Observables, processus stochastiques et équations aux dérivées partielles associés à la dispersion en milieu hétérogène

M.C. Néel, M. Joelson, mécaniciens
S H Rakotonasy, thésard Univ. d'Avignon
C. Choquet, mathématicienne, Univ. La Rochelle
M.Fleury, physicien, **V. Guillon, thésard**
Institut Français du Pétrole et des Energies Nouvelles

Le mouvement Brownien et l'équation de la diffusion sont des modèles communément utilisés pour la dispersion dans les milieux homogènes. Dans de nombreux milieux hétérogènes (milieux poreux non saturés, tissus biologiques, le sol), ils doivent être aménagés pour tenir compte d'effets de mémoire. Ces derniers se traduisent par l'impression que le milieu stocke puis relâche une partie de la matière qui le traverse, selon une cinétique incompatible avec des temps caractéristiques finis.

On dispose de modèles théoriques pour cela. Alors que dans le cas homogène, le mouvement Brownien décrit les mouvements individuels des particules fluides, on représente les effets de mémoire en imposant des immobilisations de durée aléatoire, distribuées par une loi de Lévy. La position de chaque particule est alors décrite par un processus obtenu à partir du mouvement Brownien en incluant un changement de temps aléatoire. La densité spatiale de ces particules vérifie une équation aux dérivées partielles très semblable à l'équation de la diffusion, mais qui se signale par un opérateur non-local en temps. En plus d'une vitesse moyenne et d'une diffusivité, elle comporte deux paramètres qui sont l'exposant de stabilité et un facteur d'échelle pour la loi de Lévy représentant les immobilisations. Certaines expériences montrent qu'un tel modèle est nécessaire, cependant il ne sera réellement utilisable que si on est capable d'aller jusqu'à la mesure de ces paramètres. Les expériences de traçage, qui consistent à mesurer la densité d'un traceur introduit dans le milieu, sont indispensables pour cela. Mais la Résonance Magnétique Nucléaire est une alternative très interessante, incontournable et de plus en plus utilisée.

Cependant, les outils théoriques qui ont permis sont succès dans le cadre du mouvement Brownien et des milieux homogènes font défaut pour identifier avec précision des effets de mémoire, non inclus dans ce modèle. La vélocimétrie RMN mesure des observables différentes de l'habituelle densité spatiale de particules: dans les conditions de résonance magnétique, chaque molécule d'eau émet un signal $e^{ia(t)}$ dont la phase $a(t)$ peut être vue comme l'intégrale $a(t) = \int_0^t u(x(t'), t')dt'$ d'une fonction u de la position et du temps (elle-même une composante du champ magnétique), effectuée le long de sa trajectoire $x(t')$. On mesure la somme de tous ces signaux, donc finalement l'espérance mathématique $< e^{ia(t)} >$ où $a(t)$ est entièrement déterminée par le processus $x(t')$ (t' allant de l'instant 0 jusqu'à l'instant t). La statistique du processus $a(t)$ établit le lien entre les paramètres du transport, et ce qu'on mesure par RMN. Nous l'abordons, autant que possible directement, mais aussi par l'intermédiaire de la densité conjointe des positions x et des valeurs de a. Deux types de résultats sont présentés.

Il y a d'une part des résultats théoriques sur la forme des signaux mesurés. Dans des conditions bien précises (trop) ils mettent en évidence une propriété remarquable associée aux effets de mémoire. La simulation numérique étend la portée de ceci à des conditions plus faciles à réaliser expérimentalement. L'état instantané de chaque particule est, d'autre part, décrit par sa position $x(t)$ et par la valeur $a(t)$ de son intégrale de chemin. Donc, l'état de l'ensemble est décrit par la densité conjointe des deux variables x et a. Dans le cas du mouvement Brownien, cette densité verifie une équation de Feynman-Kac, très semlable à l'équation de la diffusion, avec une variable indépendante a en plus de x et t. Dans le cas du mouvement Brownien aléatoirement retardé, qui représente des effets de mémoire, cette équation doit être modifiée par un opérateur non-local en temps, transposé par des translations dans le direction de la variable supplémentaire a.

Après avoir rappelé l'essentiel des modèles stochastiques pour les effets de mémoire, nous présentons ce qu'ils impliquent pour le signal mesuré par RMN. Nous détaillons la démarche conduisant dans ce cas à une équation de type Feynman-Kac fractionnaire, ainsi que ce qu'on peut en attendre dans la pratique.