a_k , en puisant dans le domaine d'attraction d'une loi α -stable au lieu de choisir uniquement

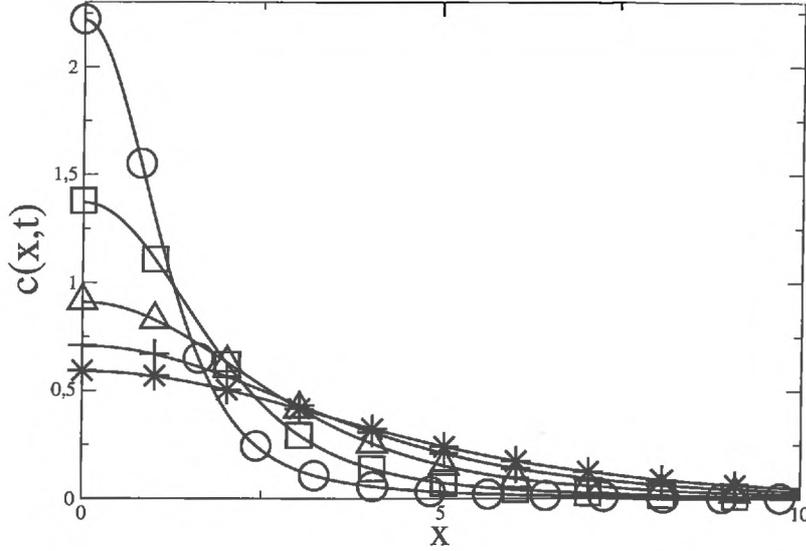


FIG. 6.2 – Comparaisons d’une simulation numérique (lignes) avec la solution exacte (symboles) sur un domaine infini. Compte tenu de la parité de la solution du problème continu et du problème discret, on a seulement représenté les x positifs. La courbe supérieure correspond à $t = 1.072$, les suivantes correspondent aux $t = 2.116$, $t = 3.844$, $t = 5.644$ et $t = 6.724$.

cette loi elle-même. Une version discrète de cet énoncé est due à J.E.Gillis et G.H.Weiss, (1970) [17]. Ces auteurs ont choisi

$$a_0 = 1 - 2 \frac{\Delta \lambda_\alpha}{h^\alpha} b(\alpha) \zeta(\alpha + 1)$$

et

$$a_k = \frac{\Delta \lambda_\alpha}{h^\alpha} b(\alpha) |k|^{-\alpha-1}, \quad k \neq 0,$$

où la fonction b est définie par

$$b(\alpha) = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\pi} \sin(\alpha\pi/2)$$

et la fonction “zeta” (ζ) de Riemann et définie par

$$\zeta(z) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-z}, \quad \text{Re}(z) > 1$$

avec la condition $\frac{2\Delta\lambda_\alpha}{h^\alpha} < \frac{\pi}{\Gamma(\alpha+1)\sin(\alpha\pi/2)\zeta(\alpha+1)}$.

Des schémas adaptés à des variantes non symétriques (définies par $\gamma D_-^\alpha + (1-\gamma)D_+^\alpha$ avec $\gamma \in (0, 1)$) de la dérivée de Riesz-Feller sont aussi disponibles ([27], [26]).

6.1.2 Dans un champ de vitesse constant

Dans le cas advectif et dans un milieu infini, la solution est donnée par une simple translation de la variable x par $-vt$. En prenant un schéma d'ordre un pour le terme d'advection et en traitant la dérivée de Riesz-Feller comme en (6.1), on arrive pour l'équation (4.15) à la discrétisation qui s'exprime par

$$C_j^{n+1} = -v\Delta \frac{C_{j+1}^n - C_{j-1}^n}{2h} + \sum_{k=0}^{+\infty} a_k C_{j\pm k}^n$$

$$C_j^{n+1} = a_0 C_j^n + C_{j+1}^n \left(a_1 - \frac{v\Delta}{2h}\right) + C_{j-1}^n \left(a_1 + \frac{v\Delta}{2h}\right) + \sum_{k=2}^{+\infty} a_k C_{j\pm k}^n \quad (6.9)$$

Analyse de stabilité du schéma (6.9)

En suivant le méthode de Von-Neumann, comme au paragraphe précédent, dans l'espace Fourier (6.5) le schéma (6.9) s'exprime comme

$$V^{n+1} = V^n \left[a_0 + 2a_1 \cos\varphi - \frac{v\Delta}{h} i \sin\varphi + \sum_{k=2}^{+\infty} a_k 2\cos(\varphi k) \right]$$

$$|G| = \sqrt{\left(a_0 + 2a_1 \cos\varphi + \sum_{k=2}^{+\infty} a_k 2\cos\varphi k \right)^2 + \left(\frac{v\Delta}{h} \sin\varphi \right)^2}$$

Pour la stabilité du schéma, il faut satisfaire la condition (6.7). Si le maximum (par rapport à φ) de $|G|$ satisfait cette condition, alors il est vrai pour tout les φ . Ce maximum est atteint, quand $\varphi = 0, 2\pi, \pm\pi/2$. Si $\varphi = 0, 2\pi$, on n'a que la somme des a_k sous la racine. Elle est égale à 1 sous la condition (6.8), dérivée dans le paragraphe précédent. Dans ce cas la masse totale du système est constante.

Avec $\varphi = \pm\pi/2$ nous avons la condition

$$\sqrt{a_0^2 + \left(\frac{v\Delta}{h}\right)^2} \leq 1$$

qui donne

$$\frac{\Delta}{h^\alpha} \left((\alpha\lambda_\alpha)^2 + v^2 \cos^2(\pi\alpha/2) h^{2\alpha-2} \right) \leq 2\alpha\lambda_\alpha |\cos(\pi\alpha/2)| \quad (6.10)$$

et puis

$$\frac{\Delta}{h^\alpha} \leq \frac{2\alpha\lambda_\alpha |\cos(\pi\alpha/2)|}{v^2 |\cos(\pi\alpha/2)|^2 h^{2\alpha-2} + (\alpha\lambda_\alpha)^2} \quad (6.11)$$

Alors, la condition (6.11) assure la stabilité du schéma (6.9). Avec cette condition on a une visualisation du comportement de $|G|$ en fonction de φ présenté sur la figure 6.3. Elle montre que la condition (6.7) est satisfaite pour tous les φ .

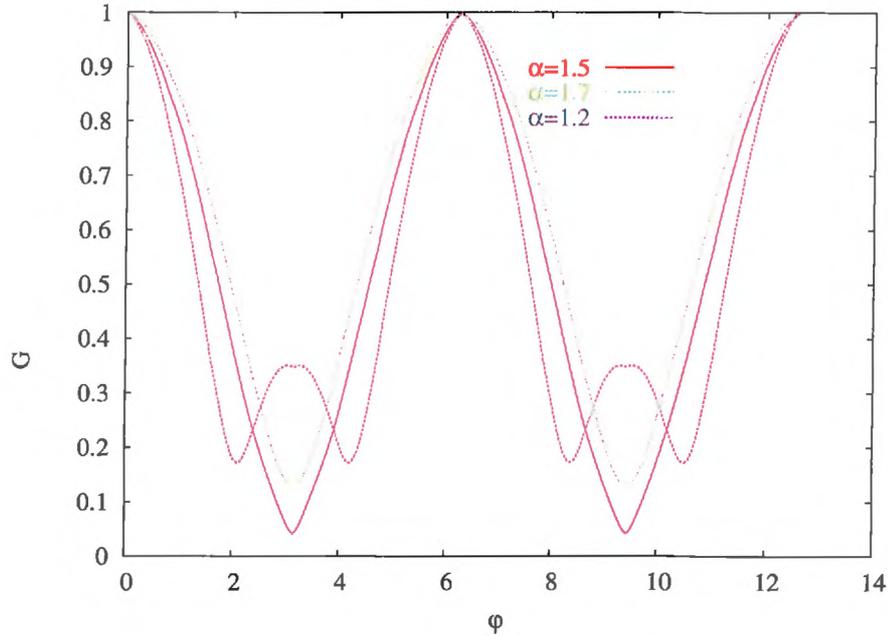


FIG. 6.3 – Comportement de G en fonction de la phase $\varphi \in [0, 4\pi]$ pour trois valeurs de α .

Comparaisons

Dans ce cas aussi on dispose de solutions exactes. La figure 6.4 montre que l'accord avec la simulation numérique est excellent lorsque h est suffisamment petit ($h = 0.1$) et quand la condition (6.11) est satisfaite.

Imposer aux particules de soluté de rester dans le domaine $x > 0$, et de se réfléchir contre cette frontière selon le modèle discuté au paragraphe 5.2, modifie le noyau de la dérivée de Riesz-Feller. Donc, il faut faire évoluer sa discrétisation lorsqu'on impose une telle condition à la limite. Comme nous l'avons vu au chapitre 5 ([64]), le terme d'advection doit être traité avec soin. Dans un premier temps, nous considérons que le fluide est immobile ($v=0$).

6.2 Discrétisation dans un milieu semi-infini avec un mur élastique

On dérive le schéma numérique pour l'équation (5.10) en posant $v = 0$. Nous partons de la méthode disponible pour le milieu infini (6.3). En effet, le prolongement par parité $C^*(x, t)$ d'une solution $C(x, t)$ de (5.10) vérifie (4.2) dans un domaine infini.

Par conséquent, en appliquant le schéma (6.3) à C^* , on obtient pour C l'expression

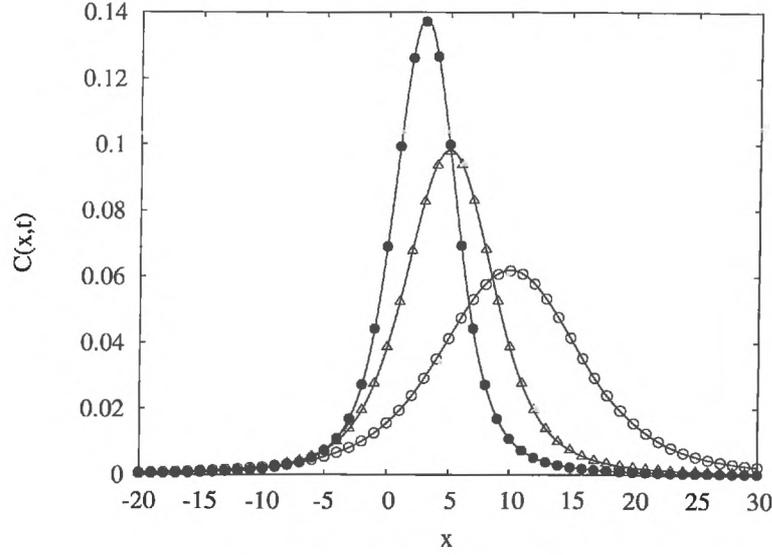


FIG. 6.4 – Comparaisons d’une simulation numérique avec la solution exacte dans un domaine infini, avec une vitesse non nulle, à partir d’une impulsion de Dirac en $x = 0$. La courbe supérieure correspond à $t = 3$, les suivantes correspondent aux $t = 5$ et $t = 10$.

suivante

$$C_j^{n+1} = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k C_{j\pm k}^{*n} = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k C_{j+k}^n + \sum_{k=1}^j a_k C_{j-k}^n + \sum_{k=1}^{j-1} a_{2j-k} C_{-j+k}^n + \sum_{k=0}^{+\infty} a_{2j+k} C_{-j-k}^n$$

Ici j et $k = 0, 1, 2, \dots$

Par parité on a

$$\sum_{k=0}^{+\infty} a_k C_{j\pm k}^{*n} = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k C_{j+k}^n + \sum_{k=1}^j a_k C_{j-k}^n + \sum_{k=1}^{j-1} a_{2j-k} C_{j-k}^n + \sum_{k=0}^{+\infty} a_{2j+k} C_{j+k}^n$$

et le schéma donnant C_j^n dans un demi-espace est

$$C_j^{n+1} = \sum_{k=0}^{+\infty} C_{j+k}^n (a_k + a_{2j+k}) + \sum_{k=1}^{j-1} C_{j-k}^n (a_k + a_{2j-k}) + C_0^n a_j \quad (6.12)$$

Autrement dit, dans un milieu limité par un mur, on utilise une variante de la méthode des images. A partir d’une donnée initiale plus ou moins concentrée autour de $x_0 > 0$ on obtient un pic solution de (4.2) dont la représentation graphique est un pic qui s’étale sans se déplacer, au moins tant que l’influence du mur ne l’a pas dégradé. Le schéma (6.12) revient à créer un pic virtuel de l’autre côté du mur, symétrique du pic initial. Le pic virtuel a une partie de son aile à droite du mur (où $x > 0$). Cette aile droite contribue à C_j^n par l’intermédiaire des $a_{2j\pm k}$.

Comme on n’a pas vraiment changé la série de coefficients a_k (mais seulement réorganisé), ses propriétés stochastiques restent les mêmes et la série converge. La

condition de stabilité reste la même (6.8). Le programme de réalisation de ce schéma est présenté en annexe F sous le nom “numSpMV.cpp”.

Parce que le prolongement C^* d’une solution C de (5.10) vérifie (4.2) dans le domaine infini, on dispose d’une solution exacte avec la donnée initiale $C(x, 0) = \delta(x - x_0)$, $x_0 \geq 0$. La figure 6.5 montre la comparaison entre le résultat de la simulation numérique et cette solution exacte pour une valeur du pas $h = 0.03$.

Afin de préparer la validation des calculs numériques pour des problèmes pour les-

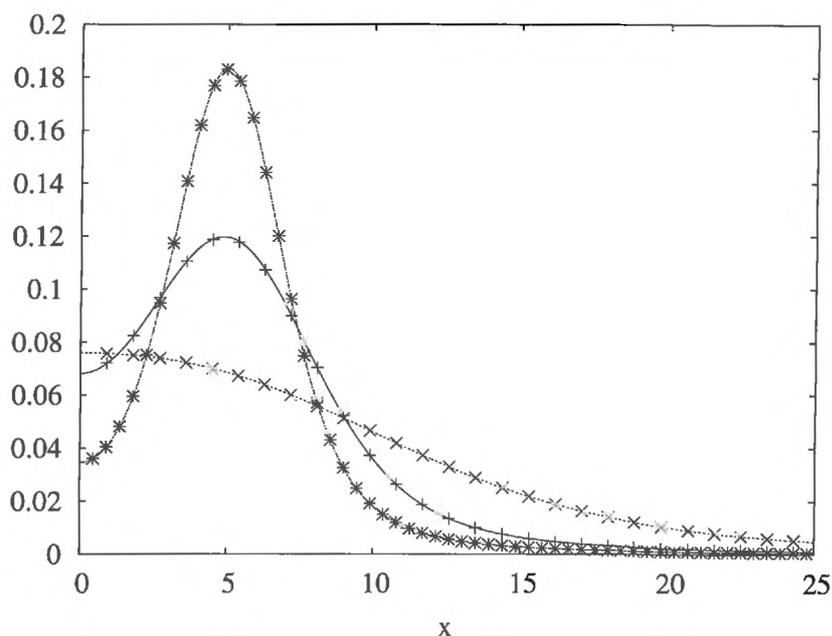


FIG. 6.5 – Comparaison d’une simulation numérique de (5.10) (étoiles) avec la solution exacte (traits pleins), avec en $x = 0$ un mur élastique, et $v = 0$. Les courbes correspondent aux $t = 2$, $t = 4$ et $t = 14$.

quels on n’a pas de solution exacte, nous avons aussi comparé avec une simulation de Monte Carlo. Cette dernière a été mise en oeuvre en simulant le mouvement de Q particules effectuant un vol de Lévy de temps discret. La particule se déplace aux instants $n\tau$, $n = 1, 2, \dots$, et la longueur des sauts est une VA dont la densité de probabilité est $\frac{1}{l}p_\alpha(\frac{x}{l}, 0)$. Les paramètres τ et l sont liés par la relation (5.9).

Les détails de l’algorithme mis en oeuvre pour les simulations des marcheurs aléatoires sont présentés en annexe D.

La simulation numérique calcule $C(x, t)$, qui représente en chaque point d’abscisse x la concentration de soluté à l’instant t . Cette dernière est aussi la densité de probabilité de trouver une particule de soluté en x à l’instant t . La méthode de Monte Carlo permet d’accéder à cette densité à partir des histogrammes, en calculant le nombre de particules

présentes à l'instant $n\tau$ dans l'intervalle $[x-dx, x+dx]$. Ensuite on divise par le nombre total Q de particules et par la longueur de l'intervalle $2dx$ (voir annexe D).

Les résultats sont présentés sur la figure 6.6. On voit le bon accord entre deux simulations au cours du temps pour deux positions x fixées (à côté du mur et en un point plus loin). La solution $\text{Ln}[C(x, \text{Ln}(t))]$ de l'équation (5.10) ($v = 0$) est en traits pleins sur cette figure. Les pointillés représentent les histogrammes obtenus par simulation directe des vols de Lévy.

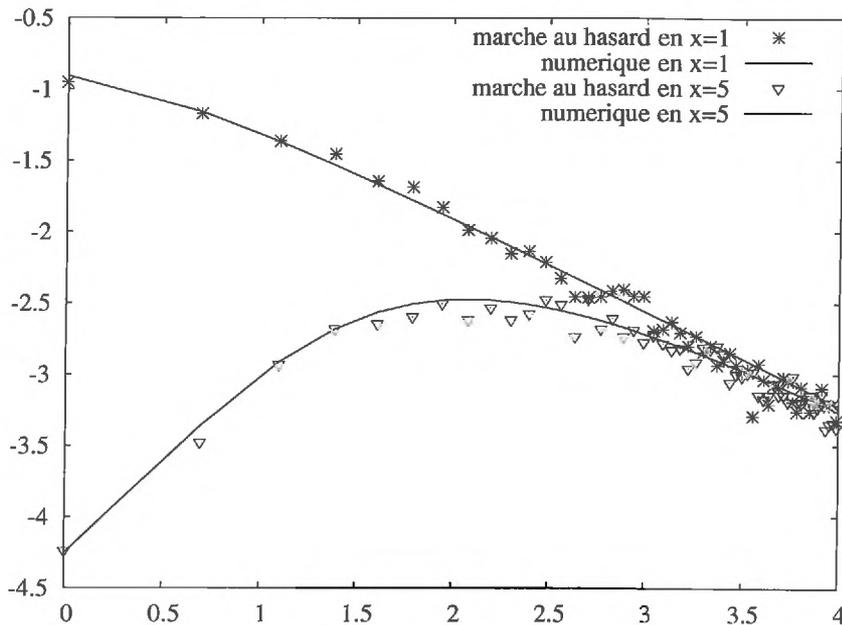


FIG. 6.6 – Simulation numérique (traits pleins) et marche au hasard (pointillés), avec une limite réfléchissante en $x=0$; et avec $v=0$, $\alpha = 1.5$. Illustration en coordonnées logarithmiques $\text{Ln}(C(x, \text{Ln}(t)))$ en fonction du $\text{Ln}(t)$ pour 2 points situés en $x=1$ et $x=5$, à partir d'une impulsion initiale de Dirac en $x=0$. Pour la simulation numérique, on a pris la solution exacte avec $t = 1$ pour condition initiale.

6.3 Mur élastique et advection.

Nous disposons d'une méthode testée pour discrétiser la dérivée de Riesz-Feller en présence d'un mur réfléchissant. Il faut maintenant traiter le terme advectif. Après avoir précisé le schéma, nous effectuerons des tests en comparant avec la simulation directe des vols de Lévy.

Pour le terme advectif nous avons utilisé d'abord un schéma à deux points. Nous avons observé qu'il n'est pas suffisamment précis pour reproduire le comportement du

pic de la solution. On peut élever l'ordre de l'approximation, mais celà risque de donner des instabilités au schéma, donc on retarde l'apparition en décentrant le schéma. Nous avons donc utilisé un schéma d'ordre 2 à trois points

$$v\partial_x C_j^n : -\frac{v}{2h}(-3C_j^n + 4C_{j+1}^n - C_{j+2}^n)$$

$$C_0 := C_1$$

Le schéma complet de l'équation (5.10) est

$$C_j^{n+1} = C_j^n(a_0 + \frac{3v\Delta}{2h} + a_{2j}) + C_{j+1}^n(a_1 - \frac{2v\Delta}{h} + a_{2j+1}) + C_{j+2}^n(a_2 + \frac{v\Delta}{2h} + a_{2j+2}) +$$

$$+ \sum_{k=3}^{+\infty} (a_k + a_{2j+k})C_{j+k}^n + \sum_{k=1}^{j-1} (a_k + a_{2j-k})C_{j-k}^n + C_0^n a_j, \quad j \geq 0 \quad (6.13)$$

L'analyse de stabilité du schéma (6.13)

Afin d'étudier la convergence et la stabilité du schéma, posons

$$\begin{cases} g_0 = a_0 + \frac{3v\Delta}{2h} + a_{2j} \\ g_1 = a_1 - \frac{2v\Delta}{h} + a_{2j+1} \\ g_2 = a_2 + \frac{v\Delta}{2h} + a_{2j+2} \end{cases}$$

Pour la convergence du schéma, les coefficients des $C_{j\pm k}$, pour tout k doivent être positifs et leur somme doit être plus petite que 1. Pour les trois dernières sommes de (6.13) cette condition est assurée par la réalisation de (6.8). Il reste à satisfaire les conditions pour les trois premiers membres, c'est à dire à vérifier

$$\begin{cases} 0 < g_0 < 1 \\ 0 < g_1 < g_0 \\ g_2 < g_1 \end{cases}$$

Ces conditions sont analogues à celles obtenues par M.M.Meerschaert et C.Tadjeeran, 2004 [50] pour l'équation

$$\partial_t C(r, t) = v(r)\partial_r C(r, t) = d(r)\mathcal{D}_+^\alpha C(r, t) + f(r, t)$$

dans le domaine spatial $r \in [L, R]$, avec la condition de frontière absorbante $C(L, t) = 0$.

On va tenir compte de la condition (6.8) qui assure que les a_k sont positifs et décroissent lorsque $k \rightarrow \infty$. Dans ce cas, les coefficients $a_{2j}, a_{2j+1}, a_{2j+2}$, dans les

g_0, g_1, g_2 , atteignent leurs valeurs maximales en $j = 0$, sinon ils sont négligeables par rapport aux a_0, a_1, a_2 .

En résolvant le dernier système d'inégalités, on trouve que la troisième inégalité est la plus exigeante. Elle s'exprime par

$$h^{\alpha-1} < \frac{6 + 3\alpha(\alpha - 1) - \alpha(\alpha - 1)(2 - \alpha)}{30\nu|\cos(\pi\alpha/2)|} \lambda_\alpha \quad (6.14)$$

Sous cette condition le schéma (6.13) converge vers $C(x, t)$, vérifiant le modèle fractionnaire dans un semi-espace avec un terme d'advection.

Pour analyser la stabilité du schéma (6.13), on applique le méthode de Von-Neumann. Dans l'espace des variables de Fourier (6.5) on obtient

$$V^{n+1} = V^n [a_j + g_0 + g_1 e^{i\varphi} + g_2 e^{2i\varphi} + \sum_{k=3}^{+\infty} (a_k + a_{2j+k}) e^{ik\varphi} + \sum_{k=1}^{j-1} (a_k + a_{2j-k}) e^{-ik\varphi}]$$

Posons

$$G = g_0 + a_j + g_1 e^{i\varphi} + g_2 e^{2i\varphi} + \sum_{k=3}^{+\infty} (a_k + a_{2j+k}) e^{ik\varphi} + \sum_{k=1}^{j-1} (a_k + a_{2j-k}) e^{-ik\varphi}$$

Pour que le schéma soit stable il faut satisfaire la condition $|G| \leq 1$. Il suffit de satisfaire cette condition pour le maximum de $|G|$. Nous avons testé le comportement de G avec la condition (6.14) pour le pas d'espace et avec la condition (6.8) pour le pas de temps (voir le code en annexe F sous le nom "stabMV.cpp"). Le résultat est présenté sur la figure 6.7. On voit que G est toujours inférieur à 1. Finalement, on a deux conditions (6.8) et (6.14) pour assurer la convergence et la stabilité du schéma (6.13). Cette

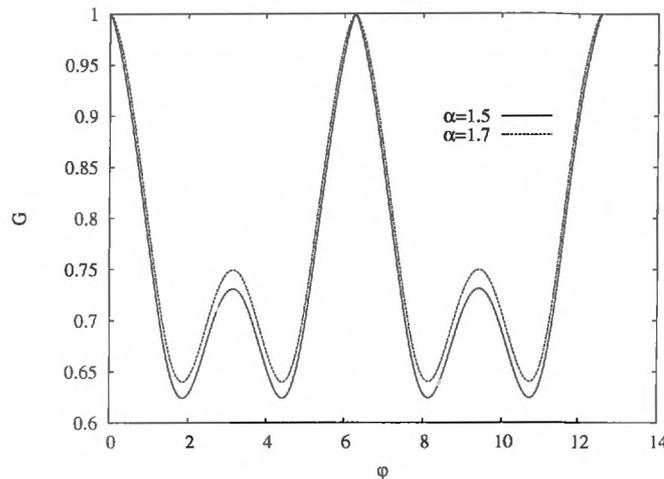


FIG. 6.7 – Le comportement de G en fonction de la fonction de phase $\varphi \in [0; 4\pi]$ pour deux valeur de α .

méthode est validée par des comparaisons avec des marches au hasard.

6.4 Comparaisons avec des marches au hasard

Les figures 6.8 et 6.9 comparent la solution de (5.10), discrétisée selon le schéma (6.13), avec des marches au hasard discrètes par rapport au temps. On observe l'évolution de la concentration pour deux instants t en fonction de x (figure 6.8) et en fonction du temps en deux positions de x (la figure (6.9)). On a la donnée initiale $C(x, 0) = \delta(x - 5)$ en $x = 5$ et la condition à la limite en $x = 0$. Le bon accord permet d'utiliser les résultats de simulation de (5.10) pour évaluer l'effet du mur sur l'évolution de la concentration.

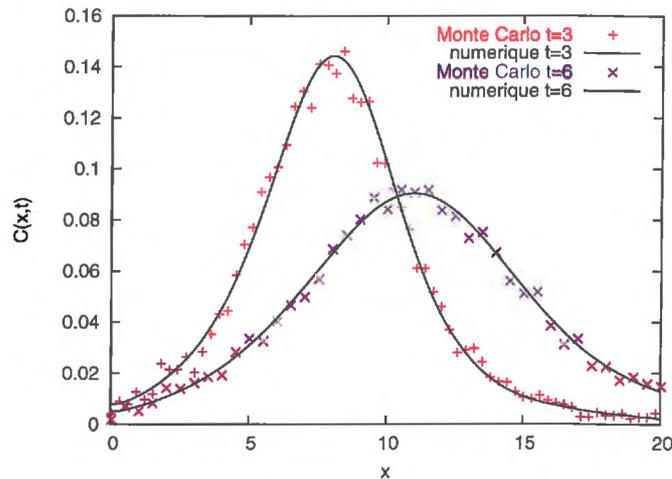


FIG. 6.8 – Comparaison des solutions numériques et marche au hasard, limite en $x=0$, $v=1$, $\alpha = 1.5$, $C(x, 0) = \delta(x - 5)$.

6.5 Influence du mur

Les figures 6.10 et 6.11 comparent la solution de (5.10) dans un domaine semi-infini avec celle de (4.15) dans un domaine infini. On observe que la différence est petite, sauf au voisinage du mur. La figure 6.11 représente un agrandissement des profils de concentration entre la position de l'impulsion initiale et l'abscisse ($x = 0$) en laquelle on place éventuellement un mur réfléchissant.

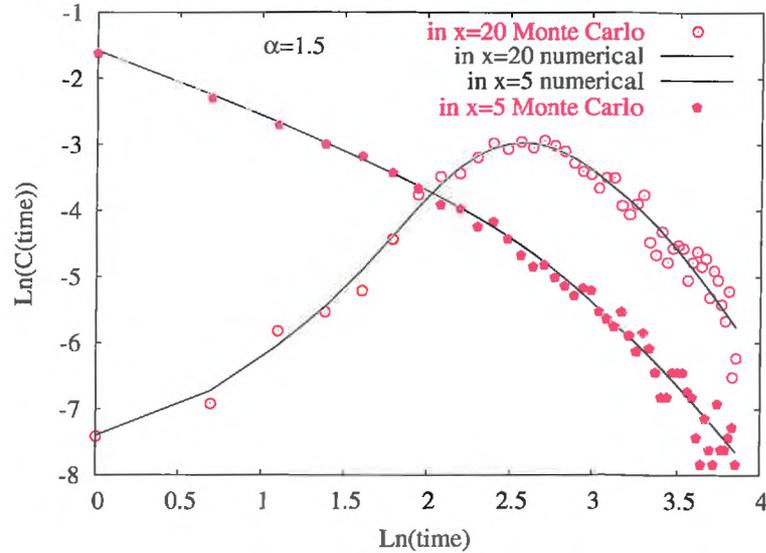


FIG. 6.9 – Marche au hasard (points) et simulation numérique de (5.10) (traits pleins) en fonction du temps (axe horizontal) pour deux valeurs de x fixées, soit $x=5$ et $x=20$.

6.6 Conclusion

Nous disposons d'un schéma numérique pour l'équation (5.10) qui, comme nous l'avons vu au chapitre 5, incorpore la condition à la limite exprimant la présence d'un mur réfléchissant les particules. En fait (5.10) représente une classe d'équations, puisque l'exposant α peut varier entre 1 et 2, sans parler des coefficients des différents opérateurs.

Pour utiliser au maximum des comparaisons avec des solutions exactes, mais aussi pour isoler la difficulté représentée par cette données au bord, nous avons surtout discuté des résultats concernant un domaine spatial semi-infini. En fait le cas d'un domaine borné d'un côté par un mur réfléchissant et, de l'autre, par une condition absorbante ($C(L, t) = 0$) a aussi fait l'objet de simulations numériques. Celles-ci sont l'aboutissement des travaux réalisées en milieu semi-infini. Sur la figure 6.12 on montre l'évolution de concentration (la solution de (5.10)) sur le domaine borné : avec la condition élastique en $x = 0$ et avec la condition absorbante en $x = 50$. La donnée initiale est Dirac, posée en $x = 5$ à l'instant $t = 0$.

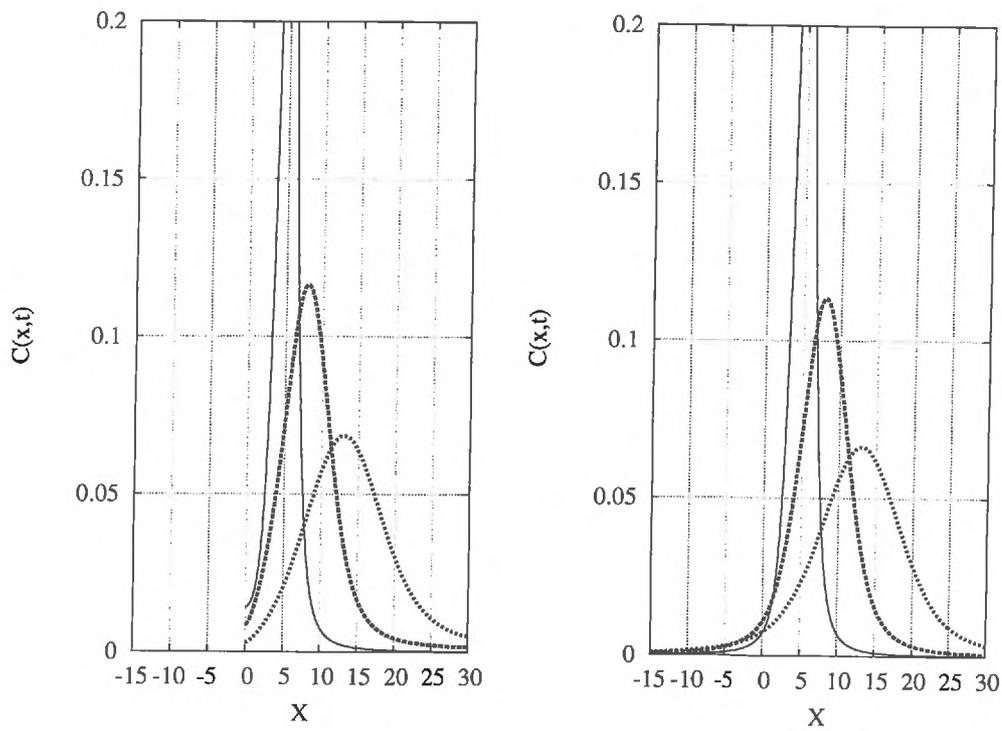


FIG. 6.10 – L'effet de condition à la limite, avec une vitesse $v = 1$. La figure de gauche représente d'une solution de (5.10) aux instants $t = 1$, $t = 4$ et $t = 9$. La figure de droite représente aux mêmes instants la solution de (4.15) qui correspond à la même donnée initiale, à partir d'une impulsion de Dirac en $x = 5$.

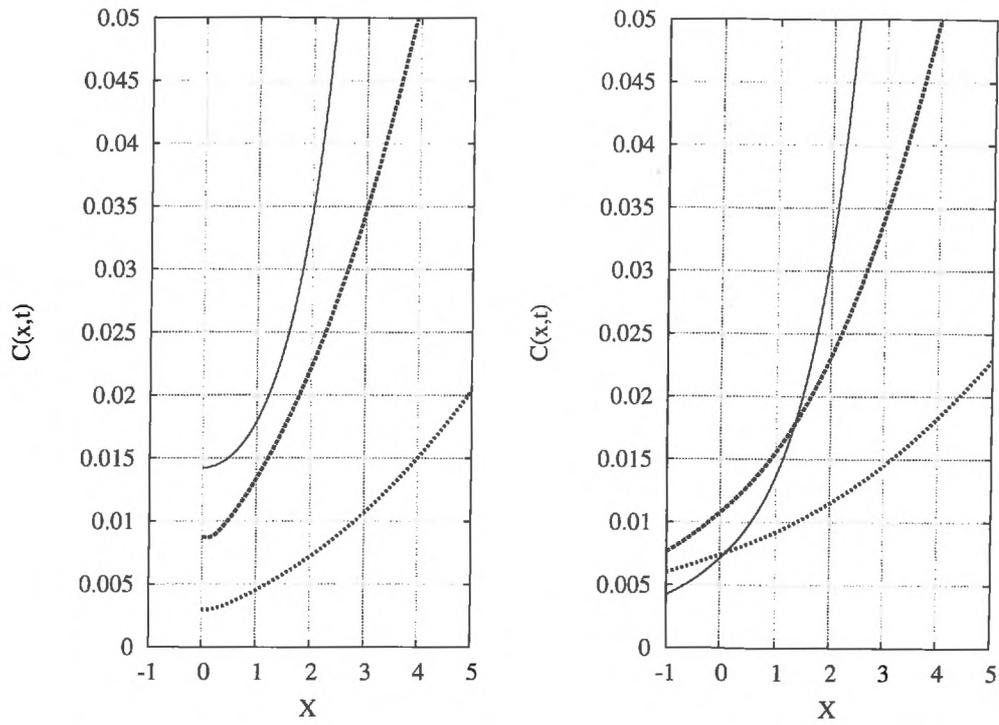


FIG. 6.11 – Zoom de côté de la figure 6.10.

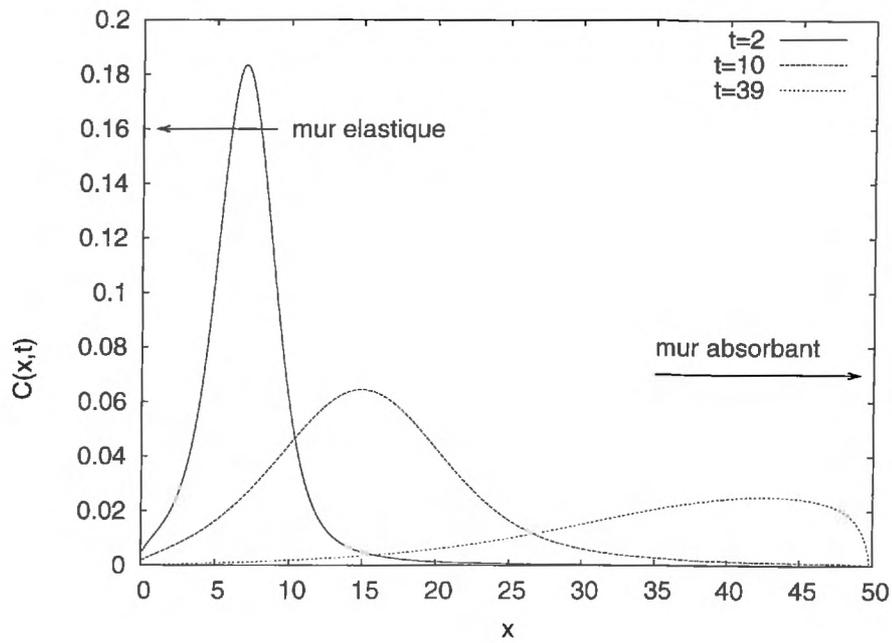


FIG. 6.12 – L'évolution de concentration en milieu borné par deux condition aux limites : $\partial_x C(0, t) = 0$ et $C(L, t) = 0$. Calculée avec la méthode (5.10).

Chapitre 7

Solution numérique de l'équation fractionnaire en temps

7.1 Introduction

Le domaine des milieux poreux désordonnés est très vaste. De nombreux phénomènes physiques peuvent être mis en jeu dans le transport de matière en leur sein. Nous avons vu au chapitre 4 une classe de marches au hasard auxquelles on peut recourir pour les représenter. Elle conduit à divers modèles macroscopiques, et il faut être capable de résoudre ces équations aux dérivées partielles. Parmi ces dernières, nous avons mis l'accent sur la simulation numérique des modèles fractionnaires en espace parce qu'il nous a semblé qu'il était possible d'apporter des résultats nouveaux dans ce cadre.

En effet, c'est pour les équations fractionnaires en espace qu'il peut être impossible de découpler complètement le modèle lui-même et certaines conditions aux limites. C'est, d'ailleurs, l'analogie de ce qui se passe avec des données initiales et des dérivées temporelles comme celles de Riemann-Liouville ou de Caputo. Avec une dérivée de Riesz-Feller, qui tient compte de phénomènes correspondant à tout le domaine d'espace, c'est plus compliqué. Pour ces raisons nous avons mis l'accent au chapitre 6 sur les équations fractionnaires en espace.

Cependant, dans les milieux poreux des particules de soluté peuvent rencontrer de nombreuses occasions retardant leur mouvement à petite échelle, si par exemple, certains pores fonctionnent comme des pièges dans lesquels on entre plus facilement qu'on ne sort. L'adsorption par la matrice solide peut aussi être évoquée. Et l'interaction avec un écoulement interne désordonné n'est pas à exclure.

Il fallait donc se donner aussi les moyens de traiter des équations avec des dérivées fractionnaires en temps comme (4.10). C'est l'objet de ce chapitre, qui ne conduit

cependant pas à des résultats nouveaux. Après avoir précisé la méthode utilisée pour discrétiser la dérivée fractionnaire temporelle, nous montrons qu'elle donne des résultats en accord avec des solutions exactes.

7.2 Le modèle

Nous nous intéressons principalement à l'équation (4.10) où à sa forme équivalente (4.9), avec β strictement entre 0 et 1.

Pour ce modèle, on connaît des solutions exactes en milieu infini (R. Metzler et J. Klafter [51], R. Gorenflo et F. Mainardi [19]). Elles ont été présentées au paragraphe 4.3, et correspondent à des données initiales sous la forme d'impulsion de Dirac. Elles comportent une discontinuité persistante en la position de cette impulsion initiale. Les solutions présentant une singularité sont particulièrement difficiles à capturer numériquement, alors que la donnée initiale qui les produit n'est pas vraiment réalisable physiquement. Cependant, en considérant un domaine borné, des conditions aux limites et une donnée initiale compatible avec celle-ci, on obtient aussi des solutions exactes mais qui, elles, sont continues. Tel est le cas, par exemple, dans le domaine $[0, L]$ pour x avec les conditions aux limites $C(0, t) = C(L, t) = 0$.

La donnée initiale $C(x, 0) = \sin(n\pi x)$, avec n entier, conduit à la solution

$$C(x, t) = \sin(n\pi x) E_\beta(-\pi^2 n^2 t^\beta)$$

où E_β désigne la fonction de Mittag-Leffler d'indice β . Pour s'en assurer, il suffit de projeter sur les $\sin(n\pi x)$ (au sens de $L^2[0, L]$) et de remarquer que $C(x, t) = \sin(n\pi x) f_n(t)$, et que la transformée de Laplace de f_n vérifie $\tilde{f}_n(u) = \frac{u^{\beta-1}}{u^\beta + \pi^2 n^2}$. Or, cette dernière est la transformée de Laplace de $E_\beta(-\pi^2 n^2 t^\beta)$ (R. Gorenflo et F. Mainardi, 1997 [21]).

7.3 La méthode

Plusieurs méthodes permettant de discrétiser les dérivées fractionnaires sont disponibles, comme celle de R. Gorenflo, F. Mainardi, D. Moretti et P. Paradisi [30], dont la convergence est démontrée. C'est aussi le cas de la méthode proposée par C. Lubich ([38], [39], [40]) et appliquée par J.C.Lopez-Marcos [41] et J.M. Sanz-Serna [72].

Dans l'article [72] cette méthode est détaillée pour l'équation

$$C_t = \int_0^t (t-s)^{-1/2} C_{xx} ds$$

L'auteur mentionne aussi que la méthode peut être généralisée pour l'équation

$$u_t = D_t^\beta u_{xx}$$

où D_t^β est la dérivée de Riemann-Liouville, $\beta \in (0, 1)$. Nous avons utilisé cette approche pour construire le schéma numérique de l'équation (4.9).

De manière générale, pour $1 - \beta > 0$ on a $D^{1-\beta} = I^{\beta-1}$, donc si on change dans (4.9) l'opérateur de la dérivée par celle de l'intégrale, on obtient

$$\partial_t C(x, t) = I_t^{\beta-1} \partial_{x^2}^2 C(x, t) \quad (7.1)$$

On va discrétiser cette équation suivant la méthode de Sanz-Serna [72]. Nous en rappelons le principe. La discrétisation de la fonction $C(t)$ est représentée par la suite $\{\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n, \dots\}$ de réels, à laquelle nous associons une fonction génératrice par rapport au paramètre temporel t :

$$g(t) = \sum_1^\infty \phi_n t^n \quad (7.2)$$

Ensuite, suivant C. Lubich [38], l'approximation de $I_t^{\beta-1}$ est représentée symboliquement par la multiplication par $\Delta^{\beta-1}(1-t)^{1-\beta}$, où Δ représente le pas de discrétisation en temps.

Pour la discrétisation en espace on utilise des différences finies d'ordre 2 représentées par l'opérateur matriciel de la dérivée secondaire par rapport à x :

$$A = \frac{1}{h^2} [(\cdot)_{j-1}^n - 2(\cdot)_j^n + (\cdot)_{j+1}^n]$$

où h est le pas d'espace. L'approximation numérique de l'équation (7.1) s'exprime alors par

$$\Delta^{-1}((1-t)g(t) - t\phi_0) = -A\Delta^{\beta-1}(1-t)^{1-\beta}g(t) \quad (7.3)$$

Décomposons la fonction $(1-t)^{1-\beta}$ en série de Taylor par rapport à t :

$$(1-t)^{1-\beta} = 1 - (1-\beta)t - \dots + (-1)^n \frac{(1-\beta)(-\beta)\dots(2-n-\beta)}{n!} t^n + O(t^n)$$

En reportant dans (7.3) et en identifiant les coefficients des différentes puissances de t on obtient le schéma suivant pour la suite des $\{\phi_j\}$

$$\begin{aligned} \phi_0 &= C(x, t=0) \\ \phi_1(1 - A\Delta^\beta) &= \phi_0 \\ \phi_s(1 - A\Delta^\beta) &= \phi_{s-1}(1 - A(1-\beta)\Delta^\beta) + \\ &+ A\Delta^\beta \sum_{n=2}^{s-1} (-1)^n \phi_{s-n} \frac{(1-\beta)(-\beta)\dots(2-n-\beta)}{n!} \end{aligned} \quad (7.4)$$

Il reste à tenir compte de la discrétisation en espace, représentée par la matrice A . Et sous forme matricielle on a

$$\phi_s = (1 - \beta)\phi_{s-1}B^{-1}C - B^{-1}A \sum_{n=2}^{s-1} \phi_{s-n}(-1)^n \frac{(1 - \beta)(-\beta)\dots(2 - n - \beta)}{n!} \quad (7.5)$$

Les matrices liées à la discrétisation en espace sont A, B, C , définies comme suit

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} b & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & b & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & b \end{pmatrix}, \text{ avec } b = -2 - \frac{h^2}{\Delta^\beta}$$

$$C = \begin{pmatrix} c & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & c & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & c \end{pmatrix}, \text{ avec } c = -2 + \frac{h^2}{(\beta-1)\Delta^\beta}$$

Maintenant, si la multiplication $B^{-1}C(1 - \beta)$ à (7.5) donne une matrice positive et ses valeurs propres sont moins que 1, le schéma numérique est stable et la suite $\{\phi_j\}$ converge vers la solution $C(x, t)$ de l'équation (7.1).

7.4 Comparaison

En milieu infini, on dispose de la solution exacte en forme de fonction de Fox. Nous avons effectué quelques simulations montrant la différence entre les solutions de l'équation fractionnaire et l'équation de Fick ($\beta = 1$). En figures 7.1 et 7.2 on montre les simulation pour l'équation (4.9) avec différentes valeurs de β à partir de l'impulsion initiale Dirac. La courbe violette correspond à la solution de l'équation de Fick ($\beta = 1$) et on peut observer l'effet de sous-diffusion en comparant cette courbe avec les autres ajustements pour β fractionnaire.

Nous avons observé les résultats similaires aux résultats de R.Metzler et J.Klafter [51], R.Gorenflo et F.Mainardi[22]. Par ailleurs, nous avons testé la méthode numérique en comparant avec les résultats analytiques correspondant au domaine spatial borné évoqué au paragraphe 7.2. La figure 7.3 montre la comparaison entre les deux.

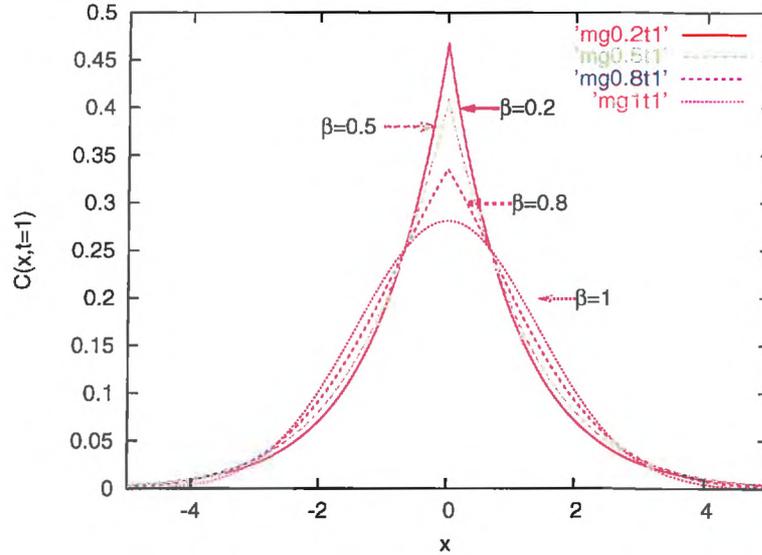


FIG. 7.1 – Solutions analytique de l'équation (4.9) pour différentes valeurs de β pour $t = 1$. La donnée initiale est l'impulsion de Dirac en $x = 0$.

Des comparaisons similaires ont été effectuées en milieu infini, à partir d'une donnée initiale qui est une impulsion de Dirac. Les résultats correspondent aux figures 7.4 et 7.5 et sont en mauvais accord à cause de la discontinuité de la solution à l'endroit du pic initial.

7.5 Condition reflective et advection

L'invariance Galiléenne de l'équation de convection-dispersion (4.14) permet d'obtenir le cas $v \neq 0$ à partir du cas $v = 0$ dans un milieu infini par translation de la variable spatiale (Metzler et al., 2000 [51]). Mais ceci est faux pour un milieu semi-infini avec la condition de Neumann $\partial_x C(x, t) = 0$ à l'origine $x = 0$. A partir de l'impulsion initiale $\delta(x - x_0)$, on a la solution $C(x, t)$ de l'équation (4.14) sur le semi-espace $(0, +\infty)$, qui vérifie

$$C(x, t) = C^*(x - x_0 - vt, t) + C^*(-x - x_0 - vt, t) \quad (7.6)$$

où $C^*(x, t)$ est la solution de (4.9) dans l'espace entier.

La conservation de la masse est respectée.

Les solutions de (4.14) avec cette condition à la limite sont présentées en figure 7.6 sans advection et avec advection en figure 7.7.

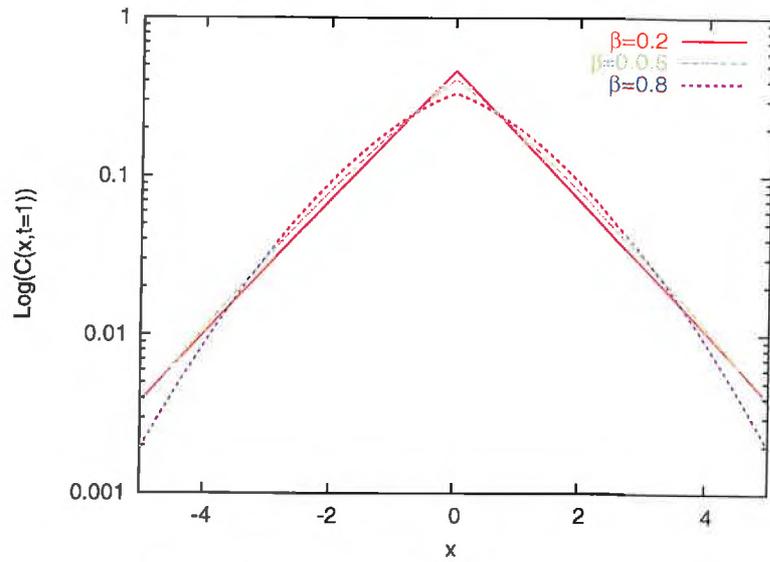


FIG. 7.2 – Solutions analytiques de l'équation (4.9) pour différentes valeurs de β en l'échelle logarithmique pour $t = 1$. La donnée initiale est l'impulsion de Dirac en $x = 0$.

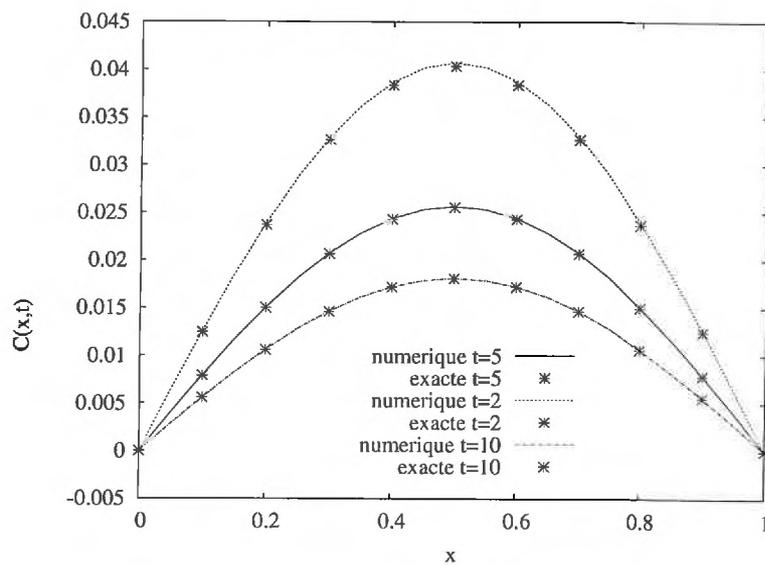


FIG. 7.3 – La solution de l'équation (4.9) avec la donnée initiale $C(x, 0) = \sin(\pi x)$. La simulation numérique (traits pleins) est comparée avec la solution exacte (symboles) pour $\beta = 0.5$.

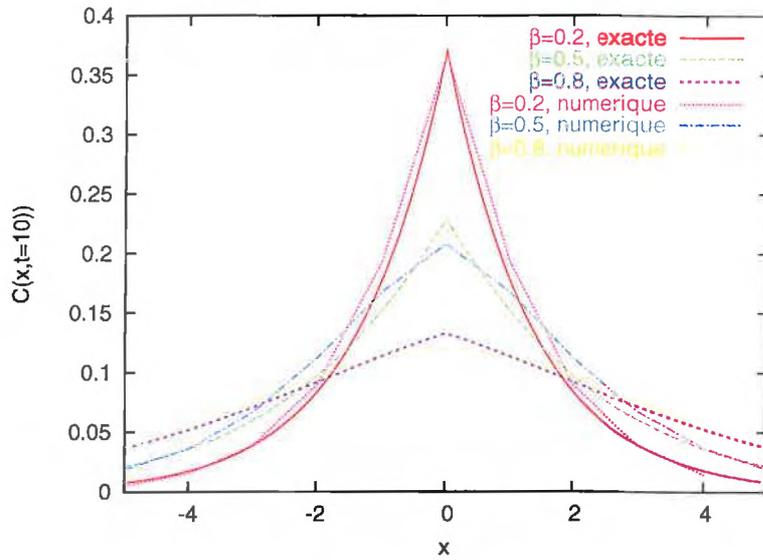


FIG. 7.4 – Solution numérique en milieu infini en comparaison avec la solution exacte pour trois valeurs de β , pour $t = 10$, et condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$ placé en $x = 0$.

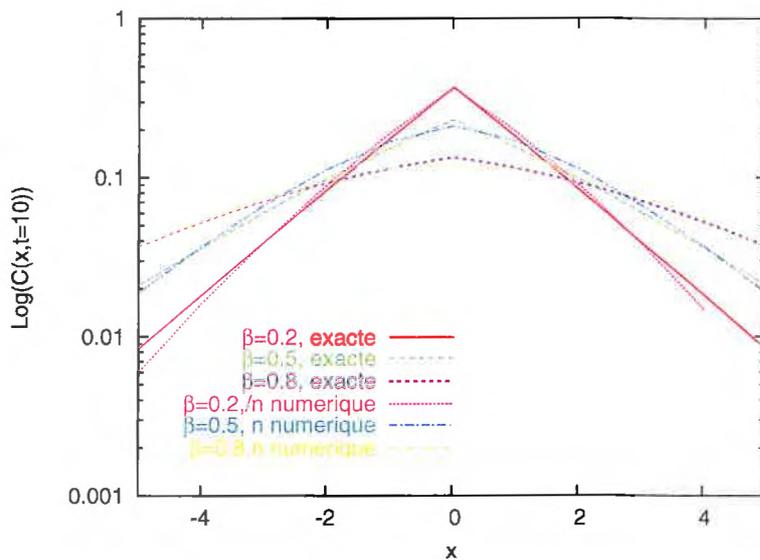


FIG. 7.5 – Solutions numérique en milieu infini en comparaison avec la solution exacte pour trois valeurs de β , pour $t = 10$ et condition initiale $C(x, 0) = \delta(x)$ placée en $x = 0$ (échelle logarithmique).

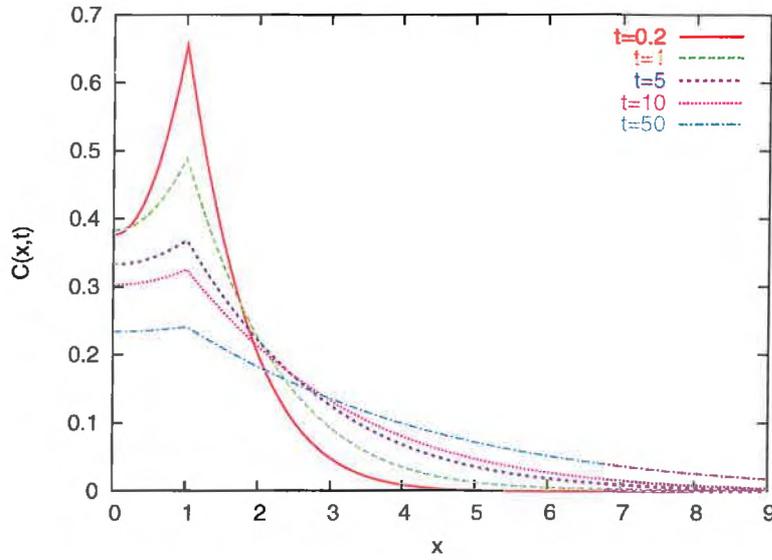


FIG. 7.6 – Solution de (4.9) dans un milieu demi-infini avec $\partial_x C(0, t) = 0$ et $v = 0$ à partir de la relation (7.6) en utilisant pour $C^*(x, t)$ une solution de (4.9) sous la forme du fonction de Fox, pour $\beta = 0.5$, et l'impulsion initiale de Dirac en $x = 1$.

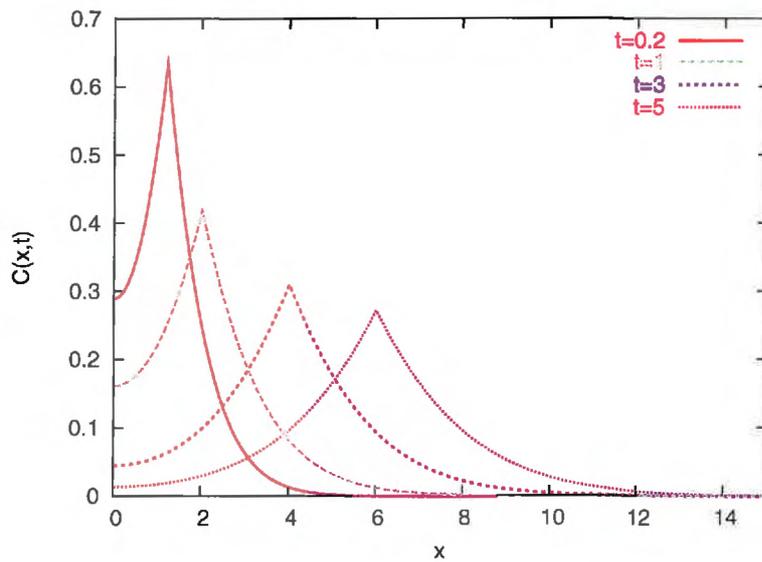


FIG. 7.7 – Solution de (4.9) dans un milieu semi-infini avec $\partial_x C(0, t) = 0$ et $v = 1$ en utilisant la méthode analytique fondée sur les fonctions de Fox, pour $\beta = 0.5$, et l'impulsion initiale de Dirac en $x = 1$, en utilisant la relation (7.6).

Chapitre 8

Conclusions et perspectives

La motivation de cette thèse, évoquée dans l'introduction, a été de contribuer à quelques questions fondamentales en relation avec la modélisation du transport de traceurs passifs en milieux poreux hétérogènes. On s'est placé dans le cadre des équations aux dérivées partielles incluant des dérivées fractionnaires qui généralisent l'équation de convection-dispersion classique. L'approche fractionnaire apparaît, aujourd'hui, comme une voie prometteuse pour mieux décrire le transport en milieux complexes. Cette approche règle, notamment, le problème de la dépendance d'échelle des coefficients de transport et, en particulier, du coefficient de dispersion.

La littérature sur les approches fractionnaires est très vaste et concerne des domaines très variés comme la finance, la physique du solide, la mécanique quantique, la cosmologie, les milieux poreux, sans oublier le développement de l'analyse fractionnaire lui-même, qui représente actuellement une branche en plein essor des mathématiques. Dans ce cadre, on a réalisé une synthèse bibliographique en se focalisant sur certains aspects, notamment les marcheurs aléatoires en temps continu et leur relation avec les modèles fractionnaires. On est conscient de l'insuffisance de cette démarche, et du caractère un peu fragile d'hypothèses traduites en termes du mouvement supposé de particules impossibles à identifier.

Pour mieux avancer dans la construction d'une théorie du transport en milieux complexes, d'autres approches complémentaires doivent être explorées. Ainsi, on est persuadé que l'approche dynamique généralisant les équations de Langevin et conduisant à des formulations stochastiques d'Îto-Ornstein-Uhlenbeck, et l'approche de relativité d'échelle de Nottale (2003) [59], peuvent, toutes deux, donner de nouveaux éclairages sur les lois de transport en milieux hétérogènes et compléter l'approche utilisée dans cette thèse.

On a essayé d'aborder quelques aspects qui nous semblaient essentiels pour avancer

dans la compréhension des modèles fractionnaires et leur application à des situations réelles.

La question du traitement des conditions aux limites dans des équations différentielles avec des opérateurs non locaux est encore plus importante que lorsqu'on a affaire uniquement à des opérateurs différentiels. En effet, le mouvement brownien suffit à expliquer l'équation classique CDE. Dès que la frontière est très éloignée devant la variance associée à une telle marche au hasard, ce qui s'y passe peut être traité plus ou moins à part. C'est bien différent pour des dérivées partielles qui correspondent, à petite échelle, au mouvement de particules capables de réaliser des longs sauts avec une probabilité qu'on ne peut pas négliger. Il a été possible de préciser ce point dans le cadre des vols de Lévy et des généralisations de l'équation CDE incluant une dérivée de Riesz-Feller. Pour cela, il a fallu préciser la nature, à petite échelle, de l'interaction entre les particules et une frontière. On s'est particulièrement intéressé à une barrière infranchissable. Cependant le modèle que nous avons utilisé pour l'interaction avec les particules n'est pas le seul possible et d'autres doivent être envisagés. La non localité de l'opérateur de Riesz-Feller implique ainsi que les conditions aux limites interagissent avec l'opérateur lui-même. Ce couplage peut induire une modification du noyau de l'opérateur, comme on l'a montré pour le cas d'un mur réfléchissant dans le milieu. Ce fait est un inconvénient, car il y aurait autant de modèles fractionnaires que de conditions aux limites différentes imposées. De plus, les différentes définitions des dérivées temporelles sont intimement liées aux conditions initiales. Lorsque on passe à la variante des dérivées fractionnaires correspondantes ayant un domaine d'intégration infini, ces différences s'estompent.

Récemment, Kolwankar et Gangal (1996) [34] ont défini un opérateur fractionnaire à partir de l'opérateur fractionnaire de Riemann-Liouville mais qui est un opérateur local. Analyser la possibilité d'utiliser ce type d'opérateur fractionnaire nous semble une voie pertinente de recherche que nous comptons explorer à court terme.

Il a fallu développer des schémas numériques adaptés aux divers domaines, en particulier lorsque il est impossible de traiter indépendamment les opérateurs fractionnaires et les dérivées au bord. Lorsque on s'intéresse à des équations mêlant advection et dispersion, on ne dispose pas de solutions analytiques. On a obtenu des solutions numériques de l'équation fractionnaire en espace avec et sans flux convectif dans un domaine semi-infini limité par un mur réfléchissant. Afin de les tester, on a comparé les solutions numériques avec les résultats d'une méthode de Monte Carlo conduisant à une densité de probabilité qui tend vers une solution de l'équation FDE. Ces tests illustrent l'interaction entre les données au bord et le modèle lui-même. Ils permettent

de retrouver le résultat théorique principal du chapitre 5, montrant qu'une condition à la limite peut influencer l'opérateur fractionnaire présent dans le modèle. Ces résultats ont été obtenus en dimension 1, et peuvent servir de base pour aller vers des dimensions supérieures. Des méthodes de discrétisation sont disponibles pour cela. On peut s'attendre à ce que l'interaction avec un mur induise une anisotropie dans le modèle.

De plus, on a réalisé la mise en œuvre numérique d'une équation fractionnaire en temps. Le cas des équations avec dérivées fractionnaires temporelles et spatiales n'a pas été abordé par manque de temps, mais on l'envisage dans un futur proche.

On s'est intéressé aux modèles de marcheurs aléatoires en temps continu comme approche microscopique conduisant, dans la limite macroscopique, aux équations en dérivées fractionnaires. Cette vision microscopique nous a permis d'analyser les distributions de probabilité qui conduisent aux équations fractionnaires. Il reste cependant à étudier dans quelles conditions la géométrie du milieu et les autres mécanismes physiques en jeu conduisent à des distributions de probabilités différentes de la loi normale.

La relation entre l'ordre fractionnaire des dérivées fractionnaires temporelles ou spatiales et l'hétérogénéité du milieu est une question importante à résoudre surtout pour les applications aux situations réelles. L'approfondissement de cette voie de recherche conduira à déterminer les conditions d'application de ces modèles à un milieu donné. Si quelques hypothèses permettent d'envisager des réponses, celles-ci sont pour l'instant qualitatives et la question reste ouverte.

Bibliographie

- [1] M. Abramowitz, I.I. Stegun, Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs, and mathematical tables, *New York : Dover*, 1965.
- [2] E.E. Adams, L.W. Gelhar, Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer, *Water Resour. Res.* *28*, pp 3293-3307, 1992.
- [3] D.A. Benson, S.W. Wheatcraft and M. Meerschaert, The fractional order governing equation of Lévy motion, *Water Resource Reseach*, vol. 36, N6, pp 1413-1423, 2000.
- [4] D.A. Benson, PhD, The Fractional Advection-Dispersion Equation : Development an Application, 1998.
- [5] C. Beigel and L. Di Pietro, Transport of Trifluralin in Homogeneous Soil Columns : Influence of Nonequilibrium Sorption, *Soil Science Society of America Journal*, vol. 63, N5, 1999.
- [6] B. Berkowitz, J. Klafter, R. Metzler and H. Scher, Physical pictures of transport in heterogeneous media : advection-dispersion, random walk, and fractional derivative formulations, *Water Resources Research* *38(10) :1191*, 2002
- [7] J.P. Bouchaud and A. Georges, Anomalous diffusion in disordered media : statistical mechanisms, models and physical applications, *Physics Reports* *195*, N4-5, pp 127-193, 1990.
- [8] P.L. Butzer and U. Westphal, An introduction to fractional calculus In : Applications of Fractional Calculus in Physics (R. Hilfer, ed.), *World Scientific Publ. Co., Singapore*, 2000, pp. 1-85
- [9] A.Compte, Stochastic foundations of fractional dynamics, *Phys.Rev.E*, vol. 53, N4, 1996.
- [10] A. Compte, Continuous time random walks on moving fluids, *Physical Review E* *55*, N6 ,1997.
- [11] A. Compte, M.O. Caceres, Fractional dynamics in random velocity fields, *Phys. Rev. Lett.* *81*, pp 3140-3143, 1998.

- [12] J.H. Cushman, Diffusion in porous fractal media : Water Resour Res V27, N4, April 1991, P643-644 , International Journal of Rock Mechanics and Mining Science and Geomechanics Abstracts, Volume 28, Issue 6, November 1991, Page A346
- [13] J.H. McCulloch, Precise tabulation of the maximally-skewed stable distributions and densities, Computational Statistics and Data Analysis, 1966.
- [14] K. Falconer, Fractal geometry, *Mathematical Foundations and Applications*, Wiley, New York, 2003.
- [15] W. Feller, An Introduction to probability theory and its applications, vol II J.Wiley and sons, New York 1966.
- [16] G. J. Fix and J. P. Roop, Least squares finite element solution of a fractional order two-point boundary value problem, *Comput. Math. Appl.*, 48, pp. 1017-1044, 2004.
- [17] J.E. Gillis, G.H. Weiss, Expected number of distinct sites visited by a random walk with an infinite variance, *J. Math. Phys.* 11, 1970, pp. 1307-1312.
- [18] B.V. Gnedenko and A.N.Kolmogorov, Limit distributions for sums of independent variables, *Addison-Wesley*, 1968.
- [19] R. Gorenflo, Fractional calculus : some Numerical Methods, in “Fractals and fractional calculus in continuum mechanics” , ed. A.Carpinteri and F.Mainardi, pp 227-290, *CISM Courses and Lectures N378, International Center for Mechanical Sciences, Spinger Wien-New York*, 1997.
- [20] R. Gorenflo, F. Mainardi, Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics, *Springer, Wien*, p 223, 1997.
- [21] R. Gorenflo and F. Mainardi, Fractional Calculus, Integral and Differential Equations of Fractional Order, *A. Carpinteri and F. Mainardi (Editors), "Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics", Springer Verlag, Wien and New York*, 1997, pp. 223-276, [Vol. no 378, series CISM Courses and Lecture Notes, ISBN 3-211-82913-X]
- [22] R. Gorenflo, F. Mainardi, Discrete random walk models for space-time fractional diffusion, *Chemical physics* 284, 2002, pp 521-541.
- [23] R. Gorenflo et F. Mainardi, Non-Markovian random walks models, scaling and diffusion limits, 2nd conference on Lévy processes : Theory and Applications, *MaphySto Center*, 2002.
- [24] R. Gorenflo, F. Mainardi, Random walk models approximating symmetric space-fractional diffusion processes, *J. Elschner, I. Gohberg, B. Silbermann (Eds.), Problems in Mathematical Physics, Birkhäuser Verlag, Basel*, 2001, pp. 120-145.

- [25] R. Gorenflo, G. De Fabritiis, F. Mainardi, Discrete random walk models for symmetric Lévy-Feller diffusion processes, *Physica A* 269, 1999, pp. 79-89.
- [26] R. Gorenflo, F. Mainardi, Approximation of Lévy-Feller diffusion by random walk, *J. Anal. Appl. (ZAA)* 18, 1999, pp. 231-246.
- [27] R. Gorenflo, F. Mainardi, Random walk models for space-fractional diffusion processes, *Fractional Calculus Appl. Anal.* 1, 1998, pp. 167-191
- [28] R. Gorenflo, F. Mainardi, Fractional diffusion processes : probability distributions and continuous time random walk, *G. Rangarajan, M. Ding (Eds.), Long Range Dependent Processes : Theory and Applications, Springer, 2003*, pp. 148-166.
- [29] R. Gorenflo, F. Mainardi, D. Moretti, G. Pagnini, P. Paradisi, Discrete random walk models for space-time fractional diffusion, *Chem. Phys.* 284, 2002, pp. 521-544.
- [30] R. Gorenflo, F. Mainardi, D. Moretti et P. Paradisi Time fractional diffusion : a discrete random walk approach, *Nonlinear Dynamics* 29, pp. 129-143, 2002.
- [31] B.I. Herny, S.L. Wearne, Fractional reaction diffusion, pp 448-455, *Physica A* 276, 2000.
- [32] R. Hilfer, Fractional Diffusion based on Riemann-Liouville fractional derivatives, *J.Phys. Chem. B* 104, pp 3914-3917, 2000
- [33] V. Kiryakova. Generalized Fractional Calculus and Applications. Pitman Research Notes in Math. Series No 301 : Longman Sci. and Technical , UK (Copubl. with John Wiley and Sons, Inc., USA) . 1994, 402 p., ISBN 0-582-21977-9.
- [34] K.M. Kolwankar et A.D. Gangal, Fractional Differentiability of Nowhere Differentiable Functions and Dimensions, *Chaos* 6, 505, 1996.
- [35] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, Statistical Physics II. Nonequilibrium Statistical Mechanics, *Springer-Verlag, New York*, 1995
- [36] P. Lévy, Théorie de l'addition des variables aléatoires, *Gauthier-Villars, Paris*, 1937.
- [37] M. Levy, B. Berkovitz, Measurement and analysis of non-Fickian dispersion in heterogeneous porous media, *Journal of Contaminant Hydrology* 64, pp. 203-226, 2003.
- [38] C. Lubich, Discretized Fractional Calculus, *SIAM J Math. Anal.* 17 n3, 1986.
- [39] C. Lubich, Convolution quadrature and discretized operational calculus, *J Numer.Math.* 52, pp. 129-145, 1988.

- [40] C. Lubich, Convolution quadrature and discretized operational calculus II, *Numer. Math* 52, pp. 413-423, 1988.
- [41] J.C.Lopez-Marcos, A difference scheme for a nonlinear partial integro-differential operator, *SIAM J. Numer. Anal.* vol 27 n 1, pp. 20-31, 1990.
- [42] V. Lynch, B.A. Carreras, D. del-Castillo-Negrete, K.M. Ferreira-Mejias, and H.R. Hicks, Numerical methods for the solution of partial differential equations of fractional order, *J. Comput. Phys.* 192/2, 406, 2003
- [43] D.A. Mc Quarrie, Statistical Mechanics, *University Science Books, California*, 2000.
- [44] F. Mainardi, M. Raberto, R. Gorenflo, E. Scalas, Fractional calculus and continuous-time finance II : the waiting time distribution, *Physica A* 287, pp. 468-481, 2000.
- [45] F. Mainardi, Yu. Luchko and G. Pagnini, The fundamental solution of the space-time fractional diffusion equation, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, Vol. 4 No 2, 2001, pp. 153-192.
- [46] PH. Martin, Physique statistique des processus ineversibles. Cours de Physique statistique et phénomènes non linéaires, *Ecole Normale Supérieure de Lyon*, 2001.
- [47] G. Matheron and G. de Marsily, Is transport in porous media always diffusive? A counterexample, pp 901-917 *W.R.R.*, 16, N5, 1980.
- [48] M.M. Meerschaert, D.A. Benson and B. Baeumer, Operator Lévy motion and multiscaling anomalous diffusion, *Phys.Rev.E*, 2000.
- [49] M.M. Meerschaert, D.A. Benson, Stochastic solution of space-time fractional diffusion equations, *Phys. Rev. E* 65, 2002, pp. 1103-1106.
- [50] M.M. Meerschaert, C. Tadjeran, Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 172, 2004, pp. 65-77.
- [51] R. Metzler, J. Klafter, The random walk's guide to anomalous diffusion : a fractional dynamics approach, pp 1-77 *Physics Reports* 339, 2000.
- [52] K.S. Miller, B. Ross, An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations, *New York : Wiley*, 1993.
- [53] R. Metzler, J. Klafter and I.M. Sokolov, Anomalous transport in external fields : Continuous time random walks and fractional diffusion equations extended, *Phys. Rev. E* 58, pp 1621, 1998.

- [54] R. Metzler et al., The restaurant at the end of the random walk : recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics, *J. Phys. A : Math. Gen.* 37 R161-R208, 2004.
- [55] E.W. Montroll and H. Scher, Random walks on lattices. IV. Continuous-time walks and influence of absorbing boundaries, *J. Stat. Phys.* 9, 101, 1973.
- [56] E.W. Montroll, B.J. West, On an enriched collection of stochastic processes, in Fluctuation Phenomena, *Studies in Statistical Mechanics VIII*, 61, 1979.
- [57] E.W. Montroll, G.H. Weiss, Random walks on lattices. II, *J. Math. Phys.* 6(2), 167, 1965.
- [58] J.P. Nolan, An Algorithm for Evaluating Stable Densities in Zolotarev's (M) Parametrization, pp 229-233 *Mathematical and Computer Modelling* 29, 1999.
- [59] L. Nottale, Fractal Space-Time, Nondifferentiable Geometry and Scale Relativity, *AMS/SMF Meeting, ENS Lyon, 17-20 July 2001*, 2003
- [60] K.B. Oldham, J. Spanier, The Fractional Calculus : Integrations and Differentiations of Arbitrary Order, *New York : Academic Press*, 1974.
- [61] Ya. Pachepsky, D. Benson, Simulating Scale-Dependent Solute Transport in Soils with the Fractional Advective-Dispersive Equation, pp 1234-1243, *SOIL. SCI. SOC AM.J* 64, 2000.
- [62] Ya. Pachepsky, D. Timlin, Generalized Richards' equation to simulate water transport in unsaturated soils, *Journal of Hydrology* 272, 2003.
- [63] P. Paradisi, R. Cesari, F. Mainardi, F. Tampieri, The fractional Fick's law for non-local transport processes, *Physica A*, 293, pp. 130-142, 2001.
- [64] R. Peyret, T.D. Taylor, Computational Methods for fluid flow, *Springer-Verlag*, 1983.
- [65] I. Podlubny, Numerical solution of ordinary fractional differential equations by the fractional difference method, pp 507-516, in *Advances in Difference Equations*, ed. S. Elaydi, I. Gyoriard, G. Ladas, Gordon Breach, 1997.
- [66] A.P. Prudnikov, Yu.A. Brychkov, O.I. Marichev, Evaluation of Integrals and the Mellin Transform, *Itogi Nauki i Tekhniki, Seriya Matemat. Analiz* 27, pp 3-146, 1989.
- [67] B. Rubin, Fractional integrals and potentials, *Pitman Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics*, 82. Longman, Harlow. xiv+409 pp. ISBN : 0-582-25341-1, 1996.

- [68] S.G. Samko, A.A. Kilbas and O.I. Marichev, Fractional integrals and derivatives : theory and applications, *Gorden and Breach*, New York, 1993.
- [69] G. Samorodnitsky G., Possible sample paths of self-similar α -stable processes, *Statistics and Probability Letters*, Vol 19 Issue 3,22, pp 233-237, 1994.
- [70] E. Scalas, R. Gorenflo, F. Mainardi, Uncoupled Continuous Time Random Walk : solution and limiting behaviour of the master equation, *Physical Review E* vol 69, 2004.
- [71] W.R. Schneider, Stable Distributions : Fox function representation and Generalization, *Brown Boveri Research Center CH-5405 Baden, Switzerland*.
- [72] J.M. Sanz-Serna, A numerical method for a partial integro-differential equation, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol.25, No.2, April 1988.
- [73] A.A. Stanislavsky, Memory Effects and Macroscopic Manifestation of Randomness, *Phys. Rev. E* 61, Issue 5, pp. 4752-4759, 2000.
- [74] V.M. Zolotarev, One-dimentional stable distributions, *Translations of mathematical Monographs*, vol 65. *American Mathematical Society, Providence, R1*, 1986.
- [75] G. Zumofen, J. Klafter, Absorbing boundary in one-dimensional anomalous transport, *Physical Review E*, vol 51 N4, 1995, pp. 2805-2814.
- [76] R. Weron, Heavy-tailed distributions in value at Risk calculations, *Hugo Steinhaus Center for Stochastic Methods, Wroclaw University of Technology, Poland*.

Annexe A

Un exemple d'interaction entre vols de Lévy et mur réfléchissant

Imaginons des particules identiques dans un champ de force uniforme de direction z (orthogonale à x) et appelons g l'accélération. Supposons que les particules partent du plan $z = 0$ avec des impulsions de vitesse horizontale ayant une composante verticale v_z uniforme, alors que la composante v_x est une variable aléatoire distribuée selon une loi α -stable.

En l'absence de mur chaque particule suit une trajectoire parabolique avant de retourner sur le plan $z = 0$, et la durée du mouvement dû à l'impulsion est $\tau_f = \frac{2\sqrt{z}}{g}$, que nous supposons petite. Loin du mur ou en l'absence de mur, les trajectoires sont comme sur la figure A.1. Avec un mur élastique en $x = 0$, les particules qui l'atteignent

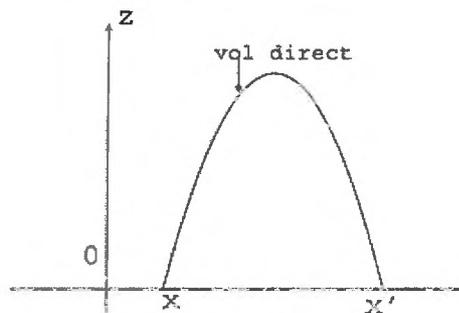


FIG. A.1 – Trajectoire d'une particule en l'absence du mur ou loin du mur.

n'échangent pas d'énergie, et les chocs ne font que changer le signe de la composante horizontale de la vitesse, dans le référentiel du laboratoire. Donc, chaque particule continue après le choc sur une courbe obtenue par symétrie à partir de la parabole initiale, comme sur la figure A.2. Pour une particule qui est en x' à l'instant t' , la probabilité d'atteindre $]x, x + dx[$ en sautant et en heurtant le mur pendant $]t', t' + dt'[$

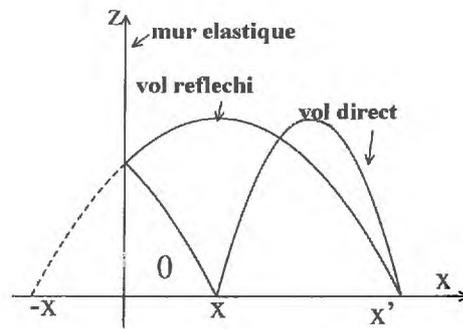


FIG. A.2 – Trajectoire d'une particule en l'absence du mur ou loin du mur.

est $\rho(-x - x')dxdt'$ en l'absence d'advection.

Annexe B

Equivalence entre (5.4) et (5.5)

Compte tenu de $\Lambda(x, x') = \rho(x - x') + \rho(-x - x')$, et de la parité de ρ , en posant $X = x' + v(t - t')$ on obtient

$$\begin{aligned} \int_{x' > 0} C(x', t') T_{v(t-t')} \rho(x - x') dx' &= \int_{X > v(t-t')} C(X - v(t - t'), t') \rho(x - X) dX \\ &= \int_{\mathbb{R}} H(X - v(t - t')) C^*(X - v(t - t'), t') \rho(x - X) dX = \int_{\mathbb{R}} T_{v(t-t')} [HC^*](X, t') \rho(x - X) dX, \end{aligned}$$

puisque C^* est paire. De même, avec $X' = -x' + v(t - t')$ on a

$$\int_{x' > 0} C(x', t') T_{v(t-t')} \rho(-x - x') dx' = \int_{X' < v(t-t')} C(-X' + v(t - t'), t') \rho(x - X') dX'.$$

Comme C^* est paire, cette expression n'est autre que $\int_{X' < v(t-t')} C^*(X' - v(t - t'), t') \rho(x - X') dX'$, aussi égal à

$$\int_{\mathbb{R}} [(1-H)C^*](X' - v(t - t'), t') \rho(x - X') dX' = \int_{\mathbb{R}} T_{v(t-t')} [(1-H)C^*](X', t') \rho(x - X') dX'.$$

Donc (5.4) équivaut à

$$C(x, t) = \delta_{x_0 + vt}(x) (1 - \int_0^t w(t') dt') +$$

$$\int_{t'=0}^t H(x - v(t - t')) \int_{y \in \mathbb{R}} [T_{v(t-t')} C^* + T_{v(t-t')} ((1-H)C^*)](y, t') \rho(x - y) w(t - t') dy dt'$$

pour $x > 0$. ci-dessus, Au second membre de l'expression ci-dessus, l'intégrale par rapport à y est $[T_{v(t-t')} C^* *_{\mathbb{F}} \rho](x, t)$, et l'intégrale double est égale à

$$\int_{t'=0}^t w(t - t') T_{v(t-t')} (H[C^* *_{\mathbb{F}} \rho]) dt'.$$

Comme le support de $T_{v(t-t')} (H[C^* *_{\mathbb{F}} \rho])$ est inclus dans $[v(t - t'), +\infty[$ et que sa symétrisée est $T_{-v(t-t')} ((1-H)[C^* *_{\mathbb{F}} \rho])$, l'équivalence entre (5.4) et (5.5) est démontrée.

Annexe C

La limite du second membre de (5.8)

Le second membre de (5.8) contient trois termes. Le premier est $\frac{Au-D}{A}\widehat{C}^*(k, u)$ avec

$$\frac{Au-D}{A} = (e^{-|lk|^\alpha} - 1)\tau^{-1} - \frac{\tau(kv)^2}{1+\tau u}.$$

Considérons tout d'abord $(e^{-|lk|^\alpha} - 1)\tau^{-1}$. Pour β dans $[1, 2]$, la fonction h_β , définie par $h_\beta(X) = (e^{-X} - 1 + X)X^{-\beta}$ est continue, à valeurs positives, et est bornée par, disons, M_β sur $[0, +\infty[$. Elle se comporte comme $X^{2-\beta}$ près de 0, et comme $X^{1-\beta}$ au voisinage de $+\infty$. Pour α entre 1 et 2, posons $\beta = 1 + \alpha^{-1} + \varepsilon$, avec ε positif mais petit. Alors, $\widehat{w}_{\alpha,\beta}(k) \equiv h_\beta(|k|^\alpha)$ est une fonction continue et bornée de k , qui appartient à $L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$. Donc c'est la transformée de Fourier d'une fonction $w_{\alpha,\beta}$ et nous avons

$$e^{-|lk|^\alpha} - 1 = -|lk|^\alpha + |lk|^{\alpha\beta}\widehat{w}_{\alpha,\beta}(lk),$$

de sorte que $\frac{Au-D}{A}\widehat{C}^*(k, u) - K\nabla^{\alpha}\widehat{C}^*(k, u)$ est la transformée de Fourier de $l^{1+\alpha\varepsilon}$ fois la convolution (Fourier) de $-K\nabla^{\alpha+1+\alpha\varepsilon}C^*$ par $w - \alpha, \beta(x/l)$. Cette dernière expression tend vers zéro en même temps que l .

Considérons maintenant $\frac{\tau(kv)^2}{1+\tau u}\widehat{C}^*(k, u)$ qui est la transformée de Fourier-Laplace de $v^2e^{-t/\tau}\partial_x^2C^*$, qui tend vers zéro en même temps que l et τ . Donc le terme avec $\widehat{C}^*(k, u)$ au second membre de (5.8) est $-K|k|^\alpha\widehat{C}^*(k, u)$, plus une correction qui tend vers zéro avec (l, τ) lorsque, en plus, on a $l^\alpha\tau^{-1} = K$.

Pour le second terme, c'est

$$\frac{B}{A}\sin kx_0 = \frac{\tau kv}{1+\tau u}\sin kx_0 = ve^{-t/\tau}\partial_x(\widehat{\delta_{x_0} - \delta_{-x_0}}).$$

Donc $\frac{B}{A}\sin kx_0$ est la transformée de Fourier-Laplace d'une quantité qui est petite dans le cadre de la limite diffusive.

Le troisième terme au second membre de (5.8) est

$$\frac{G}{A} [\hat{\rho} \tilde{C}^*] *_F \frac{1}{ik} = \frac{-2ikve^{-|k|^\alpha}}{1 + \tau u} [\hat{\rho} \tilde{C}^*] *_F \frac{1}{ik},$$

où nous reconnaissons π fois la transformée de Hilbert de $[\hat{\rho} \tilde{C}^*]$, multipliée par $-2ik$.
Donc c'est

$$-2ik([\hat{\rho} \tilde{C}^*] *_F \frac{1}{ik}) = \frac{2}{ik} *_F (-ik \widehat{\rho *_F \tilde{C}^*}) - 2(\rho *_F \tilde{C}^*)(0, u),$$

à son tour égale à la transformée de Fourier de

$$-sgn(x)((\partial_x \tilde{C}^*) *_F \rho) - 2(\rho *_F \tilde{C}^*)\delta.$$

Donc $\frac{G}{A} [\hat{\rho} \tilde{C}^*] *_F \frac{1}{ik}$ est la transformée de Fourier-Laplace de

$$-vsgn(x)[(\partial_x C) *_F \rho] *_L w - 2v(\rho *_F \tilde{C}^*)\delta *_L w.$$

Quand l et τ tendent vers zéro, l'expression ci-dessus tend vers $-v\partial_x C(x, t)$.

Annexe D

Mise en oeuvre des modèles de marcheurs aléatoires

On présente ici des modèles de marcheurs aléatoire unidimensionnels qu'on a mis en oeuvre pour réaliser des comparaisons avec les solutions numériques des modèles fractionnaires. Les modèles développés sont :

1. une marche au hasard avec pas de temps discret, distribution de longueur des sauts α -stable, $\alpha \in (1, 2)$, avec ou sans terme convectif.
2. une marche au hasard avec distribution des temps d'attente β -stable, $\beta \in (0, 1)$, et distribution de longueur des sauts α -stable, $\alpha \in (1, 2)$, sans terme convectif.

Cas 1 : La trajectoire aléatoire du marcheur est construite comme la somme des nombreux sauts indépendants, se réalisant à des pas de temps $n\tau$, avec $n = 1, 2, \dots$. La longueur de chaque saut est tirée au hasard selon une loi α -stable avec $\alpha \in (1, 2)$. Pour le tirage au hasard, on a utilisé l'algorithme de Zolotarev (cité par R.Weron [76] et J.P.Nolan [58]). Cet algorithme est fondé sur le théorème suivant :

Théorème : Soient θ et W deux VA indépendantes, telles que θ soit distribuée uniformément dans l'intervalle $(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, et que W soit distribuée exponentiellement avec moyenne 1 et soit $1 < \alpha < 2$. Alors la VA

$$Z = \begin{cases} \frac{\sin(\alpha\theta)}{(\cos\theta)^{1/\alpha}} \left[\frac{\cos(\alpha-1)\theta}{W} \right]^{(1-\alpha)/\alpha}, & \alpha \neq 1 \\ \operatorname{Tg}\theta, & \alpha = 1 \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

est distribuée selon une loi α -stable symétrique.

Le programme a été implémenté sur Mathematica en utilisant les simulateurs de distribution uniforme et exponentielle du logiciel.

On réalise Q simulations des trajectoires de n sauts de longueur Z en suivant la paramétrisation (D.1). La position x d'une particule au temps $n\tau$ est la somme des n sauts $x = \sum_{j=1}^n Z_j$. La probabilité de trouver une particule dans la position x , au temps $t = n\tau$ est calculée par le nombre de marcheurs arrivés dans l'intervalle $(x \pm 0.5h)$ où h est un pas d'espace choisi pour calculer la distribution fréquentielle du nombre des particules. La fonction de densité est la probabilité divisée par Qh .

Cette procédure est réalisée à l'aide de Mathematica (code "MCspace.nb"). Quand $Q \rightarrow \infty$, et $(h, \tau) \rightarrow 0$ la distribution normalisée du nombre des particules doit correspondre avec la concentration du soluté. Nos simulations montrent (la figure D.1) que pour $Q = 15000$, les fluctuations sont visiblement atténuées. Elle est faite avec $h = 0.2$, $\tau = 0.1$. Si h, τ sont plus petits, alors Q doit être augmenté.

Pour simuler un terme convectif, on ajoute à Z le terme $v\tau$ après chaque tirage de

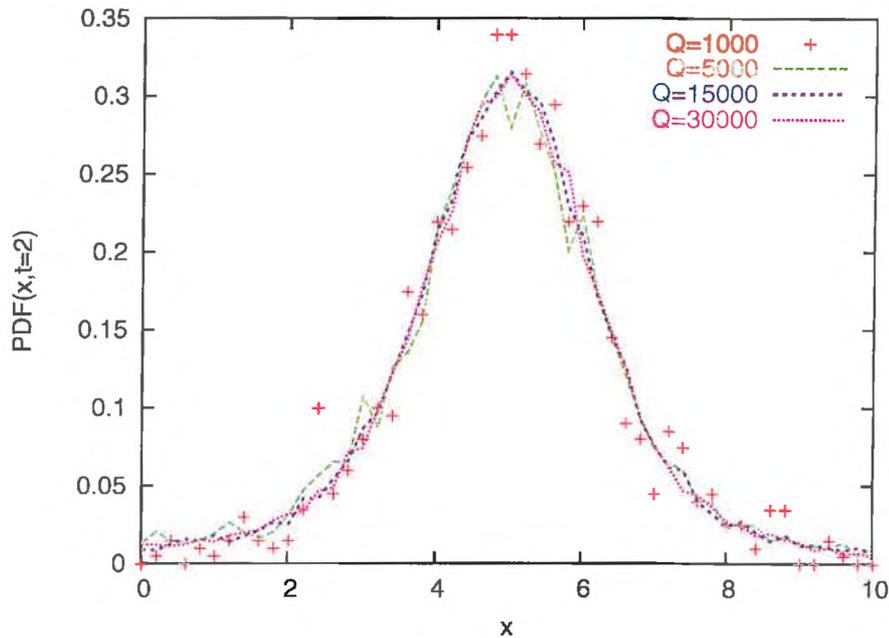


FIG. D.1 – Les histogrammes de Monte-Carlo réalisés avec $Q = 1000, 5000, 15000, 30000$.

longueur de saut, donc la trajectoire de la particule au temps $n\tau$ est $x = \sum_{i=1}^n (Z_i + v\tau)$.

Pour la marche au hasard limitée par un mur réfléchissant en $x = 0$, on prend la valeur absolue de la position après un saut et on ajoute le terme convectif, la position après n saut est $|x + Z| + v\tau$.

La figure D.2 montre le résultat de la simulation numérique, comparé avec les histogrammes obtenus en simulant la marche au hasard. Lorsque τ devient petit, la correspondance est meilleure, comme prévu par le paragraphe 5.5. On remarque que les différences entre les deux méthodes de simulation sont visibles près du mur et au

voisinage du pic. En ce qui concerne le pic, ceci peut être dû à un artefact lié au fait que nous utilisons des histogrammes. Si nous réduisons trop la base des histogrammes, ceux-ci risquent d'être vides, et si elle est grande, on écrase le pic.

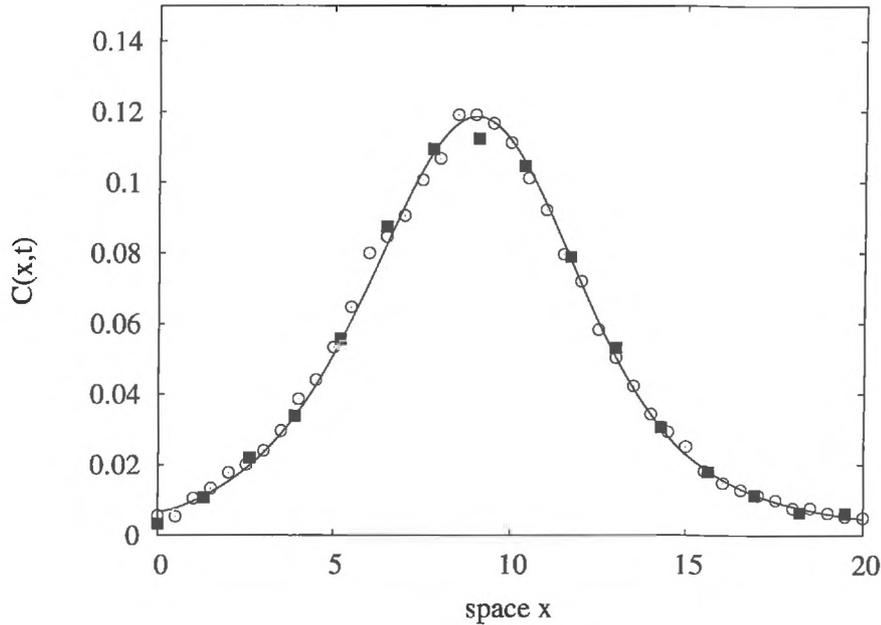


FIG. D.2 – Les carrés - marche aléatoire avec $\tau = 1$, les cercles - marche aléatoire avec $\tau = 0.01$, lignes - solution numérique.

Cas 2 :

La trajectoire aléatoire du marcheur est construite comme dans le *Cas 1*. En plus, les temps τ entre deux sauts sont les VA distribués selon la loi β -stable, $\beta \in (0, 1)$. Nous avons utilisé le même algorithme (D.1) pour tirer les τ ([49]). La position d'une particule après n sauts est calculée par la somme des $Z\tau^{1/\alpha}$. Le temps après n sauts est $t = \sum_{j=1}^n \tau_j$.

Pour calculer la probabilité de trouver une particule en x à l'instant t nous avons dû aussi interpoler les trajectoires en fonction du temps.

Le code réalisé sur Mathematica.

Sur la figure D.3 on montre des histogrammes de marche au hasard effectuée avec $\alpha = 1.5$ et $\beta = 0.5$. La distribution initiale est une Dirac en $x = 0$.

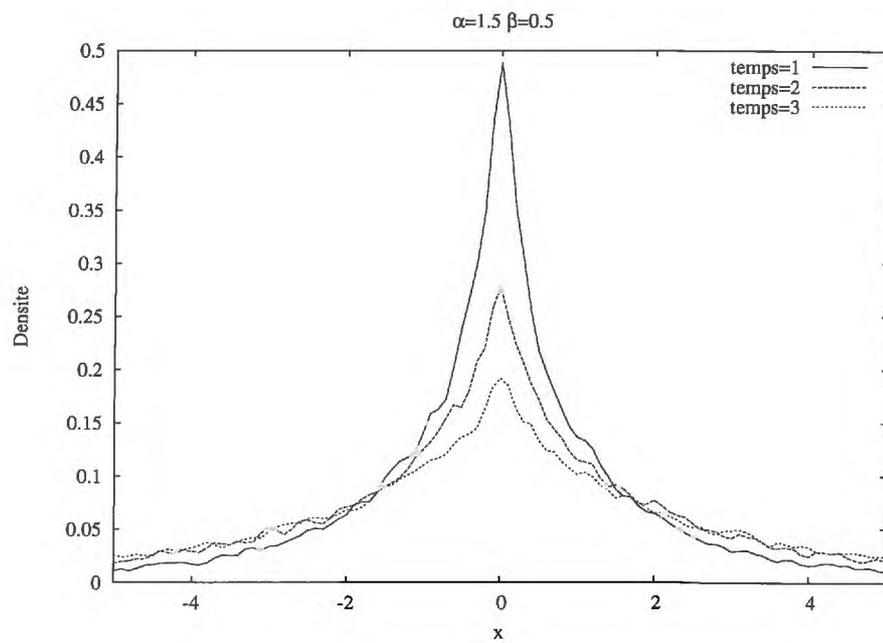


FIG. D.3 – Simulation de Monte-Carlo de marche aléatoires contenant une distribution des longueurs de sauts α -stable et symétrique avec une distribution des temps d'attente β -stable. Ici on a $\alpha = 1.5$ et $\beta = 0.5$.

Annexe E

Mesure et dimension de Hausdorff

Soit X un espace métrique et soit $Y \subset X$.

Pour $d \in \mathbb{R}$ et $\epsilon > 0$, on pose

$$\mu(Y, d, \epsilon) = \inf \sum_i r_i^d$$

où la borne inférieure est pour tous les recouvrements de Y par une famille de boules B_i de X , de rayon $r_i \leq \epsilon$. La fonction $\epsilon \rightarrow \mu(Y, d, \epsilon)$ est décroissante, elle a donc une limite $\mu(Y, d) \in \mathbb{R}^+$ quand $\epsilon \rightarrow 0$, ainsi

$$\mu(Y, d) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mu(Y, d, \epsilon) = \sup_{\epsilon > 0} \mu(Y, d, \epsilon)$$

$\mu(Y, d)$ est la **mesure de Hausdorff**¹ en dimension d de Y .

On peut montrer qu'il existe un nombre réel $d_0 \in \mathbb{R}^+$ tel que $\mu(Y, d) = \infty$ pour $d < d_0$ et $\mu(Y, d) = 0$ pour $d > d_0$. Ce nombre réel $d_0 = \dim_H(Y)$ est appelé **dimension de Hausdorff** de Y .

¹P.Girault, 1987 Attracteurs et dimensions,

Fractals : dimension non entières et applications.

G.Chorbit (eds). Masson, Paris

Annexe F

Les programmes

exactSp.cpp

```
/*La solution exacte de l'équation fractionnaire en espace (4.9)
en forme de l'intégrale en espace infini*/
```

```
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <iostream>
using namespace std;
//Le fichier contenant des fonctions
#include "fonctions.h"

/*=====
Définition des variables:
alpha - l'ordre d'opérateur de Riesz-Feller ( $1 < \alpha < 2$ )
dimen - la taille des matrices
t - la variable temps du modèle
dx - pas d'espace
dim - la dimension de l'intervalle de calcul
v - la vitesse
x - la frontière gauche de l'intervalle du calcul
x0 - le centre de symétrie de l'impulsion initiale de Dirac
integral - la méthode d'intégration
Riesz - le noyau de l'intégration
=====*/
const double alpha=1.5;
```

```

const int dimen=2000;

int main(){
    int i,j, dim=100;
    double x=-5, dx=0.1, x0=0, res, t=3;
    double param[5];
    ofstream stream("exact1.5t3.dat");

    /*on définit la méthode d'intégration sur l'intervalle (0,1000)
    et on l'associe avec le nom Int*/
    integral <double> Int(0,1000);

    for(i=0;i<=dim;i++){
        /*on définit le noyau d'intégration sous le nom f*/
        Riesz <double> f(x);
        /*on intègre la fonction f */
        res=Int(f,param)/pi;
        /* On enregistre le résultat dans le fichier en deux colonnes:
        x et res*/
        stream<<x*pow(t,1./alpha)<<' '<<res/pow(t,1./alpha)<<endl;
        cout<<x<<' '<<res<<endl;
        /*On calcule le x suivant*/
        x+=dx;
    }
    stream.close();
    return 0;
}

```

numSp.cpp

```
/*La réalisation de la méthode (6.9)
La solution numérique de l'équation (4.15)
sur milieu infini*/

#include <cmath>
#include <fstream>
#include <iostream>

using namespace std;
#define dimen 3000
#define double long double
#include "fonctions.h"

/*=====
Définition des variables:
alpha - ordre de l'opérateur de Riesz-Feller ( $1 < \alpha < 2$ )
dimen - la taille des matrices
time - nombre d'itérations en temps
dt - le pas de temps
dx - le pas d'espace
dim - la dimension de l'intervalle de calcul
v - la vitesse
c - la constante c du schémas numérique (6.3)
a_p - le vecteur des coefficients du schéma (6.3)
C - la matrice contenant la solutions pour le temps  $t=1,2,\dots$ 
res - la matrice de résultats locaux:
    res[0] correspond à la variable spatiale x,
    res[1]- le résultat du temps précédant,
    res[2] - le résultat calculé pour le temps suivant
=====*/
const double alpha=1.5;
const double v=0;
double C[dimen][dimen];
double res[3][dimen];
double a_p[dimen];
```

```

int main(){
    double dt=0.01,dx,c,y,e=0.0001,x_der;
    int time=300, j_time=1, i, j, t, dim=0, d_time=100;
    char cc;
    int nach=10;
    double a,bb;
    for(i=0;i<dimen;i++) a_p[i]=0;
    for(j=0;j<dimen;j++)
        for(i=0;i<dimen;i++) C[i][j]=0;
    for(i=0;i<3;i++)
        for(j=0;j<dimen;j++) res[i][j]=0;

    /*On lit la donnée initiale, qui est la solution exacte de t=1*/
    ifstream stream("exact.dat");
    double tr;
    i=0;
    while(stream){
        stream>>res[0][i]>>res[1][i];
        if (!stream) break;
        stream.get(cc);
        while(cc==' '){
            if (!stream) break;
            stream>>tr;
            stream.get(cc);
            if (cc=='\n'){break;}
        }
        dim=i;
        if(dim+1>=dimen)break;
        i++;
    }
    stream.close();
    dim--;
    dx=fabs(res[0][1]-res[0][0]);

    /*On enregistre la donnée initiale*/

```

```

for(i=0;i<dim;i++) {
    C[0][i]=res[0][i];
    C[1][i]=res[1][i];
}
/*On vérifie la condition de la stabilité du schéma*/
if(dt>pow(dx,alpha)*abs(cos(pi*alpha/2.))/(pow(alpha,2)+
    pow(v*cos(pi*alpha/2.)*pow(dx,alpha-1),2)))
    cout<<"La condition du stabilité n'est pas satisfaite.
        Veuillez redéfinir dt"<<pow(dx,alpha)*abs(cos(pi*alpha/2.))/
        (pow(alpha,2)+pow(v*cos(pi*alpha/2.)*pow(dx,alpha-1),2))<<endl;

c=-dt/(2*pow(dx,alpha)*cos(pi*alpha/2.));
ap(a_p, c);

/*On calcule la concentration du temps 1+dt au temps time*dt */
for(t=1;t<=time;t++){
    for(i=0;i<=dim;i++){
        y=res[1][i]*(1+a_p[0]);
        if(i>=1)y+=res[1][i-1]*(a_p[1]+v*dt/(2*dx));
        if(i!=dim) y+=res[1][i+1]*(a_p[1]-v*dt/(2*dx));
        for(j=2;j<=dim;j++){
            if(i+j<=dim) y+=res[1][i+j]*a_p[j];
            if(i-j>=0) y+=res[1][i-j]*a_p[j];
        }
        res[2][i]=y;
    }

/*On augmente l'intervalle de calcul si le résultat à la limite de
l'intervalle du calcul res[2][dim] est devenu plus grand que
la petite constante e*/
if(fabs(res[2][dim-5])>e && dim<dimen-2*nach){
    bb=log(res[2][dim]/res[2][dim-10])/(pow(res[0][dim],2)-
        pow(res[0][dim-10],2));
    a=res[2][dim]*exp(-bb*pow(res[0][dim],2));
    x_der=sqrt(fabs(log(e/a)/bb));
}

```

```

    nach=int(fabs(x_der-res[0][dim])/dx);
    x_der=res[0][0];
    res[0]=res[2];

    for(i=0;i<nach;i++) res[2][i]=0;
    dim+=2*nach;
    for(i=nach;i<dim-nach;i++)res[2][i]=res[0][i-nach];
    for(i=dim-nach;i<=dim;i++)res[2][i]=0;
    res[0][0]=x_der-dx*nach;
    for(i=1;i<dimen;i++)res[0][i]=res[0][i-1]+dx;
}

/*On enregistre le résultat res vers C si t est entier*/
if(t%d_time==0){
for(i=0;i<dimen;i++) {
C[2*j_time+1][i]=res[2][i];
    C[2*j_time][i]=res[0][i];
    }
    cout<<"t="<<1+t*dt<<"    C="<<C[1][0]<<"    dim="<<dim<<endl;
    j_time++;
}
res[1]=res[2];
} //la fin du cycle en temps

/*Ecriture dans le fichier: les colonnes paires correspondent à
la concentration aux temps=1,2,..., les colonnes impaires
correspondent aux x*/
ofstream stream1("numSp1.5.dat");
for(i=0;i<dimen;i++){
    for(j=0;j<j_time;j++) stream1<<C[2*j][i]<<' '<<C[2*j+1][i]<<' ';
    stream1<<C[2*j_time][i]<<' '<<C[2*j_time+1][i]<<endl;
}
stream1.close();
return 0;
}

```

numSpMV.cpp

```
/*La réalisation de la méthode (6.13)
La solution numérique de l'équation (5.10)
avec la condition élastique au limite
et avec/sans le terme d'advection*/

#include <cmath>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <stdio.h>
#include <string>
using namespace std;
#define dimen 5000
#define double long double
const double alpha=1.5;
#include "fonctions.h"
/*=====
Definitions des variables:
alpha - ordre d'opérateur de Riesz-Feller ( $1 < \alpha < 2$ )
dimen - la taille des matrices
time - nombre d'itérations en temps
dt - le pas de temps
dx - pas d'espace
dim - la dimension de l'intervalle de calcul
v - la vitesse
c - la constante c du schémas numérique (6.3)
a_p - le vecteur des coefficients du schéma (6.3)
x - le vecteur de coordonnées en espace
C - la matrice contenant la solution pour les temps  $t=1,2,\dots$ 
res - la matrice de résultats locaux:
    res[0] correspond à la variable spatial x,
    res[1]- le résultat du temps precedant,
    res[2] - le résultat calculé pour le temps suivant
=====*/

double C[210][dimen];
```

```

double x[dimen];
double res[2][dimen];
double b[dimen];
double a_p[dimen];

int main(){
    double v=1;
    double x_der,dt=0.01,dx,c,y,e=0.001;
    int time=1000,t,i,j,p,dim=0,d_time=100,j_time=1;
    char cc;
    int nach=0;
    double a,bb;
    char *nom=new char[30], *nomext=new char[30];
    nom="numSpMV1.5";
    sprintf(nomext,"%s",nom);
    strcat(nomext, ".txt");
    ofstream cout1(nomext);

    for(i=0;i<210;i++)
        for(j=0;j<dimen;j++) C[i][j]=0.;
    for(j=0;j<dimen;j++)x[j]=0.;
    for(i=0;i<2;i++)
        for(j=0;j<dimen;j++)res[i][j]=0.;

    /*On lit la donnée initiale de la fichier "pdf1.5m0v1.dat",
    dont est la solution de t=1, dérivée par la méthode de Monte Carlo*/
    ifstream stream("pdf1.5m0v1.dat");
    i=0;double tr;
    while(stream){
        stream>>x[i]>>tr>>res[0][i];
        if (!stream) break;
        stream.get(cc);
        while(cc==' '){
            if (!stream) break;
            stream>>tr;
            stream.get(cc);
        }
    }
}

```

```

        if (cc=='\n'){break;}
    }
    dim=i;
    if(dim+1>=dimen)break;
    i++;
}
dim--;
cout<<"x="<<x[0]<<"      C="<<res[0][0]<<endl;
stream.close();

dx=x[2]-x[1];
c=-dt/(2*cos(alpha*pi/2.)*pow(dx,alpha));
ap(a_p, c);

/*On vérifie la condition de stabilité du schéma*/

if(v!=0 && dx>pow((6+3*alpha*(alpha-1)-alpha*(alpha-1)*(2-alpha))/
    (30*v*abs(cos(pi*alpha/2.))),1./(1-alpha)))
    cout<<"La condition de stabilité n'est pas sataisfaite.
        Veuillez redéfinir dx"<<pow((6+3*alpha*(alpha-1)-alpha*(alpha-1)*
*(2-alpha))/(30*v*abs(cos(pi*alpha/2.))),1./(1-alpha))<<endl;

if(dt>pow(dx,alpha)*abs(cos(pi*alpha/2.))/alpha)
    cout<<"La condition du stabilité n'est pas sataisfaite.
        Veuillez redéfinir dt"<<pow(dx,alpha)*abs(cos(pi*alpha/2.))/
    alpha<<endl;

for(i=dim;i<dimen;i++)x[i]=x[i-1]+dx;
for(i=0;i<=dim;i++) {
    C[0][i]=res[0][i];
}

/*On calcule la concentration de l'instant 1+dt au temps time*dt */
for(t=1;t<=time;t++){
    for(i=1;i<=dim-2;i++){
        y=-v*dt*(-3*res[0][i]+4*res[0][i+1]-res[0][i+2])/(2*dx);

```

```

    y+=res[0][i]*(1+a_p[0]+a_p[2*i]);
    if(i==1) y+=res[0][0]*(a_p[1]);
    else y+=res[0][i-1]*(a_p[1]+a_p[2*i-1]);
    y+=res[0][i+1]*(a_p[1]+a_p[2*i+1]);
    for(p=2;p<=dim;p++){
        if(v!=0)
{if(i+p<=dim && i!=1) y+=res[0][i+p]*(a_p[p]+a_p[2*i+p]);}
        else {if(i+p<=dim) y+=res[0][i+p]*(a_p[p]+a_p[2*i+p]);}
        if(i-p>0) y+=res[0][i-p]*(a_p[p]+a_p[2*i-p]);
        if(i-p==0) y+=res[0][i-p]*a_p[p];
    }
    res[1][i]=y;
}
res[1][0]=res[1][1];
res[1][dim]=res[1][dim-2];
res[1][dim-1]=res[1][dim-2];

/*On augmente l'intervalle de calcul si le résultat à la limite de
l'intervalle du calcul res[2][dim] est devenu plus grand que la
petite constante e*/
if(fabs(1-res[0][int(dim/2.)]/res[1][int(dim/2.)])<pow(10,-10))break;
if(fabs(res[1][dim])>e){
    bb=log(res[1][dim]/res[1][dim-5])/(pow(x[dim],2)-pow(x[dim-5],2));
    a=res[1][dim]*exp(-bb*pow(x[dim],2));
    x_der=sqrt(fabs(log(e/a)/bb));
    nach=int((x_der-x[dim])/dx);
    if(nach<=2 || dimen<=dim+nach);
    else{
        for(i=dim+1;i<=dim+nach;i++) res[1][i]=0;
        dim+=nach;
    }
}

/*On enregistre le résultat res vers C si t est entier*/
if(t%d_time==0){
    for(i=0;i<dimen;i++) C[j_time][i]=res[1][i];
}

```

```

    cout<<"t="<<1+t*dt<<"    C="<<res[1][0]<<"    dim="<<dim<<endl;
    j_time++;
}
for(i=0;i<=dim;i++) res[0][i]=res[1][i];
} //la fin du cycle en temps

/*Ecriture dans fichier: le premier colonne correspond à x,
   les colonnes suivantes
   correspondent à la concentration aux temps=1,2,...*/
sprintf(nomext,"%s",nom);
strcat(nomext,".dat");
ofstream stream1(nomext);
for(i=0;i<dim;i++){
    stream1<<x[i]<<' ';
    for(j=0;j<j_time-1;j++) stream1<<C[j][i]<<' ';
    stream1<<C[j_time-1][i]<<endl;
}

stream1.close();
cout1.close();
return 0;

}

```

stabMV.cpp

```

/*=====
La méthode de simulation du comportement
de G du schéma (6.13).
On vérifie que sous les conditions (6.8) et (6.14)
 $G < 1$ .
fi - la fonction de phase entre 0 et  $4\pi$ 
v - la vitesse
alpha - l'ordre fractionnaire du modèle entre 1 et 2
nom - le nom du fichier des résultats
dx - pas de discrétisation en espace
dt - pas de discrétisation en temps
g0,g1,g2 - les premiers coefficients de (6.13)

```

N - la longueur des sommes de (6.13)

```
=====*/
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <stdio.h>
#include <string>
using namespace std;
#define dimen 5010
#define double long double
const double alpha=1.5;
#include "fonctions.h"
double a_p[dimen];

int main(){

    char *nom=new char[30];
    nom="stabMV1.5.dat";
    ofstream stream(nom);
    int k,N=200;
    double fi, sum, sum1, G, v=1;
    double dx=pow(((6+3*alpha*(alpha-1)-alpha*(alpha-1)*(2-alpha))/
        (30*v*abs(cos(pi*alpha/2.))),1./(alpha-1)));
    double dt=pow(dx,alpha)*abs(cos(pi*alpha/2.))/alpha;
    cout<<"dt="<<dt<<"    dx="<<dx<<endl;

    double c=-dt/(2*cos(pi*alpha/2.)*pow(dx,alpha));
    ap(a_p,c);
    a_p[0]=1+a_p[0];

    int j=10;

    double g0,g1,g2;
    g0=a_p[0]+3*v*dt/(2*dx)+a_p[2*j];
    g1=a_p[1]-2*v*dt/dx+a_p[2*j+1];
    g2=a_p[2]+v*dt/(2*dx)+a_p[2*j+2];
```

```

    sum=g0+g2+g1;
/*On calcule la somme des coefficients de (6.13).
Elle tend vers 1 lorsque N tend vers l'infini*/
    for(k=3;k<N;k++)
        sum+=a_p[k]+a_p[2*j+k];
    for(k=1;k<j;k++)
        sum+=a_p[k]+a_p[2*j-k];
    sum+=a_p[j];
    cout<<"SUM(a)="<<sum<<endl;
    cout<<"g="<<g0<<" , "<<g1<<" , "<<g2<<endl;

/*On calcule G en fonction de fi*/
    for(fi=0;fi<=4*pi;fi+=pi/50.){
//la partie réelle de G
        sum=g0+g1*cos(fi)+g2*cos(2*fi)+a_p[j];
        for(k=3;k<=N;k++)
            sum+=(a_p[k]+a_p[2*j+k])*cos(fi*k);
        for(k=1;k<j;k++)
            sum+=(a_p[k]+a_p[2*j-k])*cos(fi*k);

//la partie imaginaire de G
        sum1=g1*sin(fi)+g2*sin(2*fi);
        for(k=3;k<=N;k++)
            sum1+=(a_p[k]+a_p[2*j+k])*sin(fi*k);
        for(k=1;k<j;k++)
            sum1-=(a_p[k]+a_p[2*j-k])*sin(fi*k);

        G=sqrt(pow(sum,2)+pow(sum1,2));
        stream<<fi<<' '<<G<<endl;
    }
    stream.close();
    return 0;
}

```

exactTemps.cpp

```

/*La solution exacte de l'équation fractionnaire en temps
la solution est en forme d'intégrale (voir le paragraphe 7.2)

```

```

sur l'intervalle [0,1]
La donnée initiale est sin(pi x) (le vecteur u_ini)*/

#include <cmath>
#include <fstream>
#include <iostream>
using namespace std;
#include "fonctions.h"

/*=====
Définition des variables:
beta - l'ordre d'opérateur de Caputo (0 < beta < 1)
dimen - la taille des matrices
t - le temps du modèle
dx - le pas d'espace
dim - la dimension de l'intervalle de calcul
x - le vecteur de discrétisation de l'intervalle de calcul
integral - la méthode de l'intégration
Temps - la classe définissant le noyau d'intégration
Mittag_Leffler - la classe définissant la fonction
                de Mittag-Leffler
=====*/

const double beta=.5;
const int dimen=2000;

int main(){
    int i,j, k;
    double *u_ini,*x;
    double t=20, dx, tmp;
    int dim;

    u_ini=new double[dimen];
    x=new double[dimen];
    double **u=new double*[dimen];
    for(i=0;i<dimen;i++) u[i]=new double[dimen];

```

```

/*La donnée initiale*/
dim=10;
dx=1./dim;
for(i=0;i<=dim;i++){
    x[i]=i*dx;
    u_ini[i]=sin(pi*x[i]);
}

/*la solution en terme de la fonction de Mittag-Leffler*/
ofstream stream("serieTm.dat");
Mittag_Leffler <double, int> M(beta, static_cast<double>(1));
for(k=1;k<=t;k++){
    tmp=M(static_cast<double>(k));
    for(j=0;j<=dim;j++) u[j][k]=sin(pi*x[j])*tmp;
}

for(j=0;j<=dim;j++){
    stream<<x[j]<<' '<<u_ini[j]<<' ';
    for(k=1;k<=t;k++) stream<<u[j][k]<<' ';
    stream<<endl;
}
stream.close();

/*La solution en forme intégrale*/
ofstream stream1("exactTm.dat");
double res, param[5], lambda;
lambda=pi*pi;
/*on définit la méthode d'intégration sur l'intervalle (0,1000)
et on l'associe avec le nom Int*/
integral <double> Int(0.,1000);
/*on définit le noyau d'intégration sous le nom f*/
Temps <double> f;

```

```

for(i=1;i<=t;i++){
    param[1]=static_cast<double>(i);
    param[0]=lambda;

    res=Int(f, param);
    for(j=0;j<=dim;j++)
        u[j][i]=-sin(pi*(beta-1))*pi*u_ini[j]*res;
}

for(j=0;j<=dim;j++){
    stream1<<j*dx<<' '<<u_ini[j]<<' ';
    for(i=1;i<t;i++) stream1<<u[j][i]<<' ';
    stream1<<u[j][i]<<endl;
}
stream1.close();

for(i=0;i<dimen;i++) delete u[i];
delete x, u_ini, u;
return 0;
}

```

numTemps.cpp

```
/*La solution numérique de l'équation fractionnaire en temps
en utilisant le schéma (7.4).
On part de la donnée initiale  $\sin(\pi x)$  comme on propose
au paragraphe 7.2.*/

#include <math.h>
#include <fstream.h>
#define double long double
/*=====
Définitions des variables:
beta - ordre d'opérateur fractionnaire en temps ( $0 < \beta < 1$ )
t - le temps du modèle
dx - pas d'espace
dim - la dimension de l'intervalle de calcul
x - le vecteur de discrétisation de l'intervalle du calcul
dt - le pas de discrétisation en temps
time - le temps calculé
d_time - nombre d'itérations en temps entre les temps 1 et 2
lambda - la primitive de la matrice A dans (7.4)
=====*/

const double beta=.5, lambda=pi*pi;

/*La fonction coef calcule les coefficients de Pohgammer
de l'argument arg et de l'indice "index" divisé par le factoriel
de l'argument index*/
double coef(int index, double arg){
    double poh=arg-1.;
    for(int ip=2;ip<=index;ip++) poh*=(ip-2.+arg)/ip;
    return poh;
}

void main(){

    double time=20, dx=0.05, dt=0.05;;
```

```

    int i, j, dim=20, d_time=20;
    double u_ini[dim+1], x[dim+1], u[4000];

    /*la donnée initiale*/
    for(i=0; i<=dim; i++){
        x[i]=i*dx;
        u_ini[i]=sin(pi*x[i]);
    }

    ofstream stream("numTm.dat");
    for(j=0; j<=dim; j++){
        /*On calcule le temps t=1*/
        u[1]=u_ini[j]/(1.+lambda*pow(dt,beta));
        stream<<x[j]<<' '<<u_ini[j]<<' ';
        /*On calcule les temps suivant*/
        for(i=2; i<int(time/dt); i++){
            u[i]=0.;
            for(int ii=2; ii<=i-1; ii++)
                u[i]+=u[i-ii]*coef(ii, beta);

            u[i]*=-lambda*pow(dt,beta);
            u[i]+=u[i-1]*(1.+lambda*(1.-beta)*pow(dt,beta));
            u[i]/=1.+lambda*pow(dt,beta);
        }
        /*On enregistre le résultat si l'instant de temps calculé
        est entier*/
        if(i%d_time==0) stream<<u[i]<<' ';
    }
    stream<<endl;
}
stream.close();
}

```

fonctions.h

```

/* Des fonctions incluses */

const double pi=4.*atan(1.);
const int n_gauss=7;

```

```

const double ksi[n_gauss]={-0.949107912342759,-0.741531185599394,
    -0.405845151377397,0.000000000000000,0.405845151377397,
    0.741531185599394,0.949107912342759, };
const double a[n_gauss]={ 0.129484966168870, 0.279705391489277,
    0.381830050505119, 0.417959183673469, 0.381830050505119,
    0.279705391489277, 0.129484966168870, };

/*=====
La fonction ap crée les coefficients de schémas numériques
pour l'équation fractionnaire en espace
a - le vecteur de coefficients
mu - la constante c de (6.2)
=====*/
template <class T> void ap(T *a, const T& mu)
{
    T koef1;
    int i;
    a[0]=-mu*2*alpha;
    a[1]=mu*(1+alpha*(alpha-1)/2.);
    koef1=alpha*(alpha-1)/2.;
    for(i=2;i<dimen;i++){
        koef1*=(i-alpha)/(i+1);
        a[i]=mu*koef1;
    }
}

/*=====
La méthode de Gauss de la solution du système des équations linéaires
coeff - la matrice des coefficients de dimension (col,col)
bf - le vecteur du côté droit des équations
gaus - le vecteur contenant la solution
=====*/
template <class T, class I> void Gauss(T coeff[dimen][dimen], T *bf,
    const I& col, T *gaus){
    T koef1, koef2;

    I i,j,l,ll;

```

```

    for(i=0;i<=col;i++){
        koef1=coeff[i][i];
        bf[i]=bf[i]/koef1;
        for(j=0;j<=col;j++) koef[i][j]=coeff[i][j]/koef1;
        for(l=i+1;l<=col;l++) gaus[l]=coeff[l][i];
        for(l=i+1;l<=col;l++){
bf[l]=bf[l]-bf[i]*gaus[l];
for(ll=0;ll<=col;ll++)
            koef[l][ll]=coeff[l][ll]-coeff[i][ll]*gaus[l];
        }
    }
    gaus[col]=bf[col];
    for(i=col-1;i>=0;i--){
        for(j=col;j>i;j--) bf[i]=bf[i]-coeff[i][j]*gaus[j];
        gaus[i]=bf[i];
    }
}

```

/*=====

Classe integral définit la méthode d'intégration de Gauss-Legendre.

A - la limite inférieure d'intégration

B - la limite supérieure d'intégration

func - la fonction d'intégration

param - le vecteur des paramètres supplémentaires

ksi - les poids de Gauss-Legendre

a - les abscisses de Gauss-Legendre

=====*/

```

template <class T> class integral{
    T A,B,step;
public:
    integral(const T& _A, const T& _B) : A(_A), B(_B){}
    ~integral(){}

```

```

template <class func> T operator () (const func& f, const T *param)
{

```

```

    T k, p, gl_sum=0., Int=0., eta, gl_ksi, step;
    step=0.0001;
    int jj;
    for(k=A;k<=B-step;k+=step){
p=k+step;
for(jj=0;jj<n_gauss;jj++){
    gl_ksi=step*ksi[jj]/2.+p+step/2.;
    eta=step*f(gl_ksi, param)/2.;
    gl_sum+=a[jj]*eta;
}
Int+=gl_sum;
gl_sum=0.;
    }
    return Int;
}
};

```

```

/*=====
La classe int_gamma définit le noyau de l'intégrale
pour calculer la fonction Gamma de l'argument f_z
=====*/

```

```

template <class T> class int_gamma {
    T f_z;
public:
    int_gamma(const T& _f_z) : f_z(_f_z) {}
    T operator () (const T& ksi, const T *param) const
    {
        return exp(-ksi)*pow(ksi,f_z-1.);
    }
};

```

```

/*=====
La fonction ma_gamma calcule la fonction Gamma
en intégrant le noyau défini par la classe "int_gamma".
On integre par la méthode "integrale"
=====*/

```

```

template <class T> T ma_gamma(const T& g_z)

```

```

{
  T g_res=0.;
  T A0=0, B0=fabs(g_z)*50, param[5];
  integral <T> Int(A0,B0);
  if(g_z>1){
    int_gamma <T> g(g_z-int(g_z)+1);
    g_res=Int(g,param);
    for(int g_i=1;g_i<=int(g_z)-1;g_i++)
      g_res*=(g_z-g_i);
  }
  else{
    int_gamma <T> g(fabs(g_z)+1);
    g_res=Int(g,param)/fabs(g_z);
    if(g_z<0)g_res=-pi/(g_res*g_z*sin(pi*g_z));
  }
  return g_res;
}

/*=====
La fonction fact calcule le factoriel de "index"
=====*/
template <class I> inline I fact(const I& index){
  I f=1;
  for(I ip=1;ip<=index;ip++) f*=ip;
  return f;
}

/*=====
La fonction f_po calcule le coefficient de Pochhammer d'argument "arg"
divisé par le factoriel de "index"
=====*/
template <class I, class T> void f_po(T *res, const I& index, const T& arg)
{
  res[0]=1.;
  for(I i=1;i<=index;i++) res[i]=res[i-1]*(arg-i+1)/i;
}

/*=====
La classe "Riesz" définit le noyau de l'intégrale de la solution

```

```

de l'équation fractionnaire en espace en milieu infini
x - la variable d'espace physique
y - la variable d'integration
===== */
template <class T> class Riesz {
    T x;
public:
    Riesz(const T& _x) : x(_x) {}
    T operator () (const T& y, const T *param) const
    {
        return cos(x*y)*exp(-pow(y,alpha));
    }
};
/*=====
La classe Temps définit le noyau de l'intégrale de la solution
de l'équation fractionnaire en espace en milieu infini.
L'impulsion initial est donnée par sin(n\pi x).
f_ksi - la variable d'intégration
param - le vecteur de parametres supplémentaires
param[1] - le temps calculé
=====*/
template <class T> class Temps {
public:
    T operator () (const T& f_ksi, const T *param) const {
        return pow(f_ksi,beta-1.)*exp(-f_ksi*param[1])/(pow(f_ksi,2*beta)+
            2*cos(pi*beta)*pow(f_ksi,beta)+pow(pi,4));
    }
};
/*=====
La classe définissant la fonction de Mittag-Leffler
en forme de série. Ses paramètres sont index1,index2
=====*/
template <class T, class I> class Mittag_Leffler
{
    T gam[3000], ind1, ind2;
    I i;

```

```

public:
Mittag_Leffler(const T& index1, const T& index2):
    ind1(index1), ind2(index2){
    I N=static_cast<I>(-log(0.0000000001)/log(pi*pi*pow(0.1,ind1)));
    gam[0]=1;
    for(i=1;i<=N;i++) {
        if(-ind1*i+ind2==0)gam[i]=pow(10,10);
        else gam[i]=ma_gamma(-ind1*i+ind2);
    }
}

~Mittag_Leffler(){
    delete[] gam;
}

T operator () (const T& time) const {
    I i;
    T mttg, tmp;
    I N=static_cast<I>(-log(0.0000000001)/log(pi*pi*pow(time,ind1)));
    cout<<"N="<<N<<endl;
    mttg=-1./(gam[1]*(-pi*pi*pow(time,ind1)));
    for(i=2; i<=10; i++){
        mttg=1./(gam[i]*pow(-pi*pi*pow(time,ind1),i));
    }
    return mttg;
}
};

```

* La solution exacte de l'équation (4.2) en milieu infini en terme de la fonction Fox (4.7)

α - l'ordre de l'opérateur fractionnaire

$\alpha = \frac{n}{d}$, avec d, n rationnels

"space1.5.dat" - le fichier contenant x dans la première colonne
et les vecteurs de la concentration pour les instants
de temps 1, 2 ... 10 dans les colonnes suivantes

dim - la taille de domaine du calcul

e1, e2, f1, f2 - les vecteurs définis dans (4.7)

res - la matrice contenant le résultat

(* _____ *)

```
Clear[c1, c, ini, x, x1, res, res1, t, n, d,  $\alpha$ , time];
```

```
SetDirectory["/home/math/"];
```

```
<< LinearAlgebra`MatrixManipulation`
```

```
d = 2;
```

```
n = 3;
```

```
 $\alpha$  = 1.5;
```

```
x = Range[-3, 3, 0.2];
```

```
x = Flatten[x];
```

```
dim = Length[x];
```

(* _____ *)

```
e1 = Table[ $1 - \frac{i-1+\frac{d}{n}}{2*d}$ , {i, 1, 50}];
```

```
For[i = 1, e1[[i]]  $\geq \frac{1-\frac{d}{n}}{2*d}$ , p = i; i++]
```

```
e1 = Take[e1, p];
```

```
e2 = Table[ $\frac{\frac{1}{2}+i-1}{n}$ , {i, 1, 50}];
```

```
For[i = 1, e2[[i]]  $\leq 1 - \frac{1}{2*n}$ , p = i; i++]
```

```
e2 = Take[e2, p];
```

```
e = Flatten[{e1, e2}];
```

(* _____ *)

```
f1 = Table[ $\frac{i-1}{2*n}$ , {i, 1, 60}];
```

```
For[i = 1, f1[[i]]  $\leq 1 - \frac{1}{2*n}$ , p = i; i++]
```

```
f1 = Take[f1, p];
```

```
f2 = Table[ $1 - \frac{i-\frac{1}{2}}{n}$ , {i, 1, 60}];
```

```
For[i = 1, f2[[i]]  $\geq \frac{1}{2*n}$ , p = i; i++]
```

```
f2 = Take[f2, p];
```

```
f = Flatten[{f1, f2}];
```

(* _____ *)

```
c = (2*d)0.5- $\frac{d}{n}$  * (2* $\pi$ )-d * (2*n)-0.5;
```

```
a1 = Take[e, {1, 2*d}];
```

```
a2 = Take[e, {2*d+1, 2*d+n}];
```

```
a3 = Take[f, {1, 2 * n}];
a4 = Take[f, {2 * n + 1, 3 * n}];

c = c * MeijerG[{a1, a2}, {a3, a4}, (2 * d)2*d * (2 * n)-2*n * (Abs[x])2*n];
res = {}; res = Append[res, x]; res = Append[res, c];
For[t = 1, t ≤ 10, c1 = c * t-1/α; x1 = x * t1/α; res = Append[res, x1];
  res = Append[res, c1]; Print[t]; t++]

res = Transpose[res];
Export["space1.5.dat", res, "Table"]

Null
```

* La solution exacte de l'équation (4.9) en milieu infini en terme de la fonction Fox (4.12)

β - l'ordre de l'opérateur fractionnaire

$\beta = \frac{d}{n}$, avec d et n rationnels

"mg0.5t1" - le fichier contenant x comme la première colonne
et le vecteur de concentration pour l'instant
du temps t comme la deuxième colonne

dim - la taille de domaine de calcul

e1, e2, f1 - les vecteurs définis dans (4.12)

res - la matrice contenant le résultat

(*-----*)

```
Clear[u, ini, x, res, res1, t, n, d,  $\beta$ ];
```

```
SetDirectory["/home/math/"]
```

```
<< LinearAlgebra`MatrixManipulation`
```

```
<< Graphics`MultipleListPlot`
```

```
x1 = Range[-10, -0.00001, 0.1];
```

```
x2 = Range[0.00001, 10, 0.1];
```

```
x = Flatten[{x1, x2}];
```

```
dim = Length[x];
```

```
t = 1;
```

```
d = 1;
```

```
n = 2;
```

```
 $\beta$  = 0.5;
```

(*-----*)

```
e1 = Table[ $1 - \frac{2 * i - 1}{2 * n}$ , {i, 1, 3 * n}];
```

```
For[i = 1, e1[[i]] >=  $\frac{1}{2 * n}$ , p = i; i++]
```

```
e1 = Take[e1, p];
```

```
e2 = Table[ $1 - \frac{i}{n}$ , {i, 1, 3 * n}];
```

```
For[i = 1, e2[[i]] ≥ 0, p = i; i++]
```

```
e2 = Take[e2, p];
```

```
e = Flatten[{e1, e2}];
```

(*-----*)

```
f1 = Table[ $1 - \frac{i}{d}$ , {i, 1, 2 * d}];
```

```
For[i = 1, f1[[i]] ≥ 0, p = i; i++]
```

```
f1 = Take[f1, p];
```

```
f = Flatten[{f1}];
```

(*-----*)

$$c = \frac{\sqrt{2 * n * d}}{\beta * (\text{Abs}[x])} * (2 * \pi)^{0.5 * (d - 2 * n)};$$

```
a1 = Take[e, {1, 2 * n}]
```

```
a2 = {}
```

```
a3 = {}
```

```
a4 = Take[f, {1, d}]
```

```
u = c * MeijerG[{a1, a2}, {a3, a4},  $\frac{N[d^{-d} n^{2 * n} * t^d * 2^{2 * n}]}{(\text{Abs}[x])^{2 * n}}$ ];
```

```
res = Table[{Part[x, i], Part[u, i]}, {i, dim}];
```

```
Export["mg0.5t1", res, "Table"];
```

```
ListPlot[res, PlotJoined -> True, PlotRegion -> Automatic];
```

```
Null
```

*** Calcul de la distribution
(et de la densité) des particules.
Pas de temps discret,
distribution de longueur des saut α -
stable (voir l'annexe E).
Domaine semi-infini.**

```
<< "Statistics`"
<< "LinearAlgebra`"
$Packages;

SetDirectory["/home/math/"];
(*-----*)

La fonction RSL calcule la longueur des sauts, dont la distribution
est  $\alpha$ -stable
X - longueur d'un saut
 $\alpha$  - ordre de distribution, entre 1 et 2
V - variable aléatoire réelle, distribuée entre  $-\frac{\pi}{2}$  et  $\frac{\pi}{2}$ 
W - variable aléatoire, distribuée exponentiellement
avec moyenne égale à 1
RSL[ $\alpha$ _] :=
Module[{V, W, X},
  RandomExponential[ $\lambda$ _] := Random[ExponentialDistribution[1]];
  V = Random[Real, {- $\frac{\pi}{2}$ ,  $\frac{\pi}{2}$ });
  W = RandomExponential[1];
  X =  $\left( \frac{\text{Sin}[\alpha V]}{(\text{Cos}[V])^{1/\alpha}} \right) \left( \frac{\text{Cos}[V - \alpha V]}{W} \right)^{(1-\alpha)/\alpha}$ ;
  Return[X];
]
(*-----*)

Définition des variables de calcul :
 $\alpha$  - ordre de la loi stable, entre 1 et 2
v - la vitesse
dt - temps d'attente entre les deux sauts
T - nombre d'itérations en temps
step - nombre des itérations entre le temps 1 et 2
Q - nombre des particules (trajectoires)
x0 - la position de l'impulsion initiale
p1 - la matrice du dimension (Q, T) contenant les trajectoires
m, M - les frontières de l'intervalle de calcul
d - pas de discrétisation en espace
dim - longueur de l'intervalle de la discrétisation
(*-----*)
```

```

 $\alpha = 1.5;$ 
 $v = 0;$ 
 $T = 72;$   $dt = 0.1;$ 
 $Q = 15000;$   $step = 10;$ 
 $x0 = 5;$ 
 $p1 = {};$ 
 $M = 20;$ 
 $m = 0;$ 

(* _____ *)
(*Tirage de Q trajectoires de T sauts pour chaque une
  r - la position d'une particule après un saut
      (avec ou sans advection)
  s1 - normalisation d'une longueur de saut par temps d'attente dt
  p - la trajectoire de j-ème particule *)
For[j = 1, j ≤ Q, p = {x0}; r = x0;
  For[i = 1, i ≤ T, s1 = N[RSL[ $\alpha$ ] * (dt^(1/ $\alpha$ ))];
    r = Abs[r + s1] + v*dt; If[Mod[i, step] = 0, p = Append[p, r], i++];
  p1 = Append[p1, p]; Clear[p, i, s, s1, r], j++]
(* _____ *)

(*Enregistrement dans le fichier "distrdt0.0001.dat"*)
Export["distrdt0.1.dat", p1 ]

d = 0.2;
dim = IntegerPart[(M - m) / d];
T = 6;

(* _____ *)
(*Calcule de la densité *)
pd = Table[If[x == 0, N[Length[Select[Select[Flatten[p1[[All, {i}]]], # ≥ (x) &],
  # < (x + d) &]] / (Q*d)],
  N[Length[Select[Select[Flatten[p1[[All, {i}]]], # ≥ (x - 0.5*d) &],
  # < (x + 0.5*d) &]] / (Q*d)], {i, 1, T}, {x, m, M, d}];

x = Table[x, {x, m, M, d}];
pd = Prepend[pd, x];
pd = Transpose[pd];

Export["pdfdt0.1d0.2.dat", pd ]

pd1 = Table[0, {i, 1, dim}, {j, 1, T + 1}];
pd1 = MovingAverage[pd, 5];

Clear[ $\alpha$ , Q, T, j, i, v, x, p1, p, pd, pd1, d, k, dt, m, M, x0]

```